分子動力学シミュレーション事始め

山内 仁喬

2022 年 10 月 4 日

1　ミクロカノニカルアンサンブルでのシミュレーション

一般に物理系の位相空間は座標 $\boldsymbol{r}$ と運動量 $\boldsymbol{p}$ で張られ, そのハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\boldsymbol{p}_i^2}{2m_i} + U(\boldsymbol{r}) \tag{1}$$

と表される. このハミルトニアン $\mathcal{H}$ に対する運動方程式は, 正準方程式より

$$\frac{d\boldsymbol{r}_i}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \boldsymbol{p}_i} = \frac{\boldsymbol{p}_i}{m_i} \tag{2}$$

$$\frac{d\boldsymbol{p}_i}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \boldsymbol{r}_i} = -\frac{\partial U(\boldsymbol{r})}{\partial \boldsymbol{r}_i} = \boldsymbol{F}_i \tag{3}$$

で書かれる. $\boldsymbol{F}_i$ は i 番目の粒子に働く力である. 運動方程式を数値的に解くことでミクロカノニカルアンサンブルが得られる.

2　2 体力近似

粒子間の相互作用に 2 体力近似

$$U(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N) = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j>i}^{N} u(r_{ij}) \tag{4}$$

を用いることが多い. 特によく用いられる 2 体相互作用としてレナード・ジョーンズポテンシャル

$$u(r) = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6} \right\} \tag{5}$$

が用いられる. 第 1 項目は斥力を表している. この項の 12 乗は物理に基づいて得られた乗数ではないため実際には 13 乗や 14 乗を用いても良い. 一方, 第 2 項目は分散力に基づく項である. 電子雲の揺らぎによる一時的多極子-誘起双極子間の相互作用から得られるため必ず 6 乗を使用する. レナードジョーンズポテンシャルは希ガスの気体・液体・固体の相転移などの現象をよく再現することが知られている.

3　単位の無次元化・単位換算

計算機シミュレーションでは, 様々な物理量を無次元化した換算単位で表すことが多い. これは実単位系における値が計算機で扱うには大きい, あるいは小さすぎることがあるからである. 問題とする系に対して代表的な量を単位として表すことで, 全ての量が物質に依存するパラメータを一切含まない形で調べることができ

る．エネルギーと時間の次元は

$$[\text{エネルギー}] = \frac{[\text{質量}][\text{長さ}]^2}{[\text{時間}]^2} \tag{6}$$

であるから, 時間の次元は

$$[\text{時間}] = \sqrt{\frac{[\text{質量}]\cdot[\text{長さ}]^2}{[\text{エネルギー}]}} \tag{7}$$

と表せる．この次元をもとに換算単位を求める．

3.1 SI 単位系

SI 単位系での基本単位の定義は以下の通りになる:

$$\begin{aligned} &[\text{長さ}] = \mathrm{m}\ (\text{メートル}) && [\text{重さ}] = \mathrm{kg}\ (\text{キログラム}) \\ &[\text{時間}] = \mathrm{s}\ (\text{秒}) && [\text{温度}] = \mathrm{K}\ (\text{ケルビン}) \\ &[\text{電流}] = \mathrm{A}\ (\text{アンペア}) \end{aligned}$$

エネルギーの単位は次のようになる:

$$\mathrm{J}\ (\text{ジュール}) = 1\mathrm{kg\ m^2\ s^{-2}} \tag{8}$$

$$\mathrm{eV}\ (\text{電子ボルト}) = 1e\mathrm{J} \tag{9}$$

$$\mathrm{cal}\ (\text{カロリー}) = 4.184\ \mathrm{J} \tag{10}$$

その他の物理系の単位は次のようになる:

$$\text{力}\ (\mathrm{N}) = \mathrm{m\ kg\ s^{-2}} \tag{11}$$

$$\text{圧力}\ (\mathrm{Pa}) = \mathrm{N\ m^{-2}} \tag{12}$$

$$\text{仕事}\ (\mathrm{J}) = \mathrm{N\ m} \tag{13}$$

$$\text{電荷}\ (\mathrm{C}) = \mathrm{A\ s} \tag{14}$$

$$\text{電位}\ (\mathrm{V}) = \mathrm{J\ C^{-1}} \tag{15}$$

3.2 レナードジョーンズ単位系

レナードジョーンズ (LJ) パラメータの LJ ポテンシャルの深さ ϵ, LJ 粒子の直径 σ, 粒子の質量 M をそれぞれエネルギー, 長さ, 質量の単位とする:

$$\begin{aligned} \epsilon &= [\text{エネルギー}] \\ \sigma &= [\text{長さ}] \\ M &= [\text{質量}] \end{aligned}$$

