

velocity Verlet 法

みそ

平成 20 年 12 月 28 日

1 velocity Verlet 法

分子動力学法の一つに Verlet 法があるが、この方法では速度を求めずに、粒子の運動をシミュレートする事ができた。だが、分子動力学法を行うときは、たいてい速度を求める必要があるだろう。そのためのシミュレーション方法の一つに、velocity Verlet 法がある。これは、速度も求めていくために Verlet 法を改良した方法であり、やり方に大きな違いはない。

以下では、velocity Verlet 法に必要な方程式を求めていく。まず、式に出てくる文字に

$$m_i, \mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i, \mathbf{f}_i \quad (1.1)$$

があるが、それぞれの意味は、 i 番目の粒子の質量、位置ベクトル、速度ベクトル、粒子に作用する力である。

$\mathbf{r}_i(t+h)$ をテイラー展開すると

$$\mathbf{r}_i(t+h) = \mathbf{r}_i(t) + h \frac{d\mathbf{r}_i(t)}{dt} + \frac{1}{2!} h^2 \frac{d^2\mathbf{r}_i(t)}{dt^2} + \frac{1}{3!} h^3 \frac{d^3\mathbf{r}_i(t)}{dt^3} + \dots \quad (1.2)$$

と書けるが、位置ベクトルの 1 階微分は速度ベクトル、2 階ベクトルは力ベクトルを質量で割ったもので書けるから、

$$\mathbf{r}_i(t+h) = \mathbf{r}_i(t) + h\mathbf{v}_i(t) + \frac{h^2}{2m} \mathbf{f}_i(t) \quad (1.3)$$

となる。ただし、 h^3 以上の次数項は無視した。

次に $\mathbf{v}_i(t+h)$ をテイラー展開する。

$$\mathbf{v}_i(t+h) = \mathbf{v}_i(t) + h \frac{d\mathbf{v}_i(t)}{dt} + \frac{1}{2!} h^2 \frac{d^2\mathbf{v}_i(t)}{dt^2} + \frac{1}{3!} h^3 \frac{d^3\mathbf{v}_i(t)}{dt^3} + \dots \quad (1.4)$$

速度ベクトルの 1 階微分は力ベクトルを質量で割ったもので書けるので、 h^3 以上の次数項を無視すると

$$\mathbf{v}_i(t+h) = \mathbf{v}_i(t) + \frac{h}{m} \mathbf{f}_i(t) + \frac{h^2}{2m} \frac{d\mathbf{f}_i(t)}{dt} \quad (1.5)$$

となる。さらに

$$\frac{d\mathbf{f}_i(t)}{dt} = \frac{\mathbf{f}_i(t+h) - \mathbf{f}_i(t)}{h} \quad (1.6)$$

を利用して書き直すと

$$\mathbf{v}_i(t+h) = \mathbf{v}_i(t) + \frac{h}{2m} (\mathbf{f}_i(t+h) + \mathbf{f}_i(t)) \quad (1.7)$$

となる。

以上で、位置ベクトルを求める式 (1.3) と速度ベクトルを求める式 (1.7) が求まったが、velocity Verlet 法ではこの 2 つの式を使って、シミュレーションを行う。