講座 粒子運動論～惑星から荷電粒子まで

4．応　　用

4.3　分子動力学における能勢熱浴とシンプレクティック数値積分

4.3 The Nosé Thermostat and Symplectic Integrator in Molecular Dynamics

伊藤篤史

ITO Atsushi M.

核融合科学研究所ヘリカル研究部

（原稿受付：2014年12月6日）

分子動力学法では温度や圧力などを制御して現実環境を模擬することが要求される．ここでは温度制御のための代表的な手法として能勢熱浴を紹介する．能勢熱浴は粒子の位置・運動量に加えて，熱浴変数を正準変数に加えた拡張 Hamiltonian を定義することで系の力学を記述する．粒子の全エネルギーは保存量ではなくなるが，粒子がカノニカル分布を取るように運動する．また，拡張 Hamiltonian に対応した symplectic 数値積分法が導出できる．拡張 Hamiltonian 系の応用は幅広く，プラズマ分野にとっても有用な方法となることを期待する．

Keywords:

symplectic integrator, Nosé thermostat, molecular dynamics, temperature control, simulation

4.3　分子動力学における能勢熱浴とシンプレクティック数値積分

原子・分子スケールの現象を取り扱うシミュレーション手法の一つに分子動力学法（Molecular Dynamics: MD）がある．核融合研究においては材料研究等において用いられる．

MD では対象となる原子の移動や振動のタイムスケールが非常に短いため，タイムステップとして 10^{-18} s から 10^{-16} s という非常に小さな値を設定することになる．それと関連して，実際の時間発展では10^8ステップ以上の時間積分を行うことがざらである．そのため，長期に渡る数値安定性を数学的に担保できる symplectic 数値積分法は必要不可欠な技術であり，MD 分野においては大変普及が進んでいる．

MD の世界で symplectic 数値積分法が普及した理由はもう一つある．それは能勢熱浴[1,2]に代表される拡張 Hamiltonian 系の存在である．

材料物質を対象としたシミュレーションでは，実験との対応のためにも，温度や圧力といった環境の再現が重要である．そのような需要の中，symplectic 差分法より一足早い1980年代に，Andersen による圧力制御法[3]や能勢による温度制御法（能勢熱浴）が相次いで提案された．中でも能勢熱浴は，定温環境を実現するだけでなく，カノニカル分布を数学的に導出可能であることが大変興味深い点である．これらの手法により，MD の現実の系への適応力は飛躍的に向上し，様々な分野へ応用が進む礎となった．

Andersen の圧力制御法や能勢熱浴法は，Hamiltonian をもつ保存系であったことから，拡張 Hamiltonian 系と呼ばれ，その後も数々の拡張 Hamiltonian が提案された．拡張 Hamiltonian 系における保存量は我々が住んでいる“現実”のエネルギーとは異なるが，シミュレーションをする上で保存量が存在するというのは数値安定性の確認の意味で大変有用である．

1990年になり，吉田[4]や鈴木[5]によって symplectic 数値積分法が提案された．symplectic 数値積分法は Hamiltonian 系に対する時間発展差分方程式を導出するものであるが，それは上記の拡張 Hamiltonian 系であっても対象となる．そのため，拡張 Hamiltonian 系の圧力制御や温度制御の MD を行う際には，合わせて symplectic 数値積分法を用いるのが慣習となっている．

さて，ここからは具体的な拡張 Hamiltonian 系の例として，MD 分野で最も魅力的な手法である能勢熱浴とその symplectic 数値積分法を紹介しよう．

まず，能勢熱浴を実現する能勢の Hamiltonian は次で定義される：

$$H_{\rm N}=\sum_{\rm i}\frac{\boldsymbol{p}_{\rm i}^{2}}{2m_{\rm i}s^{2}}+U(\boldsymbol{r})+\frac{p_{\rm s}^{2}}{2Q}+gk_{\rm B}T\log s \qquad (1)$$