したがって, 時間の単位は τ は

$$\tau = \sqrt{\frac{M\sigma^2}{\epsilon}} \tag{16}$$

となる．例えば Ar 原子の場合,

$$
\begin{aligned}
\sigma &= 0.34 \times 10^{-9}\mathrm{m} \\
\epsilon &= 120 k_{\mathrm{B}} = 1.66 \times 10^{-21}\mathrm{J} \\
M &= 6.6 \times 10^{-26}\mathrm{kg} \\
\tau &= 2.15 \times 10^{-12}\mathrm{s}
\end{aligned}
$$

である．その他の物理量を ϵ, σ, M 単位系で表すと

$$
\begin{aligned}
[\text{速度}] &= \frac{[\text{長さ}]}{[\text{時間}]} = \frac{\sigma}{\tau} \\
[\text{温度}] &= \frac{[\text{エネルギー}]}{k_{\mathrm{B}}} = \frac{\epsilon}{k_{\mathrm{B}}} \\
[\text{運動量}] &= [\text{質量}][\text{速度}] = \frac{M\sigma}{\tau} \\
[\text{圧力}] &= \frac{[\text{力}]}{[\text{面積}]} = \frac{[\text{質量}][\text{加速度}]}{\text{面積}} = \frac{M\frac{\sigma}{\tau^2}}{\sigma^2} = \frac{\epsilon}{\sigma^3}
\end{aligned}
$$

となる．以上を用いると様々な物理量 A の無次元量 A^* を以下のように表せる．

$$
\begin{aligned}
&\text{時間}: & t^* &= \frac{t}{\tau} \\
&\text{ハミルトニアン}: & \mathcal{H}^* &= \frac{\mathcal{H}}{\epsilon} \\
&\text{温度}: & T^* &= \frac{\epsilon}{k_{\mathrm{B}}} \\
&\text{長さ}: & r^* &= \frac{r}{\epsilon} \\
&\text{運動量}: & p^* &= \frac{p}{\frac{M\epsilon}{\tau}} \\
&\text{圧力}: & P^* &= \frac{P}{\frac{\epsilon}{\sigma^3}} \\
&\text{質量}: & m^* &= \frac{m}{M}
\end{aligned}
$$

となる．これらの無次元量をハミルトンの正準方程式 (2)(3) に代入すれば無次元量に対するハミルトンの正準方程式が導かれる．

3.3 生体分子モデルに対する無次元化

生体分子シミュレーションでは

$$
\begin{aligned}
[\text{エネルギー}] &= \mathrm{kcal/mol} &&= 4.184\ \mathrm{kJ/mol} \\
[\text{長さ}] &= \text{Å} &&= 10^{-10}\ \mathrm{m} \\
[\text{質量}] &= \mathrm{amu} &&= \mathrm{g/mol}
\end{aligned}
$$

を基本単位系とすることが多い．この単位系における時間は,

$$[\tau] = \sqrt{\frac{[\mathrm{amu}][\text{Å}]^2}{[\mathrm{kcal/mol}]}} = \sqrt{\frac{[\mathrm{g/mol}][\text{Å}]^2}{[\mathrm{kcal/mol}]}}$$

のような次元を持つ．

全原子分子動力学シミュレーションでは ps あるいは fs を単位時間とすることが多いので, ps を単位時間とした時の単位換算を見ていく．基本単位系を用いて時間を表すと

$$\begin{aligned}[\mathrm{s}] &= \sqrt{\frac{[\mathrm{kg}][\mathrm{m}]^2}{[\mathrm{J}]}} = \sqrt{\frac{1}{10^{-3}}\frac{[\mathrm{kg}][\mathrm{m}]^2}{[\mathrm{kJ}]}} = \sqrt{\frac{1}{10^{-3}}\frac{[\mathrm{kg/mol}][\mathrm{m}]^2}{[\mathrm{kJ/mol}]}} = \sqrt{\frac{10^3}{(10^{-3}/4.184)}\frac{[\mathrm{g/mol}][\mathrm{m}]^2}{[\mathrm{kcal/mol}]}} \\ &= \sqrt{4.184\times 10^{26}}\sqrt{\frac{[\mathrm{g/mol}][\text{Å}]^2}{[\mathrm{kcal/mol}]}} = \sqrt{4.184\times 10^{26}}\ [\tau]\end{aligned}$$

