

分子動力学シミュレーションにおける温度・圧力制御

第1回：能勢の熱浴と能勢・フーバー熱浴

BioMaPS Institute for Quantitative Biology, Rutgers University

奥村久士 okumura@biomaps.rutgers.edu

1 はじめに

今月号から分子動力学シミュレーションにおける温度制御と圧力制御の方法について連載記事を執筆することになりました。分子動力学シミュレーションにおける温度制御といえば故能勢修一慶應義塾大学教授の開発された能勢の熱浴が有名です。もし能勢先生がご健在でいらっしゃったならば私のような若輩がこの連載記事を執筆することはなかったと思います。能勢先生が早く亡くなられたことは大変に悲しく残念です。数十年にわたる研究の歴史があるテーマなので恐縮ではありますが、能勢研究室の先輩で「アンサンブル」編集委員でもいらっしゃる森下徹也博士（産総研）に助めていただきましたので、学生時代に能勢先生から教えていただいたことをもとに温度・圧力制御の方法について解説したいと思います。私の知識がいたらないところもあるかと思いますが皆様のご指導ご鞭撻のほどよろしく願いいたします。

2 ミクロカノニカルアンサンブルでの分子動力学シミュレーション

分子動力学シミュレーションで最も簡単に得られる統計アンサンブルはミクロカノニカルアンサンブルである。多くの場合ポテンシャルエネルギー U は座標のみに依存し、そのハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} + U(\mathbf{r}) \quad (1)$$

とあらわされる。ここで i 番目の粒子の座標、運動量、質量をそれぞれ $\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i, m_i$ とあらわし、 N 個の粒子の座標の集合を $\mathbf{r} \equiv \{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N\}$ と書いた。このハミルトニアン \mathcal{H}_0 による運動方程式は正準方程式により

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}_0}{\partial \mathbf{p}_i} = \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} \quad (2)$$

$$\frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}_0}{\partial \mathbf{r}_i} = \mathbf{F}_i \quad (3)$$

とあらわされる。 \mathbf{F}_i は i 番目の粒子に働く力で

$$\mathbf{F}_i \equiv -\frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_i} \quad (4)$$

と定義される。この運動方程式を数値的に解くことによりミクロカノニカルアンサンブルが得られる。

3 拡張系の方法

分子動力学シミュレーションにおいて温度一定のアンサンブルや圧力一定のアンサンブルなどミクロカノニカルアンサンブル以外のアンサンブルを生成する場合に (1) 式のハミルトニアン（これを物理系とよぶ）に熱浴や圧力浴の自由度を追加し温度や圧力を制御する方法がある。物理系と熱浴などの外系をあわせて拡張系とよび、これらの方法を総称して拡張系の方法という。

$$\text{「拡張系」} = \text{「物理系」} + \text{「外系（例：熱浴）」} \quad (5)$$

拡張系の方法のうち温度を制御してカノニカルアンサンブルを得る代表的な方法が能勢の熱浴である [1, 2]。

4 能勢の熱浴と能勢・フーバー熱浴

能勢の熱浴では運動量 \mathbf{p}_i と時間ステップ幅 Δt を

$$\mathbf{p}_i = \mathbf{p}'_i/s, \quad \Delta t = \Delta t'/s \quad (6)$$

のようにスケールし、 \mathbf{p}' を仮想運動量、 t' を仮想時間という。そして物理系と熱浴を結びつけた系のハミルトニアン \mathcal{H}_N を以下のように導入する。

$$\mathcal{H}_N = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}'_i^2}{2m_i s^2} + U(\mathbf{r}) + \frac{P_s^2}{2Q} + g k_B T_0 \log s \quad (7)$$

ここで右辺第1項と第2項は物理系のハミルトニアン (1) 式に対応し、第3項と第4項が熱浴をあらわす。 P_s は能勢の熱浴の自由度 s に対する正準共役な運動量である。 Q は熱浴の質量に相当し s の時間発展を制御する。 k_B はボルツマン定数、 T_0 は設定温度である。 g は系の自由度をあらわすパラメータで N 個の原子からなる系では、仮想時間 t' について時間発展する場合 $g = 3N + 1$ 、現実の時間 t について時間発展する場合 $g = 3N$ とする。 $\mathbf{r}, \mathbf{p}', s, P_s$ を正準変数として \mathcal{H}_N から正準方程式を導くと仮想時間 t' での運動方程式が以下のように決まる。