ここで，粒子の位置 $\boldsymbol{r}_{\rm i}$，運動量 $\boldsymbol{p}_{\rm i}$ に加えて，熱浴自由度 s，およびその共役運動量 $p_{\rm s}$ が正準変数である．加えて，粒子の質量 m_i，熱浴質量 Q，系の自由度 g，ボルツマン定数 $k_{\rm B}$，設定温度 T がパラメータとなる．

ここで，能勢の Hamiltonian における $\boldsymbol{r}_{\rm i}$，$\boldsymbol{p}_{\rm i}$ は“仮想系”の位置と運動量であり，我々の住む“現実系”の位置 $\boldsymbol{r}'_{\rm i}$

National Institute for Fusion Science, Toki, GIFU 509-5292, Japan

author's e-mail: ito.atsushi@nifs.ac.jp

©2015 The Japan Society of Plasma Science and Nuclear Fusion Research

と運動量 $\boldsymbol{p}'_{\rm i}$ とは次の関係があるものとする：

$$\boldsymbol{r}'_{\rm i}=\boldsymbol{r}_{\rm i} \quad (2)$$

$$\boldsymbol{p}'_{\rm i}=\frac{\boldsymbol{p}_{\rm i}}{s} \quad (3)$$

ただし，仮想系と現実系でどちらにプライム記号を付けるかは，論文や書籍によってもバラつきがあるので注意されたし．

さて，位置座標はそのままだが，運動量は$1/s$でスケーリングされている．これは，空間スケールは変えずに，時間スケールを変えたことに対応する．すなわち，仮想系の（正準変数の従う）時間間隔 $\mathrm{d}t$ と，現実系の時間間隔 $\mathrm{d}t'$ の間にも以下の変換を仮定する：

$$\mathrm{d}t'=\frac{1}{s}\mathrm{d}t \quad (4)$$

ここで，時間を$1/s$倍したにもかかわらず，［空間／時間］の次元をもつ運動量は何故 s 倍ではないのかと思う読者がいるかもしれない．しかし，［空間／時間］の次元をもつ量は速度であり，上記の変換により速度は $\mathrm{d}\boldsymbol{r}'_{\rm i}/\mathrm{d}t'=s\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}_{\rm i}/\mathrm{d}t$ と確かに s 倍される．ここで，Lagrangianの運動エネルギー項が $K=\sum_{\rm i} m_{\rm i}(\mathrm{d}\boldsymbol{r}'_{\rm i}/\mathrm{d}t')^2/2=\sum_{\rm i} m_{\rm i}(s\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}_{\rm i}/\mathrm{d}t)^2/2$ であることを考えれば，仮想系の運動量は定義より $\boldsymbol{p}_{\rm i}=\dfrac{\partial K}{\partial(\mathrm{d}\boldsymbol{r}_{\rm i}/\mathrm{d}t)}=s^2 m_i(\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i/\mathrm{d}t)$ となり，現実系の運動量 $\boldsymbol{p}'_{\rm i}=m_{\rm i}(\mathrm{d}\boldsymbol{r}'_{\rm i}/\mathrm{d}t')$ との間に式（3）の変換が課されるのである．

それでは，能勢のHamiltonianにおいてどのように温度が制御されるのかをみるために，運動方程式を導出しよう．式（1）のHamiltonianから正準変数 $\boldsymbol{r}_{\rm i}$，$\boldsymbol{p}_{\rm i}$，s，$p_{\rm s}$ に関する正準運動方程式を導くと

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_{\rm i}}{\mathrm{d}t}=\frac{\boldsymbol{p}_{\rm i}}{m_{\rm i}s^2} \quad (5)$$

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}_{\rm i}}{\mathrm{d}t}=-\frac{\partial U(\boldsymbol{r})}{\partial\boldsymbol{r}_{\rm i}} \quad (6)$$

$$\frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t}=\frac{p_{\rm s}}{Q} \quad (7)$$

$$\frac{\mathrm{d}p_{\rm s}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{s}\left[\sum_{\rm i}\frac{\boldsymbol{p}_{\rm i}^2}{m_{\rm i}s^2}-gk_{\rm B}T\right] \quad (8)$$

