計算物理学B

第11回
常微分方程式その2

藤本 悠輝、野垣 康介
（藤本担当回）

質問等あればメールでも受け付けます：
yuki.fujimoto.phys__at__niigata-u.ac.jp
(__at__ を @ に変えてください)

講義予定

10/07 両名：四則演算
10/14 野垣：制御文(for, if)
10/21 野垣：関数
10/28 藤本：配列(numpy)
11/04 藤本：可視化(matplotlib)
11/11 野垣：数値微分
11/18 藤本：数値積分
～中間レポート～

12/09 野垣：モンテカルロ1
12/16 野垣：モンテカルロ2
12/23 藤本：微分方程式1
01/13 藤本：微分方程式2
01/20 藤本：微分方程式3
01/27 野垣：最適化
02/03 藤本：機械学習
～期末レポート～

あくまで予定なので変更の可能性あり

授業で用いるURL

Google Colab:
https://colab.research.google.com/?hl=ja

GitHub上の講義サイト:
https://github.com/nogaki/Computational_Physics_B

今週の教材:
https://github.com/nogaki/Computational_Physics_B/blob/main/week11

第11回　常微分方程式その2

- scipyライブラリのODEソルバーの使い方
- 分子動力学シミュレーション

この講義は以下を参考に準備されています：
https://github.com/vlvovch/PHYS6350-ComputationalPhysics
「実践計算物理学」野本拓也 、是常隆、有田亮太郎 著（共立出版）
「理工学のための数値計算法」水島二郎、柳瀬眞一郎 著（数理工学社）

常微分方程式 (ODE)ソルバー

1階の常微分方程式 (ODE):

$$\frac{dx(t)}{dt} = f(x(t), t)$$

この形の微分方程式を与えられた初期条件

$$x(t = 0) = x_0$$

のもとで解くことを考える。

前回の講義では、基本的なオイラー法やルンゲ・クッタ法などの解法を紹介した。

ODEソルバー

前回の講義ノートでは、オイラー法、中点則(RK2)、RK4などによるODEソルバー関数を自前で定義した。

しかし、実際に研究で用いる場合は scipy ライブラリに含まれる solve_ivp を使うのが良い：

```
from scipy.integrate import solve_ivp
```

- デフォルトで適応刻み幅制御
- 高精度のアルゴリズム(5次のRunge-Kutta)
- 陰解法

などを実装

solve_ivpの使い方

```
from scipy.integrate import solve_ivp
```

solve_ivp で次の形の微分方程式を解くことを考える:

$$\frac{d\boldsymbol{y}}{dt} = f(t, \boldsymbol{y}; \{c_i\}), \qquad \boldsymbol{y}(t_0) = \boldsymbol{y}_0$$

