



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 62 за 2013 г.



Брагин М.Д., [Иванов А.В.](#)

Локально-адаптивный выбор
шага интегрирования в
задачах молекулярной
динамики

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Брагин М.Д., Иванов А.В. Локально-адаптивный выбор шага интегрирования в задачах молекулярной динамики // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2013. № 62. 39 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2013-62>

Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М. В. Келдыша
Российской академии наук

М. Д. Брагин, А. В. Иванов

**Локально-адаптивный выбор
шага интегрирования в задачах
молекулярной динамики**

Москва — 2013

Брагин М. Д., Иванов А. В.

Локально-адаптивный выбор шага интегрирования в задачах молекулярной динамики

Работа посвящена численным методам решения задач молекулярной динамики. Дан обзор существующих в настоящее время методов и алгоритмов. Сформулировано и доказано необходимое условие сходимости произвольной разностной схемы решения дифференциальных уравнений движения Ньютона. Из условия ограниченности интенсивности схемного источника энергии выведен критерий выбора временного шага в задаче двух тел. На основе этого критерия построен оригинальный алгоритм численного интегрирования задачи N тел, сочетающий в себе все современные подходы к построению новых схем. На примере двух модельных задач показано, что предлагаемый алгоритм обеспечивает как контроль за флуктуациями энергии, так и значительное ускорение счета.

Ключевые слова: молекулярная динамика, разностная схема, критерий выбора шага, алгоритм Верле.

Mikhail D. Bragin, Anton V. Ivanov

The locally adaptive choice of time step in molecular dynamics' problems

This paper considers numerical methods in molecular dynamics. An overview of the existing methods and algorithms is made. A necessary condition for convergence of an arbitrary finite-difference scheme, which solves newtonian differential equations of motion is formulated and proved. From bounding the scheme energy source in the two-body problem, a criteria for choosing time step is deduced. Based on this criteria, an original algorithm of the N -body problem numerical integration is constructed. All the modern ways of constructing new schemes are unified in that algorithm. On the example of two model problems it is shown, that the proposed algorithm guarantees both the control of energy fluctuations and the significant calculation acceleration.

Keywords: molecular dynamics, finite-difference scheme, time step criteria, Verlet's algorithm.

Введение

Метод молекулярной динамики (МД) зародился во второй половине XX века [1–3]. Идея метода сводится к тому, чтобы описать движение большого ансамбля атомов на классическом уровне при помощи системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) движения Ньютона. Появление метода МД закономерно совпало с широким распространением вычислительных машин, способных рассчитать численно данную довольно сложную систему ОДУ высокого порядка.

Приблизительно в этот же период были разработаны экономичные схемы численного интегрирования уравнений движения. Одной из таких схем является известный алгоритм Верле [4], широко употребляемый и поныне [5–8] в том оригинальном виде, в котором его изложил сам Луи Верле. Весьма популярны такие схемы [9–11]: Нордсика—Гира, явные одно- и двухстадийные Рунге—Кутты, «Прыгающая лягушка», в англоязычной литературе именуемая «Leapfrog»; Берда и др.

В последнее время, вместе с увеличением вычислительных мощностей компьютеров и запросов приложений, возрос интерес не только к самой возможности решения уравнений метода МД, но еще и к точности, эффективности алгоритмов решения. Было обнаружено, что все методы численного решения задач МД неконсервативны, т. е. во время расчета не сохраняется полная энергия системы атомов. В свою очередь, качество сохранения энергии напрямую определяет адекватность моделирования [12]. Кроме того, возникла потребность в ускорении темпа счета и улучшении масштабируемости алгоритмов.

Все эти нужды породили весьма богатое изобилие современных модификаций старых схем, предложенных на заре развития метода МД. Тем не менее, в их основе лежит единая мысль: гибкий, динамичный выбор шага интегрирования по текущему состоянию системы атомов и пренебрежение слабыми взаимодействиями. Поскольку охватить все многообразие методов в рамках настоящей работы невозможно, рассмотрим лишь некоторые, относительно новые из них.

В работах [13, 14] шаг сетки выбирается на основе итерационного решения некоего нелинейного неравенства, в котором ограничивается относительное изменение полной энергии за один шаг. Несмотря на то что автор гарантирует контроль над ошибкой по энергии, ничто не запрещает последней расти экспоненциально и даже превысить 100%.