となる．式（8）において，運動エネルギーと設定温度の差に反応して，熱浴変数 p_s，さらには s が変化することが見て取れる．ただし，N 粒子系であれば，$g=3N$ と設定する．設定温度よりも運動エネルギーが大きい場合は，熱浴変数 s が大きくなることで運動量をスケーリングして運動エネルギーを減少させ，一方で設定温度よりも運動エネルギーが小さい場合は，熱浴変数 s が小さくなることで運動エネルギーを増加させるのである．

さらにわかりやすくするために，ここから現実系の変数 $\boldsymbol{r}'_{\rm i}$，$\boldsymbol{p}'_{\rm i}$，$s'=s$，$p'_{\rm s}=p_{\rm s}$ に対する運動方程式へ変換しよう．式（4）から，$\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t'}=\dfrac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}t'}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}=s'\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}$ であることを用いれば，

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}'_{\rm i}}{\mathrm{d}t'}=s'\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_{\rm i}}{\mathrm{d}t}=\frac{\boldsymbol{p}'_{\rm i}}{m_{\rm i}} \quad (9)$$

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}'_{\rm i}}{\mathrm{d}t'}=s'\frac{\mathrm{d}(\boldsymbol{p}_{\rm i}/s)}{\mathrm{d}t}=-\frac{\partial U(\boldsymbol{r}')}{\partial\boldsymbol{r}'_{\rm i}}-\frac{p'_{\rm s}}{Q}\boldsymbol{p}'_{\rm i} \quad (10)$$

$$\frac{\mathrm{d}s'}{\mathrm{d}t'}=s'\frac{p'_{\rm s}}{Q} \quad (11)$$

$$\frac{\mathrm{d}p'_{\rm s}}{\mathrm{d}t'}=\left[\sum_i\frac{\boldsymbol{p}'^2_{\rm i}}{m_{\rm i}}-gk_{\rm B}T\right] \quad (12)$$

が得られる．これらを熱浴のない通常の粒子の運動方程式と比較してみると，粒子の位置座標に関する運動方程式は全く変わらない．粒子の運動量に関する運動方程式は，ちょうど抵抗係数を $p'_{\rm s}/Q$ とした抵抗が掛かったものになっている．さらに，抵抗係数 $p'_{\rm s}/Q$ は，式(12)によって運動エネルギーと設定温度の差を反映して正負の値を取り，運動エネルギーが設定温度よりも高い場合は抵抗として働き，運動エネルギーが設定温度よりも低い場合は加速機構として働く．このようにして，能勢のHamiltonianに従う粒子運動は，運動エネルギーが設定温度付近に留まるように熱浴変数によって制御されることがわかる．

ところで，現実系の変数の運動方程式だけをみるなら，変数 s' は式(11)によるそれ自身の発展を除いて必要ない．そこで，抵抗変数 $\xi=p'_{\rm s}/Q$ とおいて，変数 $\boldsymbol{r}'_{\rm i}$，$\boldsymbol{p}'_{\rm i}$，ξ だけの運動方程式を用いて温度制御を行うNosé-Hoover熱浴[6]も有名である．

注意点を上げておくと，能勢熱浴の保存量は式（1）のHamiltonianの“値”であって（仮想系のエネルギーといってもいいかもしれないが），現実系の粒子の全エネルギー，すなわち，運動エネルギー K とポテンシャルエネルギー $U(r')$ の和は保存しない．しかし，全エネルギーの保存を捨てても，温度を制御したい場合は応用研究においては多々ある．定温実験環境はそもそもエネルギー保存系ではないのだから．

それよりも，能勢熱浴の魅力的な点は，定温環境の実現に加えて，粒子のカノニカル分布を実現できる点にある．symplectic数値積分法へ移る前に，このことをみておこう．