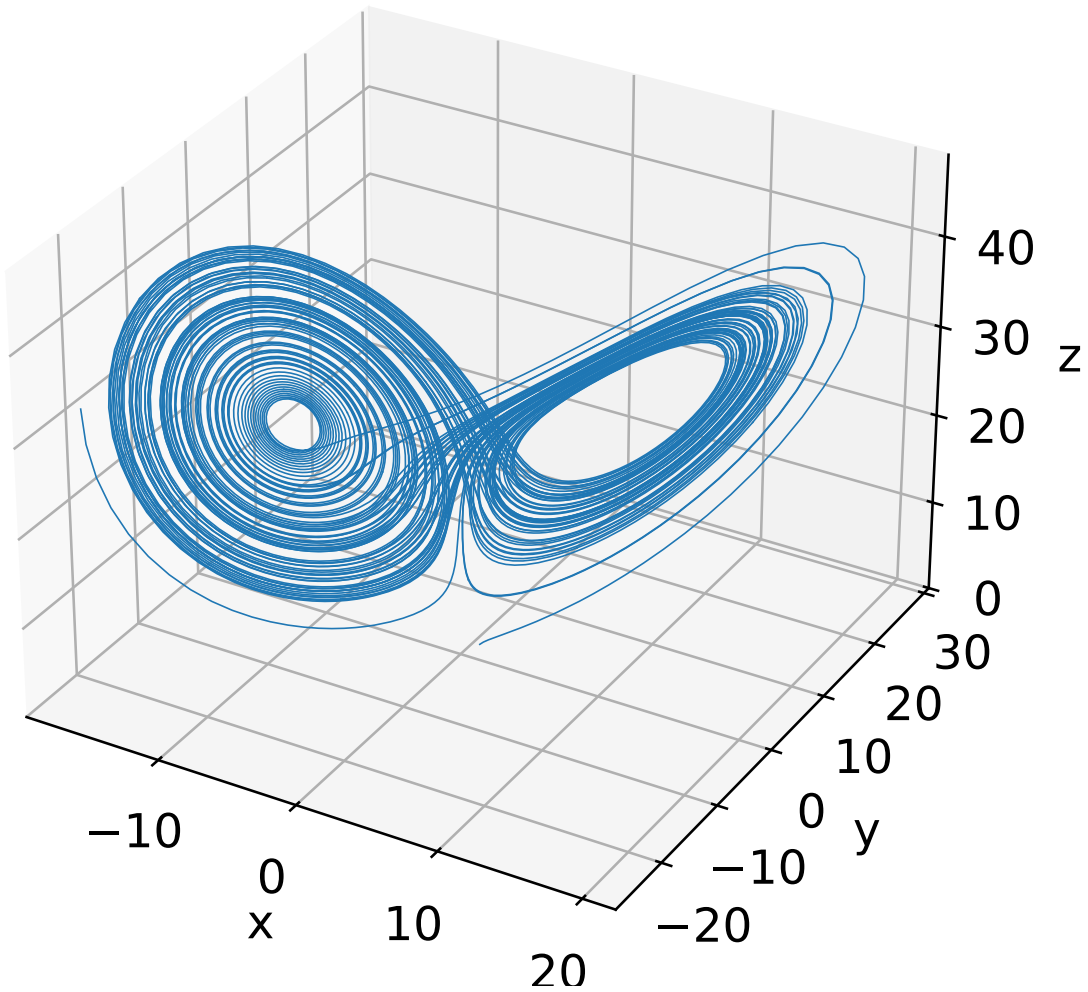
```
solution = solve_ivp(fun, # 関数 fun(t, y, c0, c1, ...)
                     [t0, t_end], # tの初期値と終端値
                     y0, # y(t) の t = t0での初期値
                     method='RK45', # ODEの解き方
                     t_eval=time_points, # tを見積もる点
                     args=(c0, c1)) # tとy以外の関数fのパラメタ


t = solution.t # ODEの解y(t)を見積もるtの点:要素nの配列
y = solution.y # 解y(t):yが長さmのベクトルのとき、サイズ(m,n)の配列
```

solve_ivpの応用例(1)

Lorenz attractor:

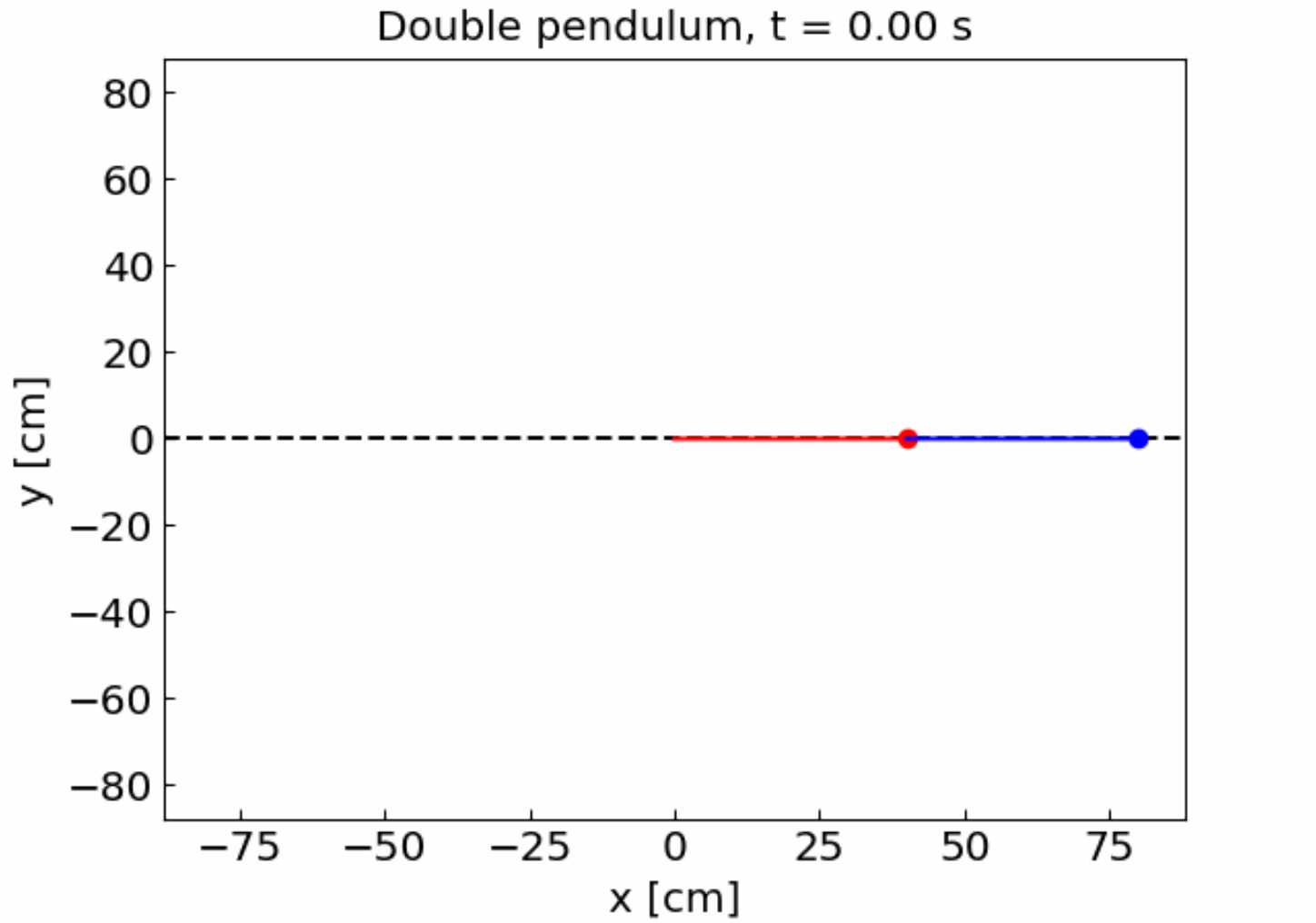
$$\frac{dx}{dt} = \sigma(y - x)\,,$$
$$\frac{dy}{dt} = x(\rho - z) - y\,,$$
$$\frac{dz}{dt} = xy - \beta z\,,$$

