

Bit 可逆アルゴリズムを用いた数値的不可逆性の分子動力学的研究

○ 小松信義¹, 安部隆士^{1,2}

¹ 東京大学大学院工学系研究科 航空宇宙工学専攻 (〒113-0033 東京都文京区本郷 7-3-1)

² 宇宙科学研究所 (〒229-8510 神奈川県相模原市由野台 3-1-1)

Abstract: 丸め誤差により発生する分子動力学法 (MD) の数値的不可逆性を検討するため, 厳密な時間可逆性を有する Bit 可逆アルゴリズムを用いて, 系の非平衡度, 不安定性の観点から解析を行い, 適切なノイズを用いることで浮動小数点演算の丸め誤差が模擬できることが示された。

1. はじめに: ミクロな系の可逆性からマクロな系の不可逆性を説明するため, 19 世紀半ばに Boltzmann は H 定理による不可逆性の証明を試みたが, H 定理は力学の可逆性に基づく Loschmidt の可逆性パラドックス等の本質的な批判を受けた。1967 年, Orban, Bellemans は, この可逆性パラドックスを検討するため, MD を用いて系の時間発展の途中で全粒子の速度反転操作を行った[1]。その結果, 丸め誤差により系が初期状態に復帰しないことが示されたが, この丸め誤差が数値的不可逆性に与える定量的な特性は依然不明である。一方, 近年, 不可逆性に関して Chaos 理論に基づき系の不安定性が論じられている。但し, 仮に系の不安定性と不可逆性の間に相関があるのなら, こうした浮動小数点演算を用いた MD(Float MD) による不安定性解析の妥当性にも疑問が生じる。従って, 本研究では, 丸め誤差の影響を除去した厳密な時間可逆性を有する Bit 可逆アルゴリズム (Bit MD) [2] を用いて, 数値的不可逆性, 系の不安定性の検討を試みる。

2. 解析方法, 結果: 非平衡な初期状態から平衡状態へと時間発展する系を用いて, 時間発展の途中のある時刻 t_{rev} において全粒子を速度反転する時間反転問題を考える。ここで, 系の非平衡度の評価には Boltzmann の H 関数,

$$H = \int f \ln f \, dv \quad (1)$$

を用いる (f : 速度分布関数)。本解析は, 周期境界条件を課した正方形セルによる古典的な 2 次元 micro canonical 解析である。はじめに非平衡な初期状態として直交格子に粒子を配置し, 全粒子に等しい大きさの速度を任意方向に与える。分子間力は Lennard-Jones ポテンシャルの斥力部分のみを考慮し, 粒子数 $N=1600$, 数密度 $\rho=0.25[\sigma^{-2}]$, 温度 $T=2.0[\epsilon/\kappa_B]$, 時間刻み $\tau=0.01[\sigma(m/\epsilon)^{1/2}]$ とする。尚, Bit MD はセル長 L , 整数 M で定義する最小格子幅 (L/M) の離散空間を用いる。従って, 粒子は離散空間内の格子上のみを移動し, 整数演算化とこの離散空間化により厳密な時間可逆性が保証される。

時間反転操作による H 関数の時間発展を比

較すると Float MD (32bit) は, Orban らの指摘通り, 時間反転時刻 t_{rev} が大きくなると H 関数が初期値に復帰しないが, 演算精度が同程度の Bit MD (30bit-integers) では, H 関数が $t=2t_{rev}$ で初期値に完全に復帰する (図 1)。従って, Float MD の丸め誤差を模擬するため, この時間可逆な Bit MD に定量的なノイズ (全時間ステップに全粒子を最小格子幅分だけ任意方向にシフト) を与える。尚, 系の可逆性の喪失度を評価するため, H 関数の復帰度 R_R を新たに定義する。

$$R_R = dH / H \quad (2)$$

時刻反転時刻 t_{rev} をパラメータとして両者の R_R を比較すると, 浮動小数点演算の丸め誤差は Bit MD に適切なノイズを付加することで模擬できることが分かる (図 2)。尚, ノイズ効果, 不安定性については講演会にて報告する。

参考文献

- [1] J. Orban, A. Bellemans, Phys. Lett., **24A**, 620(1967).
[2] D. Levesque, L. Verlet, J.Stat. Phys., **72**, 519(1993).

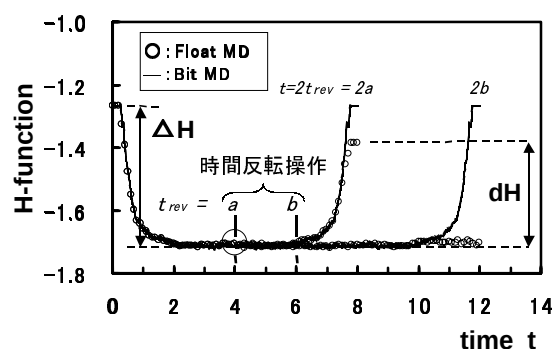


図 1 時間反転操作による H 関数の時間発展

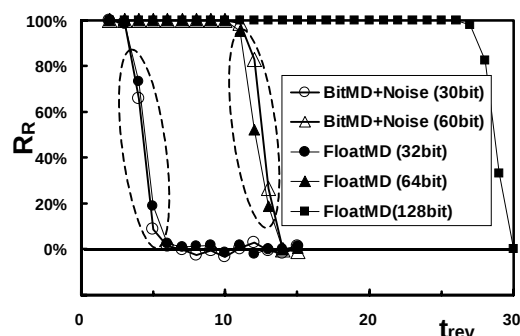


図 2 演算精度と H 関数の復帰度 R_R