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt'} = \frac{\partial \mathcal{H}_N}{\partial \mathbf{p}'_i} = \frac{\mathbf{p}'_i}{m_i s^2} \quad (8)$$

$$\frac{d\mathbf{p}'_i}{dt'} = -\frac{\partial \mathcal{H}_N}{\partial \mathbf{r}_i} = \mathbf{F}_i \quad (9)$$

$$\frac{ds}{dt'} = \frac{\partial \mathcal{H}_N}{\partial P_s} = \frac{P_s}{Q} \quad (10)$$

$$\frac{dP_s}{dt'} = -\frac{\partial \mathcal{H}_N}{\partial s} = \frac{1}{s} \left(\sum_i \frac{\mathbf{p}_i'^2}{m_i s^2} - g k_B T_0 \right) \quad (11)$$

仮想時間 t' についての運動方程式から現実の時間 t についての運動方程式を求めると

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} \quad (12)$$

$$\dot{\mathbf{p}}_i = \mathbf{F}_i - \frac{\dot{s}}{s} \mathbf{p}_i \quad (13)$$

$$\dot{s} = s \frac{P_s}{Q} \quad (14)$$

$$\dot{P}_s = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{m_i} - g k_B T_0 \quad (15)$$

となる．ここで上付きの点 ($\dot{}$) は現実の時間 t での微分 d/dt を意味する．(8)–(11) 式および (12)–(15) 式が能勢の熱浴の運動方程式である．

Hoover は現実の時間 t での運動方程式を変形して

$$\zeta \equiv \frac{1}{s} \frac{ds}{dt} = \frac{ds}{dt'} = \frac{P_s}{Q} \quad (16)$$

とおいた [3]． ζ を用いると能勢の熱浴の運動方程式は

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} \quad (17)$$

$$\dot{\mathbf{p}}_i = \mathbf{F}_i - \zeta \mathbf{p}_i \quad (18)$$

$$\dot{\zeta} = \frac{1}{Q} \left(\sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{m_i} - g k_B T_0 \right) \quad (19)$$

の3式で閉じた形になる．これを能勢・フーバー熱浴という．

瞬間温度は

$$\mathcal{T}(t) = \frac{1}{g k_B} \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{m_i} \quad (20)$$

とあわせるのでこれを使って (19) 式を書きかえると

$$\frac{d\zeta}{dt} = \frac{g k_B}{Q} (\mathcal{T}(t) - T_0) \quad (21)$$

となる．瞬間温度 $\mathcal{T}(t)$ が設定温度 T_0 より高ければ ζ は大きくなる．(18) 式で ζ は抵抗係数のような役割を果たしているので，粒子の運動量 \mathbf{p}_i は遅くなる．ただし抵抗係数とはいってもこの ζ は正の値も負の値も両方とりうることに注意する．逆に瞬間温度 $\mathcal{T}(t)$ が設定温度 T_0 より低くければ ζ は小さくなり，粒子の運動量 \mathbf{p}_i を速くする．瞬間温度 $\mathcal{T}(t)$ が設定温度 T_0 に近づくように運動量にフィードバックがかかっていることがわかる．

5 カノニカルアンサンブルが実現することの証明

ハミルトニアン \mathcal{H}_N はある一定値 E に保たれるので，拡張系全体ではマイクロカノニカルアンサンブルになる．そのため拡張系全体の分配関数は

$$Z = \int_0^\infty ds \int_{-\infty}^\infty dP_s \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{p}' \times \delta \left(\mathcal{H}_0 \left(\mathbf{r}, \frac{\mathbf{p}'}{s} \right) + \frac{P_s^2}{2Q} + g k_B T_0 \log s - E \right) \quad (22)$$