カオスの例



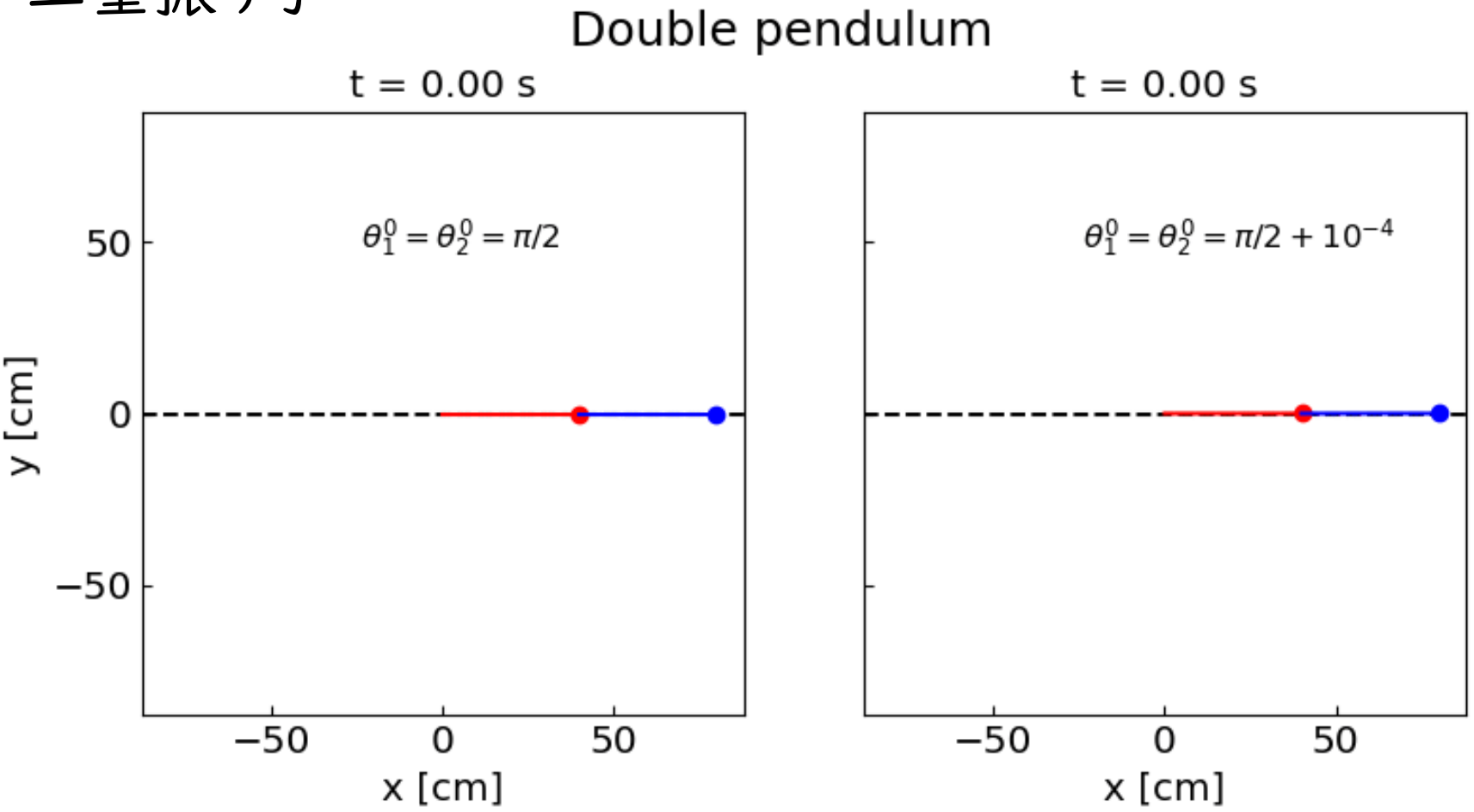
solve_ivpの応用例(2)