式（1）の能勢のHamiltonianは $6N+2$ 次元位相空間の関数である．それを強調する意味で改めて $H(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},s,p_s)$ と書くことにする．ここで，エルゴード仮定が成り立つとすれば，系の状態を示す位相点は $6N+2$ 次元位相空間上でエネルギー一定の曲面上を一様に塗りつぶすように運動することが期待される．すなわち，この位相点によるミクロカノニカル集団の分配関数は次で与えられる：

$$Z=\frac{1}{N!}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}^N\mathrm{d}\boldsymbol{p}^N\mathrm{d}s\,\mathrm{d}p_{\rm s}\delta[H(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},s,p_{\rm s})-E] \quad (13)$$

ただし，位相空間のエネルギー一定値を E とした．続いて，積分変数を仮想系の変数 $\boldsymbol{r}_{\rm i}$，$\boldsymbol{p}_{\rm i}$，s，$p_{\rm s}$ から現実系の変数 $\boldsymbol{r}'_{\rm i}$，$\boldsymbol{p}'_{\rm i}$，s'，p'_s へと変換する．変数変換におけるJacobianを考えれば，

$$Z=\frac{1}{N!}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}'^N \mathrm{d}\boldsymbol{p}'^N \mathrm{d}s'\mathrm{d}p_\mathrm{s}' \times s'^{3N}\delta[H(\boldsymbol{r}', s'\boldsymbol{p}', s', p_\mathrm{s}')-E] \tag{14}$$

となる．ここで，デルタ関数の公式

$$\delta[f(s')]=\frac{\delta(s'-s_0)}{|f'(s_0)|} \tag{15}$$

を用いる．ただし，s_0 は $f(s_0)=0$ の解である．式(14)のデルタ関数を変数 s' に関するものとみなせば，

$$s_0=\exp\left\{-\frac{1}{gk_\mathrm{B}T}\left[\sum_\mathrm{i}\frac{\boldsymbol{p}_\mathrm{i}'^2}{2m_\mathrm{i}}+U(\boldsymbol{r}')+\frac{p_\mathrm{s}'^2}{2Q}-E\right]\right\} \tag{16}$$

である．これを代入して，熱浴変数についての積分を実行すると，

$$\begin{aligned}Z&=\frac{1}{gk_\mathrm{B}TN!}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}'^N \mathrm{d}\boldsymbol{p}'^N \mathrm{d}p_\mathrm{s}' \\ &\quad\times\exp\left\{-\frac{3N+1}{gk_\mathrm{B}T}\left[\sum_\mathrm{i}\frac{\boldsymbol{p}_\mathrm{i}'^2}{2m_\mathrm{i}}+U(\boldsymbol{r}')+\frac{p_\mathrm{s}'^2}{2Q}-E\right]\right\} \\ &=\frac{C}{N!}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}'^N \mathrm{d}\boldsymbol{p}'^N \exp\left\{-\frac{1}{k_\mathrm{B}T}\left[\sum_\mathrm{i}\frac{\boldsymbol{p}_\mathrm{i}'^2}{2m_\mathrm{i}}+U(r')\right]\right\}\end{aligned} \tag{17}$$

が得られる．ただし，今度は $g=3N+1$ とおき，

$$C=\frac{1}{g}\left(\frac{2\pi Q}{k_\mathrm{B}T}\right)^{1/2}\exp\left(\frac{E}{k_\mathrm{B}T}\right) \tag{18}$$

とした．こうして，現実系の変数だけの分配関数は式(17)の様にカノニカル分布を取ることができる．すなわち，能勢熱浴を用いて時間発展のシミュレーションを行い，物理量の粒子平均を取れば，それはNVTアンサンブル平均に等しいことが期待できる．

ここで，誤解をなくすために，いくつか注意事項を述べておく．まず，上述の変形によってカノニカル分布を満たすのはあくまで正準変数がエルゴード仮定を満たす場合である．これまでの熱浴の研究から，シミュレーション可能な計算時間の範囲では能勢熱浴は必ずしもエルゴード性を持たないことがわかっており，カノニカル分布を実現できない場合がある．それを解決する手段としては，Nosé-Hoover熱浴形式としてから，熱浴の運動量にさらに別の熱浴を連続して連ねるNosé-Hoover-chain熱浴[7]等の方法がある．