В статьях, посвященных коду [15, 16], разработан алгоритм моделирования динамики галактик и звездных скоплений. Хотя, казалось бы, эта предмет-

ная область далека от МД, уравнения, описывающие данные физические явления, схожи и отличаются лишь выбором потенциалов. Авторы упомянутых работ уделяют большое внимание вопросу гибкого выбора шага по времени. Для схемы «Прыгающая лягушка» они получают выражение на изменение энергии за шаг, близкое к тому, которое мы получим в главе 4 для схемы Верле. Однако затем авторы никак не используют этот результат для построения метода выбора шага и предлагают целый ряд феноменологических и плохо обоснованных идей, лежащих в основу алгоритма.

Рассмотренные выше работы объединяет то, что шаг выбирается единым для всего ансамбля частиц. Такой подход неудачен в смысле повышения эффективности счета: очевидно, всегда найдется пара активно взаимодействующих частиц, которая сделает шаг чересчур мелким, и не будет наблюдаться никакой разницы по сравнению с применением какой-либо старой, известной схемы на равномерной и мелкой сетке.

Иную, более многообещающую мысль высказали авторы метода [17–20]. Они предлагают в некоторых частных случаях достичь ускорения счета путем введения двух временных шагов и, грубо говоря, интегрирования уравнений движения «холодных» (медленных) и «горячих» (быстрых) частиц со своими шагами. К сожалению, авторы не приводят никаких рекомендаций на счет выбора данных временных масштабов, а разделение частиц на два сорта делается по сомнительной процедуре. С точки зрения физики неясно, что такое температура частицы, ведь это есть понятие, характеризующее достаточно большие, термодинамические системы. Более того, остается неконтролируемой ошибка по энергии.

Таким образом, сложилось два независимых подхода к конструированию новых разностных схем МД. Первый подход состоит в отыскании гибкого метода выбора шага интегрирования, который обеспечивал бы сохранение энергии с требуемой точностью. Второй подход заключается в построении численных схем решения уравнений движения со многими временными шагами и сулит ускорение счета.

Главной целью настоящей работы будет синтез упомянутых подходов. Как из физических, так и из чисто математических соображений мы выведем *критерий* выбора шага. Кроме того, на основе него и алгоритма Верле мы построим численную схему интегрирования уравнений движения с несколькими шагами интегрирования. Конечным результатом этого синтеза станет новый алгоритм локально-адаптивного выбора шага интегрирования. Он будет решать одновременно две актуальные на данный момент проблемы: проблему несохранения энергии и проблему повышения эффективности счета.

1. Математическая модель

Как известно, метод МД основан на классическом описании движения атомов, которые далее будут также называться частицами или телами. Выберем некоторую инерциальную систему отсчета; пусть число атомов равно N , радиус-вектор i -ой частицы мы обозначим за \mathbf{r}_i , скорость — за \mathbf{v}_i , массу — за m_i , см. рис. 1. Каждый атом мы считаем материальной точкой. Пусть потенциальная энергия их взаимодействия есть функция

$$U = U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t), \quad (1)$$

где t — время, $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_i(t)$, $\mathbf{v}_i = \mathbf{v}_i(t)$. Тогда сила, действующая на i -ое тело, запишется так:

$$\mathbf{F}_i = \mathbf{F}_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) = -\frac{\partial U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)}{\partial \mathbf{r}_i}, \quad i = \overline{1, N}, \quad (2)$$

а количественно движение системы будет выражаться вторым законом Ньютона:

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{v}_i, \quad \dot{\mathbf{v}}_i = \frac{\mathbf{F}_i}{m_i} \equiv \mathbf{w}_i, \quad t > 0, \quad i = \overline{1, N}. \quad (3)$$

Если же задано начальное условие (н. у.) вида

$$\mathbf{r}_i|_{t=0} = \mathbf{r}_i^*, \quad \mathbf{v}_i|_{t=0} = \mathbf{v}_i^*, \quad i = \overline{1, N}, \quad (4)$$

то система ОДУ (3), дополненная н. у. (4), является задачей Коши на неизвестные функции $\mathbf{r}_i(t)$, $\mathbf{v}_i(t)$.