二重振り子



solve_ivpの応用例(2)

二重振り子



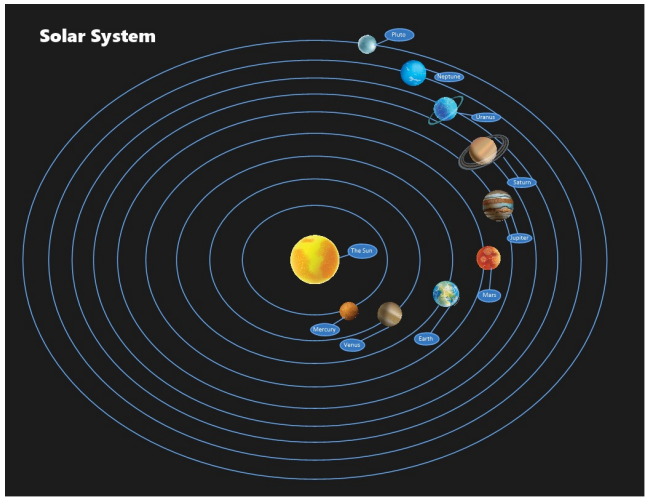
初期値に鋭敏→カオス的振る舞いの例

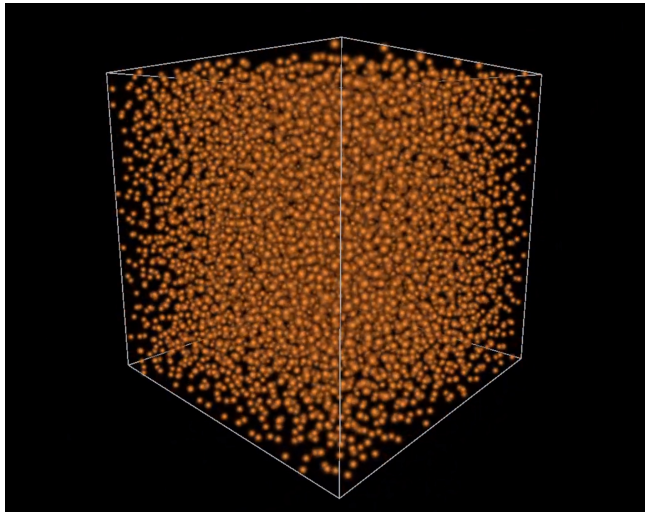
分子動力学法(Molecular Dynamics)

- 2体力の下でのN粒子系
- 運動方程式(古典N体問題):

$$m\ddot{\mathbf{r}}_\mathbf{i} = -\sum_j \nabla_i V_{\mathrm{LJ}}^{ij}(|\mathbf{r}_\mathbf{i} - \mathbf{r}_\mathbf{j}|)$$

- 惑星の運動
  - 太陽系のシミュレーション
- 統計力学と状態方程式
  - 有限体積の箱と周期境界条件





分子動力学法の方程式

運動方程式（古典N体問題）：$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = -\sum_{j \neq i} \nabla_i V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$$

- その際、解法が満たしてほしい性質：
  - 安定性（長く走らせるので）
  - エネルギー保存
  - 時間反転対称性

- 運動方程式を1階のODEの連立系で書き直す：

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{v}_i,$$
$$\dot{\mathbf{v}}_i = -(m_i)^{-1} \sum_{j \neq i} \nabla_i V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j),$$

