

# Verlet 法

みそ

平成 20 年 12 月 21 日

## 1 Verlet 法

分子動力学法の一つに Verlet 法がある。分子動力学法の中では、比較的簡単な方法なので、分子動力学法の入門に最適な方法である。まずは、Verlet 法を行うにあたって必要な方程式を導く。

まず、後の式に出てくる文字には

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

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。

$i$  番目の粒子の運動方程式は

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i(t)}{dt^2} = \mathbf{f}_i \quad (1.2)$$

と書ける。

この運動方程式を、次の 2 つのテイラー展開を用いて、代数方程式にする。

$$\mathbf{r}_i(t+h) = \mathbf{r}_i(t) + h \frac{d\mathbf{r}_i(t)}{dt} + \frac{1}{2!} h^2 \frac{d^2 \mathbf{r}_i(t)}{dt^2} + \frac{1}{3!} h^3 \frac{d^3 \mathbf{r}_i(t)}{dt^3} + \dots \quad (1.3)$$

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

この 2 つのテイラー展開式から、2 階の微分項について解き、 $h$  の 2 次以上の項は無視すると、次のように書ける。

$$\frac{d^2 \mathbf{r}_i(t)}{dt^2} = \frac{\mathbf{r}_i(t+h) - 2\mathbf{r}_i(t) + \mathbf{r}_i(t-h)}{h^2} \quad (1.5)$$

運動方程式より、2階の微分項を質量と力で表して整理すると

$$\mathbf{r}_i(t+h) = 2\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(t-h) + \frac{h^2}{m_i} \mathbf{f}_i(t) \quad (1.6)$$

となる。この代数方程式に従って粒子の運動を追跡する方法を Verlet 法と呼ぶ。

(1.6)を見ると、粒子の新しい位置を求めるには、時間的に一つ前の粒子の位置情報と、2つ前の粒子の位置情報が必要な事がわかる。これでは、粒子の初期配置をして、次の粒子の位置が求められないので、もう一つ代数方程式を求める必要がある。

そのために、先の2つのテイラー展開式から2階の微分項を消去し速度を求める式

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

を導出する。そして、この式と(1.6)から

$$\mathbf{r}_i(t+h) = \mathbf{r}_i(t) + h\mathbf{v}_i(t) + \frac{h^2}{2m_i} \mathbf{f}_i(t) \quad (1.8)$$

を求める。この式では、新しく粒子の位置を求めるにあたり、時間的に一つ前の粒子の座標が求まるので、この式を使えば、初期配置をしてから次の粒子の位置を求める事ができる。後は、(1.6)を用いて、粒子の位置を求めていけばよい。

## 2 周期境界条件

シミュレーションで Verlet 法を有限の領域で行うのであれば、境界条件を決めなければならない。境界を壁とし、粒子が跳ね返ってくるようにする方法もあるが、境界条件としてよく使われるのは周期境界条件である。この周期境界条件は、様々な物理現象のシミュレーションに用いられており、周期境界条件を用いたシミュレーションの結果は、理論値や実験値と一致することが多い。

周期境界条件を利用するときは、シミュレーション領域のまわりに、おなじシミュレーション領域が存在すると仮想する。シミュレーション領域が四角形であれば、仮想的に存在するシミュレーション領域は8つある事になる。さらに外側には仮想的なシミュレーション領域が存在する

が、周期境界条件を考えるにあたっては、1つのシミュレーション領域と、そのまわりに存在する8つの仮想的シミュレーション領域を考えれば十分である。また、仮想的シミュレーションで起きる現象は、もちろんシミュレーション領域と同じである。

シミュレーションにおいて、周期境界条件として行う操作方法の1つとして、粒子がシミュレーション領域から外側に飛び出したときは、飛び出した境界と反対側にある境界から入って来るとする処理がある。

2つ目として、粒子 $i$ と粒子 $j$ との相互作用を計算する場合などでは、シミュレーション領域内にある粒子 $j$ と、仮想的シミュレーション領域にある8つの粒子 $j$ の中で、最も近くにある粒子 $j$ との距離をとる処理がある。