次に，定数 g に関して，運動方程式において温度制御する際には，式(8)もしくは式(12)において，$g=3N$ とするのが理想であると述べた．しかし，カノニカル分布の実現においては，$g=3N+1$ とすることを必要とした．この矛盾は，仮想系と現実系の間の時間のずれに起因するものである．しかし，能勢熱浴の発展形である，Nosé-Poincaré熱浴[8, 9]を用いれば，時間のずれは解消し，定数 g に関する矛盾も解消する．

さて，いよいよsymplectic数値積分法に進もう．

能勢熱浴のsymplectic数値積分法では，式(1)のHamiltonianを次の部分Hamiltonianに分割する．

$$H_1=\sum_\mathrm{i}\frac{\boldsymbol{p}_\mathrm{i}^2}{2m_\mathrm{i}s^2}+gk_\mathrm{B}T\log s \tag{19}$$

$$H_2=U(\boldsymbol{r})+\frac{p_\mathrm{s}^2}{2Q} \tag{20}$$

さらに，これらの部分Hamiltonianに対応した部分Liouvillianは

$$iL_1=\sum_j\frac{\boldsymbol{p}_j}{m_js^2}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}_j}+\left[\sum_j\frac{\boldsymbol{p}_j^2}{m_js^3}-\frac{gk_\mathrm{B}T}{s}\right]\frac{\partial}{\partial p_\mathrm{s}} \tag{21}$$

$$iL_2=-\sum_j\frac{\partial U(\boldsymbol{r})}{\partial\boldsymbol{r}_j}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{p}_j}+\frac{p_s}{Q}\frac{\partial}{\partial s} \tag{22}$$

となる．

部分Liouvillianを用いれば，実際の時間発展差分方程式を得ることができる．任意の物理量 A に関して微小時間 τ だけ時間を進める操作はLiouvillian iL を用いて

$$\begin{aligned}A(t+\tau)&=\exp\left(\int_t^{t+\tau}iL\,\mathrm{d}t'\right)A(t)\\ &\sim\exp(\tau iL_1+\tau iL_2)A(t)\end{aligned} \tag{23}$$

と近似できる．ここでTrotterの公式[10]を用いれば，n 次精度のsymplectic差分式として，

$$A(t+\tau)=\left[\prod_\mathrm{k}^n\exp(c_\mathrm{k}\tau iL_1)\exp(d_\mathrm{k}\tau iL_2)\right]A(t)+O(\tau^{n+1}) \tag{24}$$

が得られる．係数 c_k，d_k は次数 n に依存して決まる．例えば，よく使われる二次精度のsymplectic差分式では次の様になる．

$$A(t+\tau)=\exp\left(\frac{\tau}{2}iL_1\right)\exp(\tau iL_2)\exp\left(\frac{\tau}{2}iL_1\right)A(t)+O(\tau^3) \tag{25}$$

ここで，物理量 A として，正準変数 $\boldsymbol{r}_\mathrm{i}$，$\boldsymbol{p}_\mathrm{i}$，$s$，$p_\mathrm{s}$ を選べば，それぞれに関する時間発展差分方程式が得られる．

ここでの本質は，本来は式(23)に示す一度の演算だったものを，式(24)によって部分Liouvillian毎の複数回の演算に分割できたことである．

実際に，式(21)，(22)で定義した能勢熱浴の場合の部分Liouvillianによる時間発展差分方程式をみてみよう．部分Liouvillian iL_1 による時間発展差分方程式は，

$$\exp(\tau iL_1)\boldsymbol{r}_j=\boldsymbol{r}_j+\tau\frac{\boldsymbol{p}_j}{m_js^2} \tag{26}$$

$$\exp(\tau iL_1)\boldsymbol{p}_j=\boldsymbol{p}_j \tag{27}$$

$$\exp(\tau iL_1)s=s \tag{28}$$

$$\exp(\tau iL_1)p_s=p_s+\frac{\tau}{s}\left[\sum_j\frac{\boldsymbol{p}_j^2}{m_js^2}-gk_\mathrm{B}T\right] \tag{29}$$