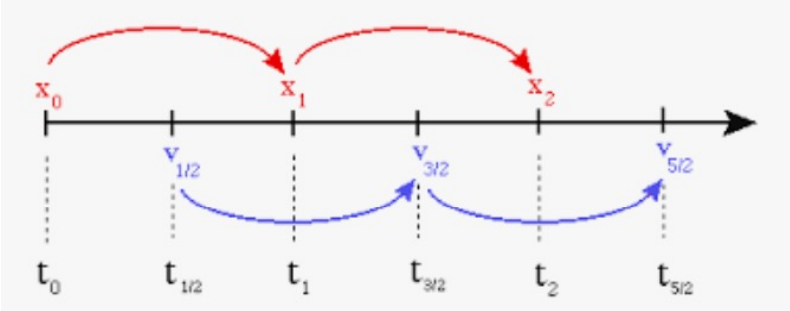
そして、リープ・フロッグ（蛙飛び）法を使って解く

リープ・フロッグ法

連立微分方程式：

$$\frac{dx}{dt} = v,$$

$$\frac{dv}{dt} = f(x,t).$$



Leap frog（蛙飛び）法：

$$x(t+h) = x(t) + hv(t+h/2),$$
$$v(t+3h/2) = v(t+h/2) + hf[x(t+h), t+h)],$$

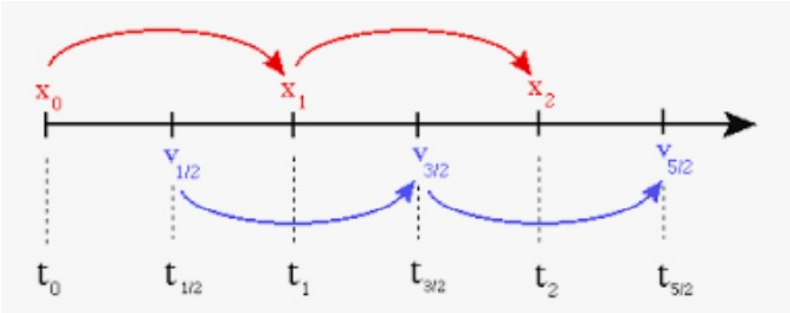
- 位置は整数ステップで計算
- 速度は半整数ステップで計算

誤差：全体で$O(h^2)$←中点法(RK2)と同じ
利点：(1) 時間反転対称性 (2) エネルギー保存

速度Verlet法

分子動力学の文脈ではleap frog法は速度Verlet法という：

$$v(t + h/2) = v(t) + \frac{h}{2} f[x(t), t],$$
$$x(t + h) = x(t) + hv(t + h/2),$$
$$v(t + h) = v(t + h/2) + \frac{h}{2} f[x(t + h), t + h)].$$



ボックスシミュレーションと統計力学

- 統計力学：多数の粒子の系
- 微視的にはニュートンの運動方程式に従う
- 有限体積でのシミュレーションで無限系を再現
  - 周期境界条件
  - 最小イメージ規約（最短距離の他粒子との相互作用）
- Nが十分大きければ系の性質はマクロな量で指定可
  - U, V, N 表示: 一定エネルギーのミクロカノニカル分布
  - T, V, N 表示：一定温度のカノニカル分布
- MD法は状態方程式を計算できる

2体力

- 以降、質量は m=1 と仮定。
- 2体ポテンシャルは相対距離にのみ依存：

$$\ddot{\mathbf{r}}_i = -\sum_{j \neq i} \frac{dV(r_{ij})}{dr_{ij}} \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{r_{ij}} .$$