となる．$[\mathrm{s}] = 10^{12}[\mathrm{ps}]$ であるので

$$[\mathrm{ps}] = 10\sqrt{4.184}\ [\tau] \tag{17}$$

を得る．逆に, 生体分子モデルにおける単位時間を実時間に換算すると,

$$[\tau] = \frac{1}{10\sqrt{4.184}}[\mathrm{ps}] = 0.0488\ [\mathrm{ps}] = 48.8\ [\mathrm{fs}] \tag{18}$$

であることが分かる．

3.4 単位換算: エネルギー

以下に, エネルギーの単位換算をまとめる．ここでは $T = 298\mathrm{K}$ であると仮定する．

$$\begin{aligned}1\ \mathrm{kcal/mol} &= 0.04337\ \mathrm{eV} \\ &= 349.75\quad \mathrm{cm}^{-1} \\ &= 1.689\quad k_{\mathrm{B}}T \\ &= 4.184\quad \mathrm{kJ/mol}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}1\ \mathrm{eV} &= 23.06\quad \mathrm{kcal/mol} \\ &= 8064.6\ \mathrm{cm}^{-1} \\ &= 38.94\quad k_{\mathrm{B}}T \\ &= 96.49\quad \mathrm{kJ/mol}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}1\quad k_{\mathrm{B}}T &= 0.5922\quad \mathrm{kcal/mol} \\ &= 0.02568\ \mathrm{eV} \\ &= 207.1\quad \mathrm{cm}^{-1} \\ &= 2.476\quad \mathrm{kJ/mol}\end{aligned}$$

3.4.1 圧力と体積の積 PV に対する単位換算

ここでは、エネルギーの次元を持つ, 圧力と体積の積 PV に対する単位換算を考える。なぜこのような単位換算を考える必要があるのかと言えば, 定温定圧アンサンブルでのシミュレーションを実行して, エンタルピー $H = U + K + PV$ を計算するときに、圧力 P は気圧 (1atm) あるいは Pa, 体積 V は $\mathrm{\mathring{A}}^3$ の単位で与えられ, 一方で kJ/mol あるいは kcal/mol の単位を持ったエネルギー値を必要とすることが多いからである.

以下では, 圧力は Pa, 体積は $\mathrm{\mathring{A}}^3$ の単位で与えられたときの, PV を kJ/mol に単位換算する例を見ていく. なお, 1 気圧は 101,325Pa であるので覚えておくと便利である. まず初めに, 圧力の単位 Pa, PV の単位を SI 単位系で表すと

$$
\begin{aligned}
[\mathrm{Pa}] &= [\mathrm{N\ m^{-2}}] = [\mathrm{kg\ m\ s^{-2}}][\mathrm{m^{-2}}] = [\mathrm{kg\ m^{-1}\ s^{-2}}] \\
[PV\ \text{の単位}] &= [\mathrm{Pa}][\mathrm{m^3}] = [\mathrm{kg\ m^2\ s^{-2}}] = [\mathrm{J}]
\end{aligned}
$$

である. アボガドロ定数 N_A は,

$$
N_\mathrm{A} = 6.02214076 \times 10^{23} \quad \mathrm{mol^{-1}}
$$

であるから,

$$
\begin{aligned}
[PV\ \text{の単位}] = [\mathrm{Pa}][\mathrm{\mathring{A}}^3] &= [\mathrm{kg\ m^{-1}\ s^{-2}}][\mathrm{\mathring{A}}^3] \\
&= [\mathrm{kg\ m^{-1}\ s^{-2}}][(10^{-10}\mathrm{m})^3] \times [6.02214076 \times 10^{23}\ \mathrm{mol^{-1}}] \\
&= 6.02214076 \times 10^{23} \times 10^{-30}\ [\mathrm{kg\ m^2\ s^{-2}/mol}] \\
&= 6.02214076 \times 10^{23} \times 10^{-30}\ [\mathrm{J/mol}] \\
&= 6.02214076 \times 10^{23} \times 10^{-30} \times 10^{-3}\ [\mathrm{kJ/mol}] \\
&= 6.02214076 \times 10^{-10}\ [\mathrm{kJ/mol}]
\end{aligned}
$$

のように単位換算できる.