と書ける．ここで仮想運動量 \mathbf{p}'_i から現実の運動量 \mathbf{p}_i への変数変換 $\mathbf{p}_i = \mathbf{p}'_i/s$ をおこなう．各粒子の運動量の x, y, z 座標が

$$dp_{ix} = dp'_{ix}/s, \quad dp_{iy} = dp'_{iy}/s, \quad dp_{iz} = dp'_{iz}/s \quad (23)$$

のようにスケールされているので

$$d\mathbf{p}' = s^{3N} d\mathbf{p} \quad (24)$$

と書ける．この変数変換をおこなうと

$$Z = \int_0^\infty ds \int_{-\infty}^\infty dP_s \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{p} s^{3N} \times \delta \left(\mathcal{H}_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) + \frac{P_s^2}{2Q} + g k_B T_0 \log s - E \right) \quad (25)$$

となる．ここで δ 関数の恒等式

$$\delta(f(s)) = \frac{\delta(s - s_0)}{|f'(s)|} \quad \text{ただし} \quad f(s_0) = 0 \quad (26)$$

を用いる．今の場合

$$s_0 = \exp \left\{ \left(E - \mathcal{H}_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) - \frac{P_s^2}{2Q} \right) / g k_B T_0 \right\} \quad (27)$$

であるから δ 関数の積分を実行すると

$$Z = \int_{-\infty}^\infty dP_s \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{p} \frac{1}{g k_B T_0} \times \exp \left\{ \frac{3N+1}{g k_B T_0} \left(E - \mathcal{H}_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) - \frac{P_s^2}{2Q} \right) \right\} \quad (28)$$

となる．ここで $g = 3N + 1$ とすると

$$Z = \int_{-\infty}^\infty dP_s \frac{1}{g k_B T_0} \exp \left(\frac{E - P_s^2/2Q}{k_B T_0} \right) \times \underbrace{\int d\mathbf{r} \int d\mathbf{p} \exp \left\{ -\frac{\mathcal{H}_0(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{k_B T_0} \right\}}_{\text{カノニカルアンサンブル}} \quad (29)$$

であるから仮想時間 t' でサンプルする場合には $g = 3N + 1$ とすれば座標と運動量の両方についてカノニカルアンサンブルが得られることがわかる．

一方，現実の時間 t でサンプルする場合には $g = 3N$ とするとカノニカルアンサンブルが得られる．このこ

とを次に示す．現実の時間 t でサンプルする場合，物理量 $A(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ の平均値は

$$\begin{aligned} & \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt A(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t)) \\ &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt A(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}'(t)/s(t)) \\ &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\tau'}{\tau} \frac{1}{\tau'} \int_0^{\tau'} dt' \frac{A(\mathbf{r}(t'), \mathbf{p}'(t')/s(t'))}{s(t')} \end{aligned}$$

と計算される．ここで $dt = dt'/s$ であるので τ は

$$\tau = \int_0^\tau dt = \int_0^{\tau'} \frac{1}{s} dt' \quad (30)$$

と表される．これを用いると

$$\begin{aligned} & \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt A(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t)) \\ &= \frac{\lim_{\tau' \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau'} \int_0^{\tau'} dt' \frac{A(\mathbf{r}(t'), \mathbf{p}'(t')/s(t'))}{s(t')}}{\lim_{\tau' \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau'} \int_0^{\tau'} dt' \frac{1}{s(t')}} \\ &= \frac{\langle A(\mathbf{r}, \mathbf{p}'/s)/s \rangle}{\langle 1/s \rangle} \quad (31) \end{aligned}$$

となる．ここで， $\langle \dots \rangle$ は仮想時間 t' での平均を意味する． $\langle A(\mathbf{r}, \mathbf{p}'/s)/s \rangle$ および $\langle 1/s \rangle$ を計算する際 (25) 式の s^{3N} が s^{3N-1} になることに注意すると，(28) 式の計算と同様に