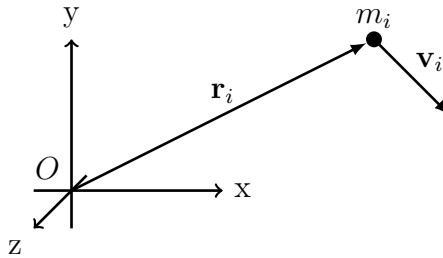


Рис. 1. Основные обозначения

Остановимся на виде потенциала U . Мы будем ограничиваться лишь парными взаимодействиями между частицами U_{ij} и внешними полями V_i :

$$U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N U_{ij}(r_{ij}) + \sum_{i=1}^N V_i(\mathbf{r}_i, t), \quad r_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}| = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|. \quad (5)$$

Запишем выражения для сил (2):

$$\mathbf{F}_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) = \mathbf{G}_i(\mathbf{r}_i, t) + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{f_{ij}(r_{ij})}{r_{ij}} (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \quad i = \overline{1, N}, \quad (6)$$

где $f_{ij}(r) = -dU_{ij}(r)/dr$, $\mathbf{G}_i(\mathbf{r}_i, t) = -\partial V_i(\mathbf{r}_i, t)/\partial \mathbf{r}_i$. Как правило, в конкретных примерах и вычислительных экспериментах мы будем использовать центрально-симметричный потенциал Леннарда—Джонса [21, 22] и полагать частицы тождественными ($m_i \equiv m$):

$$U_{ij}(r) \equiv U_{\text{LD}}(r) = 4\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right). \quad (7)$$

Математическая модель состоит из уравнений движения (3), начальных условий (4), выбора потенциалов межчастичного взаимодействия и внешних сил (5)—(7).

Часто для диагностики того или иного численного алгоритма решения задачи Коши (3)—(4) полезно знание некоторых первых интегралов или, другими словами, законов сохранения. Легко показать, что система ОДУ (3) имеет 7 первых интегралов в том случае, когда $V_i \equiv 0$: полная энергия

$$E = \sum_{i=1}^N \frac{m_i v_i^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N U_{ij}(r_{ij}), \quad (8)$$

суммарный импульс, или импульс центра масс,

$$\mathbf{p}_\Sigma = \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{v}_i, \quad (9)$$

и полный момент количества движения:

$$\mathbf{L}_\Sigma = \sum_{i=1}^N m_i [\mathbf{r}_i \times \mathbf{v}_i]. \quad (10)$$

Здесь следует сделать оговорку, что для сохранения энергии достаточно лишь условия отсутствия явной зависимости потенциала от времени:

$$\frac{\partial U}{\partial t} \equiv 0.$$

Итак, мы сформулировали математическую модель и обнаружили несколько первых интегралов, имеющих в рассматриваемой динамической системе. В следующей главе мы обсудим важный вопрос о выборе системы единиц.

2. Система единиц

Прежде чем приступить к изложению и, тем более, реализации численных методов интегрирования задачи Коши (3)—(4), необходимо выбрать систему единиц, в которой было бы удобно вести вычисления на компьютере и представлять результаты расчетов. Иначе говоря, нужно выполнить обезразмеривание всех размерных величин.

Обычно потенциалы, используемые в МД моделировании, содержат определенные константы, означающие характерную длину, время, энергию и т. д. По ним и должно проводиться обезразмеривание. Поясним это на примере потенциала Леннарда—Джонса (7). Число σ имеет размерность длины, число ε — энергии. В уравнениях движения присутствуют массы атомов; пусть m — масса одного из них. Тогда неизвестной остается лишь единица времени. Положим ее равной

$$[t] = \sigma \sqrt{\frac{m}{\varepsilon}}. \quad (11)$$

Для других потенциалов эта процедура продельвается аналогично. Следовательно, все числа, встречающиеся в результатах и условиях расчетов и относящиеся к соответствующим физическим величинам, суть значения последних в фиксированной выше системе единиц.

Дальше мы займемся исследованием одной из наиболее употребительных ныне разностных схем — схемы, или алгоритма, Верле на равномерной сетке по времени.

3. Классический алгоритм Верле

3.1. Разностная схема

Пусть траектории и скорости частиц требуется найти не при $t \geq 0$, а на конечном отрезке $[0, T]$. Тогда введем на нем сетку

$$\Omega_\tau = \{t_n = n\tau, n = 0, \dots, N_\tau\},$$

где τ — шаг по времени, число отрезков разбиения $N_\tau = T/\tau$. На множестве Ω_τ зададим сеточные функции \mathbf{r}_i^n и \mathbf{v}_i^n , которые аппроксимируют на сетке точное решение $\mathbf{r}_i(t)$ и $\mathbf{v}_i(t)$ задачи Коши (3)—(4) соответственно. Проекция точного решения на сетку:

$$[\mathbf{r}_i]^n = \mathbf{r}_i(t_n), \quad t_n \in \Omega_\tau, \quad i = \overline{1, N}.$$