3.5 単位換算: 静電相互作用の係数

エネルギーの単位を kcal/mol とした時の静電相互作用にかかる係数 $1/(4\pi\epsilon_0)$ の単位換算を考える. ここで ϵ_0 は真空での誘電率である.

$$
\begin{aligned}
\epsilon_0 &= 8.8542 \times 10^{-12} \quad \mathrm{kg^{-1}m^{-3}s^4A^4} \\
&= 8.8542 \times 10^{-12} \quad \mathrm{J^{-1}m^{-1}C^2}
\end{aligned}
$$

またアボガドロ定数 N_A, 電気素量 e はそれぞれ

$$
\begin{aligned}
N_\mathrm{A} &= 6.02214076 \times 10^{23} \quad \mathrm{mol^{-1}} \\
e &= 1.602176634 \times 10^{-19} \quad \mathrm{C}
\end{aligned}
$$

である. 電気素量 e を 1 とする単位系を考え, 具体的に計算をすると

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{4\pi\epsilon_0} &= \frac{1}{4\pi(8.8542\times 10^{-12})} \quad [\mathrm{Jm/C^2}] \\
&= \frac{N_\mathrm{A}\times(4184^{-1}\ \mathrm{kcal})\times(10^{10}\ \mathrm{\AA})\times e^2}{4\pi(8.8542\times 10^{-12})} \\
&= \frac{(6.0221\times 10^{23}\times 4184^{-1}\mathrm{kcal/mol})\times(10^{10}\ \mathrm{\AA})\times(1.6022\times 10^{-19})^2}{4\pi(8.8542\times 10^{-12})} \\
&\simeq 332 \quad [\mathrm{\AA\ kcal/mol}]
\end{aligned}
$$

を得る．エネルギーの単位を $k_\mathrm{B}T$ に取り直す場合, 温度 $T = 300\mathrm{K}$ では

$$
\begin{aligned}
1k_\mathrm{B}T &= (1.380658\times 10^{-23}\ \mathrm{JK^{-1}})\times(300\ \mathrm{K}) \\
&= (1.380658\times 10^{-23}\ \mathrm{K^{-1}})\times(1.43930\times 10^{20}\ \mathrm{kcal/mol})\times(300\ \mathrm{K}) \\
&= 0.5961\ \mathrm{kcal/mol}
\end{aligned}
$$

であるので．

$$
\frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 332 \quad \times 0.5961^{-1} = 556.95 \quad [\mathrm{\AA}\ k_\mathrm{B}T]
$$

となる．

4 周期境界条件

分子シミュレーションでは境界条件として周期境界条件を課すことが多い．つまり, 考えているシミュレーションボックスの周り (前, 後, 左, 右, 手前, 奥) にそのコピーが並んでいるよう状況を考えるのである．運動の結果, 原子がシミュレーションボックスの外に飛び出た場合, 反対側から入ってくるようにする．

シミュレーションセルを並べたときに, 空間が隙間なく埋まるようなセルの形であれば, そのセルを周期境界条件として採用できる．立方体 (cubic)、直方体 (Rectangular)、平行六面体 (Parallelepiped) は最もわかりやすい例であるが, 切頂八面体 (truncated octahedron), 菱形十二面体 (rhombic dodecahedron) などのシミュレーションセルを設定することも可能である [1]．切頂八面体や菱形十二面体は立方体と比較してシミュレーションセルの体積が小さくなるので, CPU 時間を節約できるというメリットがある [2].