$$\begin{aligned} & \frac{\langle A(\mathbf{r}, \mathbf{p}'/s)/s \rangle}{\langle 1/s \rangle} \\ &= \frac{\int d\mathbf{r} \int d\mathbf{p} A(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \exp \left\{ -\frac{3N}{gk_B T_0} \mathcal{H}_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \right\}}{\int d\mathbf{r} \int d\mathbf{p} \exp \left\{ -\frac{3N+1}{gk_B T_0} \mathcal{H}_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \right\}} \\ &= \frac{\int d\mathbf{r} \int d\mathbf{p} \exp \left\{ -\frac{3N}{gk_B T_0} \mathcal{H}_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \right\}}{\int d\mathbf{r} \int d\mathbf{p} \exp \left\{ -\frac{3N+1}{gk_B T_0} \mathcal{H}_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \right\}} \\ &= \frac{\int d\mathbf{r} \int d\mathbf{p} A(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \exp \left\{ -\frac{3N}{gk_B T_0} \mathcal{H}_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \right\}}{\int d\mathbf{r} \int d\mathbf{p} \exp \left\{ -\frac{3N}{gk_B T_0} \mathcal{H}_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \right\}} \quad (32) \end{aligned}$$

を得られる．ゆえに $g = 3N$ とすれば

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt A(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t)) = \langle A(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \rangle_{NVT} \quad (33)$$

となる．ここで， $\langle \dots \rangle_{NVT}$ はカノニカルアンサンブルでの平均である．すなわち，現実の時間 t でサンプルする時は $g = 3N$ とすればカノニカルアンサンブルが得られる．

6 能勢・フーバー熱浴の時間発展

実際に能勢・フーバー熱浴をもちいて分子動力学シミュレーションをおこなうには運動方程式を差分化し数値積分しなければならない．能勢・フーバー熱浴の運動方程式を差分化する方法にはいくつかあるが，そのうちプログラムを書くのがもっとも簡単なのは Martyna らが提案した時間反転可逆な積分法であろう [4]．この方法を次に説明する．

能勢・フーバー熱浴における時間発展は (17)–(19) 式で記述されるので位相空間は $(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \zeta)$ で張られる．よって物理量 $A(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \zeta)$ の時間発展は

$$\dot{A}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \zeta) = \sum_i \dot{\mathbf{r}}_i \cdot \frac{\partial A}{\partial \mathbf{r}_i} + \sum_i \dot{\mathbf{p}}_i \cdot \frac{\partial A}{\partial \mathbf{p}_i} + \sum_i \dot{\zeta} \frac{\partial A}{\partial \zeta} \quad (34)$$

と書ける．ここで演算子

$$D \equiv \sum_i \dot{\mathbf{r}}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} + \sum_i \dot{\mathbf{p}}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} + \sum_i \dot{\zeta} \frac{\partial}{\partial \zeta} \quad (35)$$

を導入すると (34) 式は

$$\dot{A}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \zeta) = DA \quad (36)$$

と書き換えられる．この微分方程式の形式解は

$$A(t + \Delta t) = e^{D\Delta t} A(t) \quad (37)$$

となる．ここで $e^{D\Delta t}$ を時間発展演算子とよぶ．この形式解は厳密に正しいがこのままでは数値積分ができない．そこで (17)–(19) 式を (35) 式に代入し以下のように演算子 D を分割する．

$$D = D_1 + D_2 + D_3 \quad (38)$$

$$D_1 = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} + \frac{1}{Q} \left(\sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{m_i} - gk_B T_0 \right) \frac{\partial}{\partial \zeta} \quad (39)$$

$$D_2 = \sum_i \mathbf{F}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} \quad (40)$$

$$D_3 = -\zeta \sum_i \mathbf{p}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} \quad (41)$$

演算子 D を分割したのにもとない，時間発展演算子 $e^{D\Delta t}$ も近似的に以下のように分割する．これを鈴木・トロッター分割という．

$$e^{D\Delta t} = e^{D_3 \frac{\Delta t}{2}} e^{D_2 \frac{\Delta t}{2}} e^{D_1 \Delta t} e^{D_2 \frac{\Delta t}{2}} e^{D_3 \frac{\Delta t}{2}} + O\left((\Delta t)^3\right) \quad (42)$$

この分割の仕方は他にも考えられるがここでは最も簡単な分割法を用いる． $e^{D_1 \Delta t}$ は

$$e^{D_1 \Delta t} = 1 + D_1 \Delta t + \frac{1}{2!} D_1^2 (\Delta t)^2 + \dots \quad (43)$$