となる．また，部分Liouvillian iL_2 による時間発展差分方程式は

$$\exp(\tau iL_2)\boldsymbol{r}_j=\boldsymbol{r}_j \tag{30}$$

$$\exp(\tau iL_2)\boldsymbol{p}_j = \boldsymbol{p}_j - \tau\frac{\partial U(r)}{\partial \boldsymbol{r}_j} \tag{31}$$

$$\exp(\tau iL_2)s = s + \tau\frac{p_s}{Q} \tag{32}$$

$$\exp(\tau iL_2)p_s = p_s \tag{33}$$

となる．ここで得られた時間発展差分方程式は数値計算の際にそのままの形式でコード化することができる．例えば二次精度のsymplectic時間積分を行いたい場合には，式(26)-(29)のiL_1の演算において，$\tau \rightarrow \tau/2$と置き換えてやればよい．

式(26)-(33)で行った部分Liouvillianによる演算では，近似することなく右辺が有限項までで収まっていることが重要な点である．これにより，微小時間τが非無限小であることによる誤差は，式(24)のTrotter展開の部分で発生し，部分Liouvillianの演算では誤差は発生していない．有限項までで収まる理由は，個々の部分Liouvillianが一部の正準変数に対する偏微分演算子だけをもつためである．また，同じ理由により，部分Liouvillianに偏微分演算子を持たない一部の正準変数は全く時間発展しないこともわかる．

言い換えれば，部分Liouvillianによる時間発展演算が全ての正準変数に対して有限項までの既知の関数で収まるようにHamiltonianを分割することがsymplectic数値積分法の胆である．通常の粒子系のHamiltonianであれば，部分Hamiltonianとして，単純に運動エネルギーKとポテンシャルエネルギーUに分割すればよい．しかし，能勢熱浴の様な拡張Hamiltonian系においては，どのような部分Hamiltonianで分割すればよいかは，試行錯誤が必要である．例えば，先に紹介したNosé-Poincaré熱浴では，部分Hamiltonianとして3つに分割しなければならない．

もう一つ注意点を述べておくと，必ず先に部分Hamiltonianへ分割してから対応する部分Liouvillianを作らなければならない．式(24)を見れば，Liouvillianさえ分割できていれば，部分Hamiltonianは必要ないように感じるかもしれない．しかし，勝手に定義した部分Liouvillianに対して，必ずしも対応するHamiltonianが存在するとは限らない．例えば，部分Liouvillianとして$iL_j = -\frac{\partial U(\boldsymbol{r})}{\partial \boldsymbol{r}_j}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}_j}$を勝手に定義しても，対応する部分Hamiltonianを作ることはできない．その時の問題は，対応する部分Hamiltonianの存在しない部分Liouvillianを用いて時間発展差分方程式を構築した場合に，それはsymplectic条件を満足しないということである．詳細は省くが，symplecticな時間発展差分方程式が欲しければ，必ず部分Hamiltonianから定義しなければならない．

ところで，MDを用いた応用研究では，開いた境界条件などを課す場合も多く，非平衡条件下での温度制御が必要となる．その場合には，Hamiltonianを定義することはできないが，上記で導いた時間発展差分方程式を利用すれば，温度制御をすることが一応は可能である．例えば，プラズマ－壁相互作用のシミュレーションにおいては，プラズマ照射対象となる材料の底付近の原子は上記の差分法を用いて温度を一定に保ち，表面から流れてくる熱を吸収させたりする．もちろん，その様な非平衡条件下の場合には，Hamiltonianが定義できないので，温度制御は可能であっても，symplectic性は失われている．しかしながら，位相空間の体積を保存した（measure preserving）時間発展差分方程式という点では意味がある．