よく知られているようにミクロカノニカルアンサンブルでは, エネルギー保存則, 運動量保存則, 角運動保存則が成立する．しかし, 周期境界条件を課した場合, 角運動量保存則は成立しなくなる．これは, 周期境界条件により原子・分子が箱の端から端へ移動すると, 角運動量が不連続に変化するためである．

4.1 立方体, 直方体, 平面六面体

最も基本的な周期境界条件は立方体, 直方体, 平行六面体の形をしたシミュレーションセルを使用することである．以下では一般的な場合として, 3 つの基本並進ベクトル

$$\boldsymbol{a}_1 = (a_{1x}, a_{1y}, a_{1z})^\mathrm{t}, \tag{19}$$

$$\boldsymbol{a}_2 = (a_{2x}, a_{2y}, a_{2z})^\mathrm{t}, \tag{20}$$

$$\boldsymbol{a}_3 = (a_{3x}, a_{3y}, a_{3z})^\mathrm{t} \tag{21}$$

で張られる平行六面体を基本セルとして考えていく．この時, 基本セル中の粒子 j のイメージセルにおける位置ベクトル $\boldsymbol{r}'_j$ は $\boldsymbol{L} = (\boldsymbol{a}_1\ \boldsymbol{a}_2\ \boldsymbol{a}_3)$ と, ある整数の組のベクトル $\boldsymbol{n} = (n_1, n_2, n_3)^{\mathrm{t}}$ を用いて

$$\boldsymbol{r}'_j = \boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{L}\boldsymbol{n} = \boldsymbol{r}_j - (n_1\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_2 + n_3\boldsymbol{a}_3) \tag{22}$$

と書ける．

4.2 切頂八面体 (truncated octahedron)

八面体の場合, 基本並進ベクトルを

$$\boldsymbol{a}_1 = (L, 0, 0)^{\mathrm{t}}, \tag{23}$$

$$\boldsymbol{a}_2 = \left(\frac{1}{3}L, \frac{2\sqrt{2}}{3}L, 0\right)^{\mathrm{t}}, \tag{24}$$

$$\boldsymbol{a}_3 = \left(-\frac{1}{3}L, \frac{\sqrt{2}}{3}L, \frac{\sqrt{6}}{3}L\right)^{\mathrm{t}} \tag{25}$$

のように張れば良い．なお, 切頂八面体のシミュレーションセルの体積は $V = 4\sqrt{3}/9L^3 = 0.770L^3$ である．

4.3 菱形十二面体 (rhombic dodecahedron)

菱形十二面体 (rhombic dodecahedron) は, 2 通りの向きが存在する．一つ目は, xy 平面での断面が正方形になるように交わるような向きである．このときの基本並進ベクトルは

$$\boldsymbol{a}_1 = (L, 0, 0)^{\mathrm{t}}, \tag{26}$$

$$\boldsymbol{a}_2 = (0, L, 0)^{\mathrm{t}}, \tag{27}$$

$$\boldsymbol{a}_3 = \left(\frac{1}{2}L, \frac{1}{2}L, \frac{\sqrt{2}}{2}L\right)^{\mathrm{t}} \tag{28}$$

である．

二つ目は, xy 平面での断面が六角形になるように交わるような向きである．このときの基本並進ベクトルは

$$\boldsymbol{a}_1 = (L, 0, 0)^{\mathrm{t}}, \tag{29}$$

$$\boldsymbol{a}_2 = \left(\frac{1}{2}L, \frac{\sqrt{3}}{2}L, 0\right)^{\mathrm{t}}, \tag{30}$$

$$\boldsymbol{a}_3 = \left(\frac{1}{2}L, \frac{\sqrt{3}}{6}L, \frac{\sqrt{6}}{3}L\right)^{\mathrm{t}} \tag{31}$$

である．なお, 菱形十二面体のシミュレーションセルの体積は $V = \sqrt{2}/2L^3 = 0.707L^3$ である．

5 相互作用のカットオフ

遠くの粒子との相互作用が十分小さくポテンシャルエネルギーに含めてもあまり意味がない場合, 計算コスト削減のために粒子間の相互作用を無視することがある．例えば, 距離 r_{c} 以上離れている粒子間の相互作用を無視する．これを相互作用のカットオフといい, r_{c} をカットオフ半径とかカットオフ距離と言う．カットオフ

半径はシミュレーションセルの一辺の長さ L の半分よりも短く設定する:

$$r_c < \frac{L}{2} \tag{32}$$

相互作用のカットオフについては様々な方法が提案されている．ここではレナードジョーンズ相互作用 $u_{\mathrm{LJ}}(r)$ に対するカットオフを考える．

単純なカットオフ

ポテンシャルをカットオフ半径 r_{c} で打ち切るものである．この方法では $r = r_{\mathrm{c}}$ でポテンシャルが不連続になる．

$$u_{\mathrm{r}}(r) = \begin{cases} u_{\mathrm{LJ}}(r) & r \leq r_{\mathrm{c}} \text{ の時} \\ 0 & r > r_{\mathrm{c}} \text{ の時} \end{cases} \tag{33}$$