と展開されるので r_i, ζ に演算すると

$$e^{D_1 \Delta t} r_i = r_i + \frac{p_i}{m_i} \Delta t \quad (44)$$

$$e^{D_1 \Delta t} \zeta = \zeta + \frac{1}{Q} \left(\sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{m_i} - g k_B T_0 \right) \Delta t \quad (45)$$

となる．ここで D_1 は p に演算すると 0 なので Δt の 2 乗以上の高次項は 0 になることに注意する．つまり (44), (45) 式は厳密に正しい．同様に

$$e^{D_2 \Delta t} p_i = p_i + F_i \Delta t \quad (46)$$

となる． D_3 の演算は Δt の高次項が 0 にならないが，公式

$$e^x = 1 + x + \frac{1}{2!} x^2 + \dots \quad (47)$$

を用いると

$$\begin{aligned} e^{D_3 \Delta t} p_i &= \left\{ 1 + D_3 \Delta t + \frac{1}{2!} D_3^2 (\Delta t)^2 + \dots \right\} p_i \\ &= p_i \left\{ 1 + (-\zeta \Delta t) + \frac{1}{2!} (-\zeta \Delta t)^2 + \dots \right\} \\ &= p_i e^{-\zeta \Delta t} \end{aligned} \quad (48)$$

と計算される．各時間発展演算子による時間発展が計算できたので (42) 式の順番で r, p, ζ を時間発展させる．実際に分子動力学シミュレーションをおこなうには以下の手順でシミュレーションプログラムを書けばよい．

$$p_i \leftarrow p_i \exp\left(-\zeta \frac{\Delta t}{2}\right) \quad (49)$$

$$p_i \leftarrow p_i + F_i \frac{\Delta t}{2} \quad (50)$$

$$r_i \leftarrow r_i + \frac{p_i}{m_i} \Delta t \quad (51)$$

$$\zeta \leftarrow \zeta + \frac{1}{Q} \left(\sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{m_i} - g k_B T_0 \right) \Delta t \quad (52)$$

$$p_i \leftarrow p_i + F_i \frac{\Delta t}{2} \quad (53)$$

$$p_i \leftarrow p_i \exp\left(-\zeta \frac{\Delta t}{2}\right) \quad (54)$$

ここで左向きの矢印 \leftarrow はプログラム中での代入を意味する．(49)–(54) 式のプロセスを 1 回計算することにより能勢・フーバー熱浴を用いた分子動力学シミュレーションを 1 ステップおこなうことができる．(49)–(54) 式において熱浴がない，すなわち $\zeta = 0$ の場合には速度ベルレ法によるマイクロカノニカルアンサンブルでの時間発展の表式が得られる．

7 応用例：レナード・ジョーンズ流体

前節で述べた時間発展法を用いて実際に分子動力学シミュレーションをおこなった例について述べる．2 体

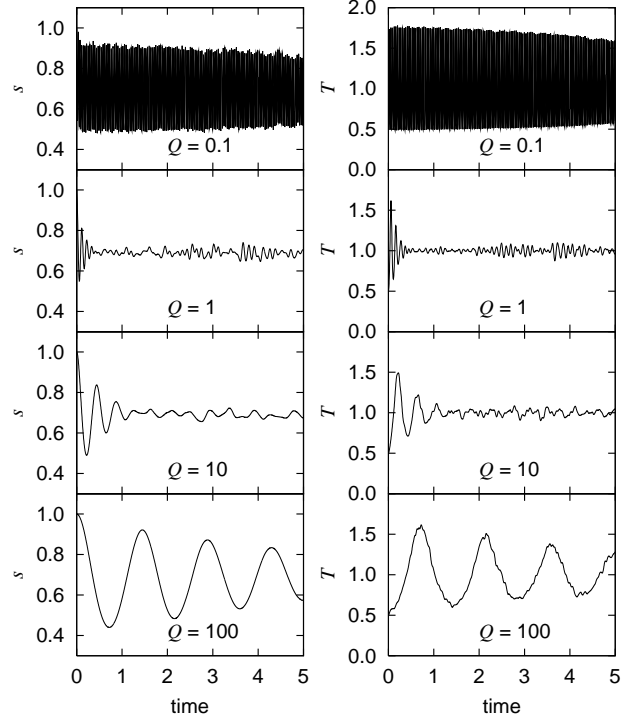


図 1: 能勢の熱浴の自由度 s と瞬間温度 T の時間変化．

粒子間相互作用 $u(r_{ij})$ にはレナード・ジョーンズポテンシャルを用いた．

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{i>j} u(r_{ij}) \quad (55)$$