Lennard-Jonesポテンシャル

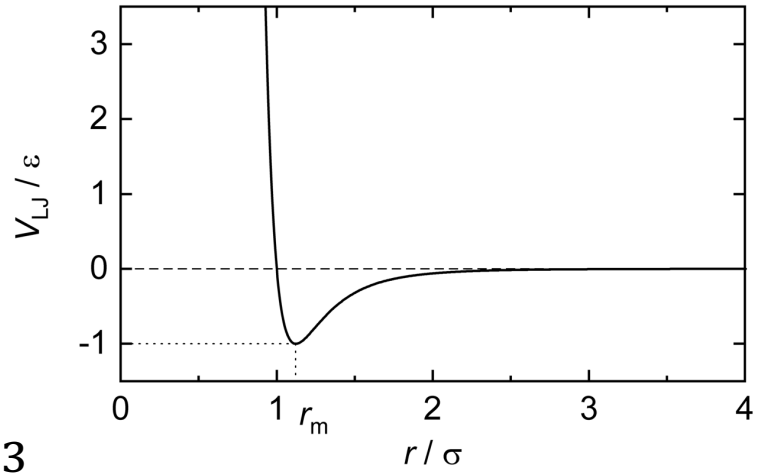
- Lennard-Jonesポテンシャル：

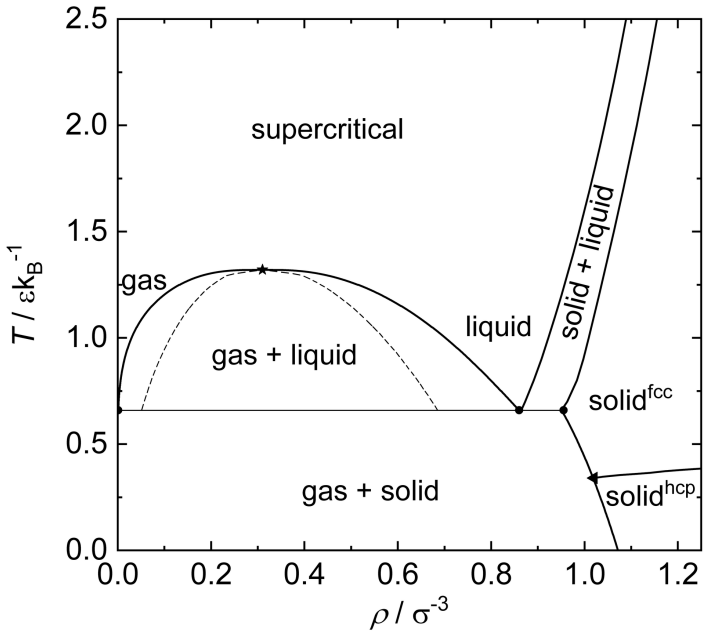
$$V_{\mathrm{LJ}}(r) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right]$$

- 無次元量：

$$\tilde{r} = r/\sigma \qquad \tilde{T} = T/(k_B\varepsilon) \qquad \tilde{n} = n\sigma^3$$

- 性質：
  - 複数の相転移、臨界点
  - 解析的には解けないが、MDシミュレーション可





S. Stephan, M. Thol, J. Vrabec, H. Hasse, Journal of Chemical Information and Modeling 59, 4248 (2019)

シミュレーション

系の初期化：

- 空間座標
  - 格子上に粒子を配置
  - 粒子の重なりを防ぐ (r^{-12}の項に注意)

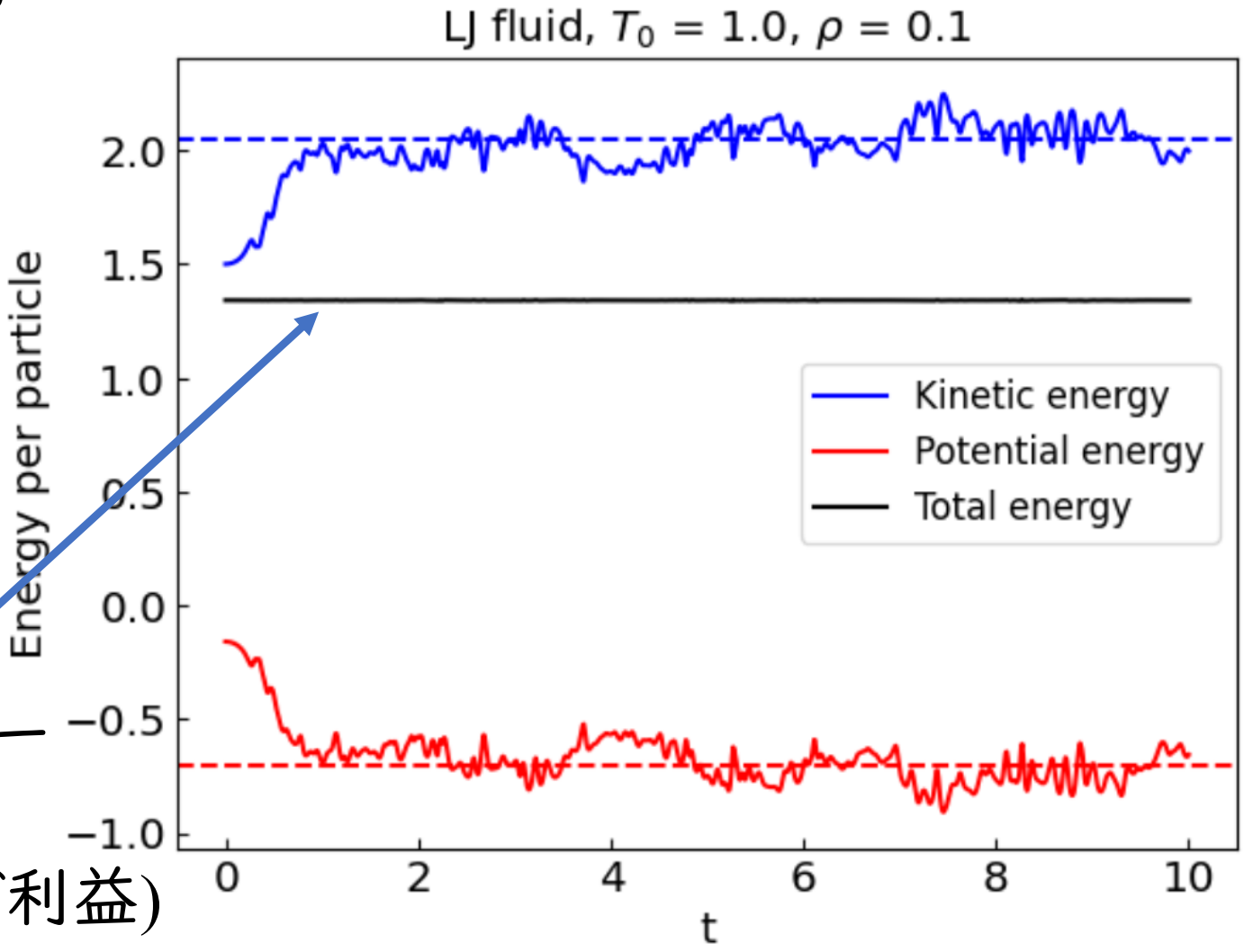
- 速度
  - 各粒子の速度を Gaussian (= Maxwell-Boltzmann) 分布からサンプルする。