カットオフ&シフト

カットオフに加えて, ポテンシャルをシフトすることで $r = r_{\mathrm{c}}$ でポテンシャル関数を連続にする．この方法はポテンシャルの深さが元のポテンシャルと異なることと, $r = r_{\mathrm{c}}$ でも 1 階微分は不連続であることに気をつけなけらばならない．

$$u_{\mathrm{r}}(r) = \begin{cases} u_{\mathrm{LJ}}(r) - r_{\mathrm{LJ}(r_{\mathrm{c}})} & r \leq r_{\mathrm{c}} \text{ の時} \\ 0 & r > r_{\mathrm{c}} \text{ の時} \end{cases} \tag{34}$$

スイッチング関数を用いた方法

なめらかに 0 から 1 まで変化するスイッチング関数 $S(r)$ を用いて, スイッチング開始距離 r_{s} から r_{c} の間でなめらかに 0 に近づくようにする．

$$u_{\mathrm{r}}(r) = \begin{cases} u_{\mathrm{LJ}}(r) & r \leq r_{\mathrm{s}} \text{ の時} \\ u_{\mathrm{LJ}}(r) * S(r) & r_{\mathrm{s}} < r \leq r_{\mathrm{c}} \text{ の時} \\ 0 & r_{\mathrm{c}} < r \text{ の時} \end{cases} \tag{35}$$

スイッチング関数としては, 例えば

$$S(r) = \frac{(r_{\mathrm{c}}^2 - r^2)^2 (r_{\mathrm{c}}^2 + 2r^2 - 3r_{\mathrm{s}}^2)}{r_{\mathrm{c}}^2 - r_{\mathrm{s}}^2}^3 \tag{36}$$

などが使われる [3]．このスイッチング関数は $S(r_{\mathrm{s}}) = 1$, $S(r_{\mathrm{c}}) = 0$, $dS/dr(r_{\mathrm{s}}) = 0$, $dS/dr(r_{\mathrm{c}}) = 0$ を満たしていることが確認できる．その他のスイッチング関数としては

$$S(r) = 1 - 3\left(\frac{r - r_{\mathrm{s}}}{r_{\mathrm{c}} - r_{\mathrm{s}}}\right)^3 + 3\left(\frac{r - r_{\mathrm{s}}}{r_{\mathrm{c}} - r_{\mathrm{s}}}\right)^6 - 3\left(\frac{r - r_{\mathrm{s}}}{r_{\mathrm{c}} - r_{\mathrm{s}}}\right)^9 \tag{37}$$

なども用いられる [4]．この関数では $r = r_{\mathrm{c}}$ と $r = r_{\mathrm{s}}$ で二階微分可能なことが確認できる．

6 分子動力学シミュレーションの手順

分子シミュレーションを実行するための基本的な手順は以下の通りとなる．

1. **初期構造の生成**

   分子動力学シミュレーションを行うため, 粒子の座標と運動量の初期条件を決める．運動量はボルツマン分布にしたがって生成することが多い．通常, 重心に関する並進速度と角速度はゼロとなるように設定する．

2. **平衡化**

   調べたい状態を作るため, 温度の制御をして平衡状態にする.

3. **本番**

   本番のシミュレーションを実行する. つまり, 運動方程式を数値的に解く. 粒子配置に対して力を計算して, その力にしたがって運動量や座標を更新する. 必要なステップだけ繰り返したら, 得られた物理量の統計平均をとるなど結果を解析する.

参考文献

[1] Michael P Allen and Dominic J Tildesley. *Computer Simulation of Liquids*, Vol. 1. Oxford University Press, nov 2017.

[2] *GROMACS Reference Manual (Algorithms, Periodic boundary conditions)*.

[3] Peter J. Steinbach and Bernard R. Brooks. New spherical-cutoff methods for long-range forces in macromolecular simulation. *Journal of Computational Chemistry*, Vol. 15, No. 7, pp. 667–683, 1994.

[4] Takeshi Sakaguchi and Hisashi Okumura. Cutoff effect in the nosé – poincaré and nosé – hoover thermostats. *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 82, No. 3, 2013.