$$u(r_{ij}) = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right\} \quad (56)$$

ここで $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ は 2 粒子間距離， ϵ はポテンシャルエネルギーの深さ， σ はレナード・ジョーンズ粒子の直径である．今後は ϵ と σ を用いてそれぞれエネルギーと長さを無次元化した単位系を用いる．周期境界条件を用い，相互作用のカットオフ距離は $r_c = 4.0$ ，粒子数は $N = 500$ ，密度は $\rho = 0.8$ に設定した．設定温度は $T_0 = 1.0$ ，初期温度は $T(t=0) = 0.5$ とした．この密度と設定温度ではレナード・ジョーンズ粒子系は液体になる [5]．熱浴の質量は $Q = 0.1$ から $Q = 100$ まで 4 つの値に設定した．時間ステップ幅 $\Delta t = 0.002$ としてシミュレーションを 2500 ステップおこなった．

能勢の熱浴の自由度 s と瞬間温度 T の時間変化を図 1 に示す． Q が小さくなるほど s の振動は速く， Q が大きくなるほど s の振動は遅くなる． $Q = 0.1$ や $Q = 100$ の場合， $t = 5$ までの範囲では温度が平衡に達していない．一般に s の振動は速すぎても遅すぎても熱浴と物理系の間でエネルギーのやり取りが効率的におきず，平衡に達するまでに時間がかかってしまう． s の振動の時間スケールが粒子の運動の時間スケールと同程度で

あるときに速く平衡に達する．この例では $Q = 1 \sim 10$ 程度に設定するのがよい． $Q = 1$ と $Q = 10$ の場合はそれぞれ $t = 0.5$ と $t = 1.0$ 程度で平衡に達し瞬間温度 T は設定温度 $T_0 = 1.0$ の周りで小刻みに揺らいでいる．

8 まとめ

この解説記事では能勢の熱浴と能勢・フーバー熱浴について説明した．その運動方程式を導出し，座標と運動量の両方についてカノニカルアンサンブルが得られることを証明した．さらに能勢・フーバー熱浴を用いた分子動力学シミュレーションを実行するために運動方程式を差分化し数値積分する手順も紹介した．またレナード・ジョーンズ流体の分子動力学シミュレーションをおこない熱浴の質量 Q の値の選び方を述べた．この解説記事を読んでいただければ能勢の熱浴や能勢・フーバー熱浴の運動方程式を理解できるだけでなく，初学者でも自分でシミュレーションプログラムを書いて実行できるようになると思う．次回以降も分子動力学シミュレーションの経験があまりない人でもプログラムが書けるように，なるべくわかりやすく解説していきたい．

参考文献

- [1] S. Nosé, *Mol. Phys.*, **52**, 255 (1984).
- [2] S. Nosé, *J. Chem. Phys.*, **81**, 511 (1984).
- [3] W. G. Hoover, *Phys. Rev. A*, **31**, 1695 (1985).
- [4] G. J. Martyna, M. E. Tuckerman, D. J. Tobias, and M. L. Klein, *Mol. Phys.*, **87**, 1117 (1996).
- [5] H. Okumura and F. Yonezawa, *J. Chem. Phys.*, **113**, 9162 (2000).

著者紹介



奥村久士 (博士 (理学)) : [経歴] 2002 年慶應義塾大学理工学研究科博士課程修了，東京大学，分子科学研究所，名古屋大学を経て 2008 年から現所属 [専門] 統計力学，分子シミュレーション． [趣味] 海外旅行，落語鑑賞．