さて，温度制御を行う能勢熱浴のHamiltonianと，そのsymplectic時間積分法を紹介した．分子動力学の研究分野には，これ以外にも拡張Hamiltonian系が多数存在する．圧力制御法としては先に紹介したAndersenの方法や，より適応性の高いParrinello-Rahmanの方法[11,12]がある．能勢熱浴では運動量をスケーリングすることで温度を制御したが，圧力制御法では位置座標をスケーリングすることで圧力や応力を制御する．また，これらの温度制御法や圧力制御法を組み合わせたHamiltonianを定義することで，温度と圧力を同時に制御することが可能である．その場合にも，Hamiltonianが存在するので対応したsymplectic時間発展差分方程式を導出することが可能である．また，最近では複数の温度制御法と圧力制御法を組み合わせる手段として，より一般化した手法も提案されている[13]．一連の拡張Hamiltonian系に関するより詳細な議論は，上田顕先生による教科書[14]等，分子動力学シミュレーション向けの資料を参照されたし．

最後に，本年は能勢熱浴の発表からちょうど30周年にあたる年で，本稿執筆期間中には30周年記念国際シンポジウムNOSE30が開催された．大変残念ながら能勢先生は若くしてお亡くなりになられていたため，チェアーは能勢先生の最後の弟子であり現在の拡張Hamiltonian系の研究を牽引していらっしゃる森下徹也先生が務められた．海外からもHoover先生，Parrinello先生など著名人が多数参加し，大変盛況な会となった．このように日本のMD研究が注目されているのは，MD分野で最も普及している計算手法である能勢熱浴とsymplectic差分法が共に日本発の手法であったためだと強く感じる．

このような記念の年に，本節を執筆する機会を与えてくださり，また，不慮の病気で執筆が大変遅れたにもかかわらず最後まで信じてお待ちいただいた古川勝先生はじめ，本小特集の著者の先生方，編集員の皆様に深く感謝申し上げます．材料シミュレーションのみならず，プラズマシミュレーションにおいても，拡張Hamiltonian系によって新しい展開がもたらされることを期待しています．

参考文献

[1] S. Nosé, Mol. Phys. **52**, 255 (1984).
[2] S. Nosé, J. Chem. Phys. **81**, 511 (1984).
[3] H.C. Andersen, J. Chem. Phys. **72**, 2384 (1980).
[4] H. Yoshida, Phys. Lett. **A 150**, 262 (1990).
[5] M. Suzuki, Phys. Lett. **A146**, 319 (1990).
[6] W.G. Hoover, Phys. Rev. **A 31**, 1695 (1985).
[7] G.J. Martyna *et al.*, J. Chem. Phys. **97**, 2635 (1992).
[8] S.D. Bond *et al.*, J. Comp. Phys. **151**, 114 (1999).
[9] S. Nosé, J. Phys. Soc. Jpn. **70**, 75 (2001).
[10] H.F. Trotter, Proc. Amer. Math. Soc. **10**, 545 (1956).
[11] M. Parrinello and A. Rahman, Phys. Rev. Lett. **45**, 1196

(1980).
［12］ M. Parrinello and A. Rahman, J. Appl. Phys. **52**, 289 (1981).
［13］ T. Morishita, Mol. Phys. **108**, 1337 (2010).
［14］ 上田 顕：分子シミュレーション－古典系から量子系手法まで－（裳華房，2003）.

い とう あつ し
伊 藤 篤 史

核融合科学研究所ヘリカル研究部基礎物理シミュレーション研究系准教授．主な研究分野はプラズマ−壁相互作用の理論・シミュレーション研究．昨年は多くの皆様にご心配とご迷惑お掛けしましたが，おかげさまでだいぶ良くなりました．最近の楽しみは妻と 2 歳の息子とガンダムを見ることです．研究活動においても，元気でいられるからこそチャレンジできる，ということを日々実感しています．