$$f(\mathbf{v})\, d^3\mathbf{v} = \left[\frac{m}{2\pi k_{\mathrm{B}} T}\right]^{3/2} \exp\left(-\frac{m v^2}{2 k_{\mathrm{B}} T}\right) d^3\mathbf{v},$$

シミュレーション結果

$T = 1, \rho = 0.1, N = 64$

エネルギー：



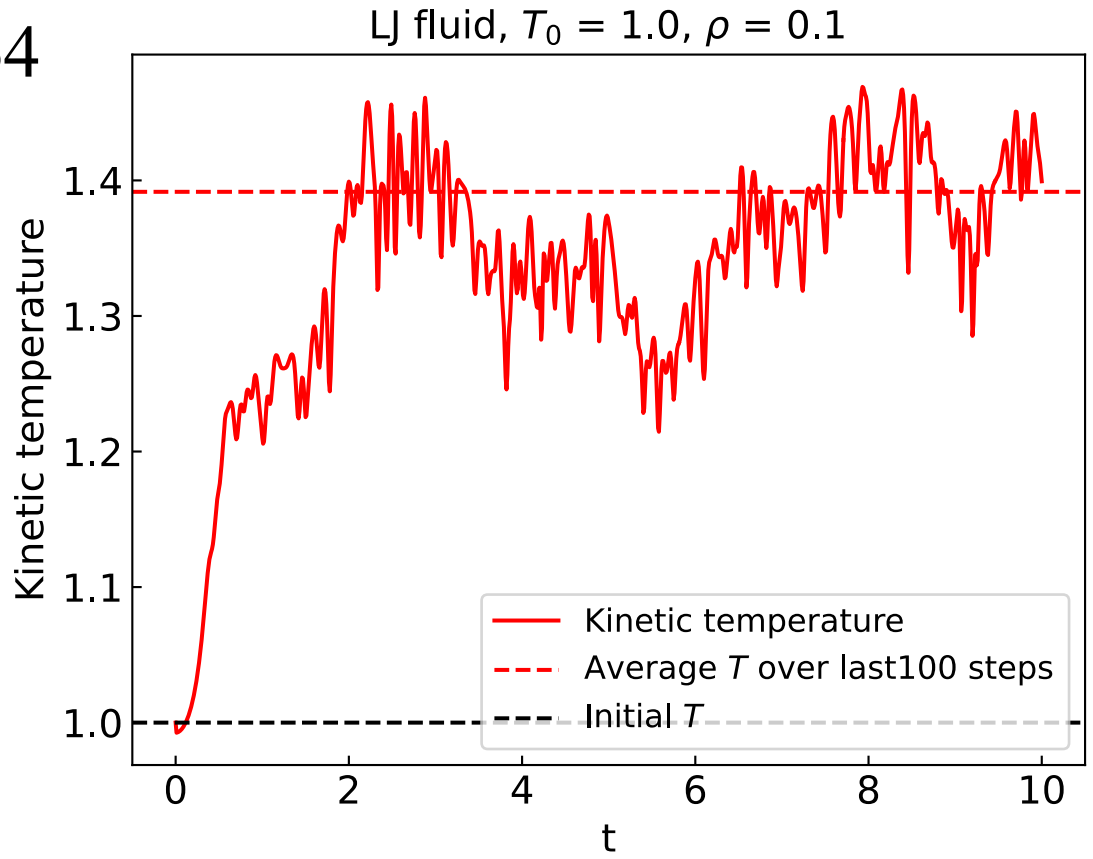
系の全エネルギーが保存
(leap-frog法のご利益)

シミュレーション結果

$T = 1, \rho = 0.1, N = 64$

温度：

$$T_{\mathrm{kin}} = \langle \mathbf{v}_i^2 \rangle / 3$$



気体分子運動論から読み出した温度 T_{kin} は初期値 $T = 1.0$ から乖離する。なぜなら、系は時間とともに平衡化し、ミクロカノニカルでは温度は保存しないから

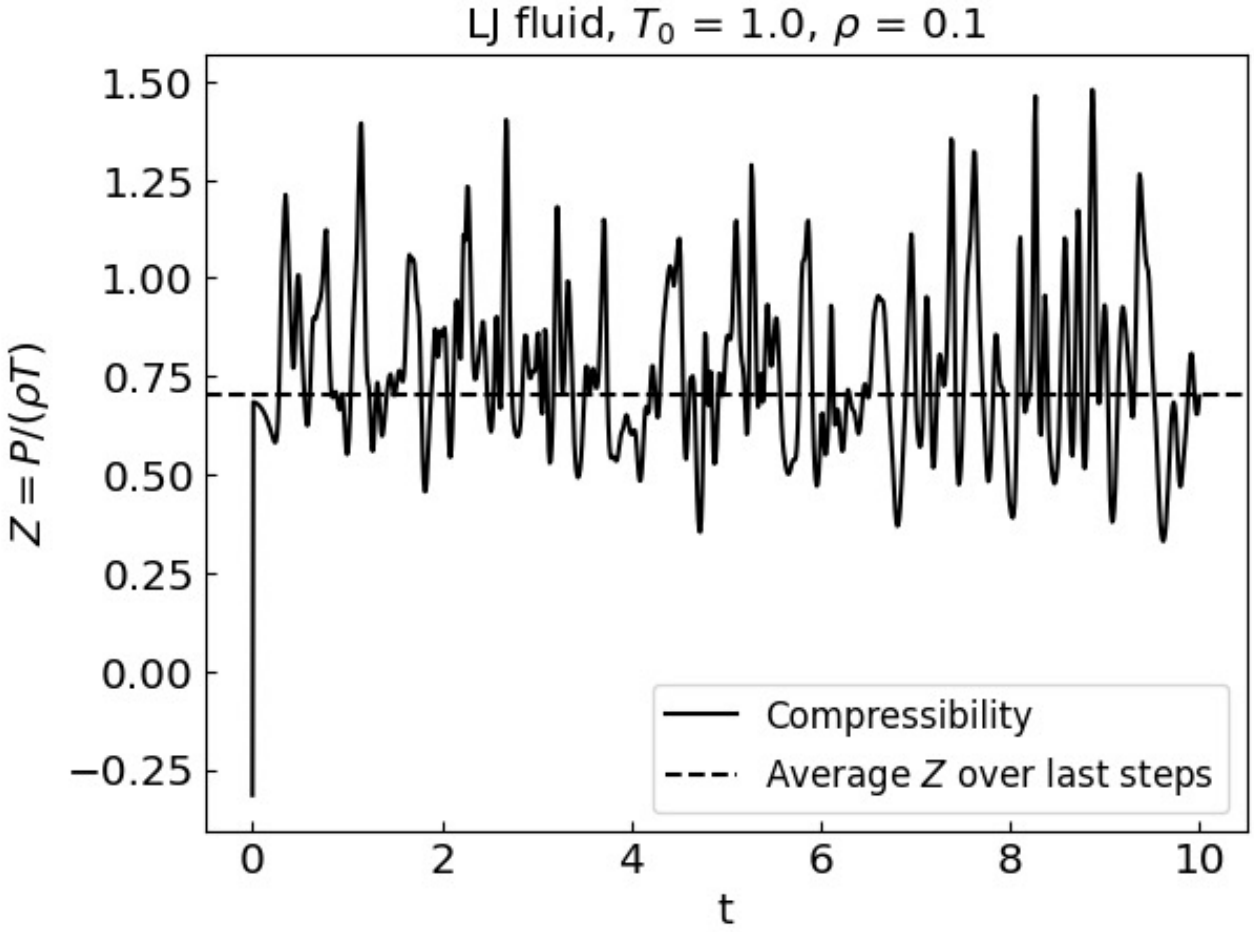
シミュレーション結果

$T = 1, \rho = 0.1, N = 64$

圧縮率
（実在気体の
理想気体から
のずれを表す）：

$Z = p/(\rho T)$

$Z=1$が理想気体



実習タイム

今週のGitHubにあげたファイルのうち
- Lorenz方程式
- 二重振り子
- 分子動力学シミュレーション

のコードをよく読んで理解せよ。
また、パラメタを変えてコードを走らせてみよ。

特に、Lorenz方程式と二重振り子は初期値を変えて、カオス的な振る舞いを観察してみよう。