Для скоростей и функций точного решения обозначение такое же. Запишем схему Верле в т. н. скоростной форме:

$$\begin{cases} \frac{\mathbf{r}_i^{n+1} - \mathbf{r}_i^n}{\tau} = \mathbf{v}_i^n + \frac{\mathbf{w}_i^n \tau}{2}, \\ \frac{\mathbf{v}_i^{n+1} - \mathbf{v}_i^n}{\tau} = \frac{\mathbf{w}_i^n + \mathbf{w}_i^{n+1}}{2}, \quad n = \overline{0, N_\tau - 1}; \\ \mathbf{r}_i^0 = \mathbf{r}_i^*, \quad \mathbf{v}_i^0 = \mathbf{v}_i^*; \quad i = \overline{1, N}. \end{cases} \quad (12)$$

Под «сеточным ускорением» \mathbf{w}_i^n мы подразумеваем вектор $\mathbf{w}_i(\mathbf{r}_1^n, \dots, \mathbf{r}_N^n, t_n)$.

Можно показать, что схема (12) допускает алгебраически эквивалентную запись с исключенными скоростями:

$$\begin{cases} \frac{\mathbf{r}_i^{n-1} - 2\mathbf{r}_i^n + \mathbf{r}_i^{n+1}}{\tau^2} = \mathbf{w}_i^n, \quad n = \overline{1, N_\tau - 1}; \\ \mathbf{r}_i^0 = \mathbf{r}_i^*, \quad \mathbf{r}_i^1 = \mathbf{r}_i^* + \mathbf{v}_i^* \tau + \frac{\mathbf{w}_i^* \tau^2}{2}; \quad i = \overline{1, N}. \end{cases} \quad (13)$$

Однако она не очень удобна из-за того, что скорости все равно придется вычислять и запоминать для получения значений полной энергии E . Если же знать скорости необязательно, то применение схемы Верле вида (13) более предпочтительно.

Реализация разностной схемы (12) или ее эквивалентной формы (13) тривиальна. В первой записи она такова: вычисляем положения тел на $(n+1)$ -ом шаге, находим ускорения или силы на этом же шаге, затем досчитываем скорости, переходим к следующему шагу и т. д. Во второй записи схема вообще явная. Фактически на каждом шаге силы вычисляются лишь один раз; оптимальное, с учетом третьего закона Ньютона, количество этих вычислений есть

$$N_{\text{FC}} = \frac{N(N-1)}{2} + N = \frac{N(N+1)}{2} = O(N^2). \quad (14)$$

Если силы являются дважды непрерывно дифференцируемыми функциями в достаточно малой окрестности точного решения, то нетрудно при помощи разложений по формуле Тейлора строго выяснить, что разностные уравнения в системе (12) аппроксимируют дифференциальные уравнения (3) со вторым порядком по временному шагу τ . Качественно это видно из того, что в формуле для \mathbf{r}_i^{n+1} задействована вторая производная от радиус-вектора; в формуле для \mathbf{v}_i^{n+1} в левой части стоит центрально-разностная производная

в точке $t_{n+0.5}$, а правая часть аппроксимирует $\mathbf{w}_i^{n+0.5}$ со вторым порядком (среднее арифметическое). Н. у. аппроксимированы с бесконечным порядком, т. е. абсолютно точно. Что касается устойчивости схемы и тем более сходимости к точному решению, то этот вопрос до сих пор является открытым. В настоящей работе мы докажем необходимое условие сходимости.

Заметим, что в отсутствие внешних сил схема Верле сохраняет на сетке как суммарный импульс, так и полный момент импульса, с точностью до ошибок округления. В этом легко убедиться непосредственной проверкой. Например, для суммарного импульса это делается так: записываем по формуле (9) \mathbf{p}_Σ^{n+1} , расписываем скорости на $(n + 1)$ -ом шаге согласно схеме, а из формул (6) при $V_i \equiv 0$ следует равенство нулю суммарного ускорения на любом шаге. Имеем $\mathbf{p}_\Sigma^{n+1} = \mathbf{p}_\Sigma^n$, ч. т. п. Аналогично проверяется сохранение полного момента количества движения. Более того, при ненулевых внешних силах на сетке будут справедливы в разностном исполнении две основные теоремы динамики об изменении количества и момента количества движения. К сожалению, схема Верле, как и *любая разностная схема решения задач МД*, не сохраняет полной энергии E .

Подведем итог. Схема Верле обладает многими преимуществами: она алгоритмически проста, не требует избыточно большого количества памяти и подсчетов сил, в отличие от алгоритмов Нордсика—Гира или схем Рунге—Кутты высокого порядка, имеет второй порядок аппроксимации и, наконец, не противоречит двум основным теоремам динамики об изменении количества и момента количества движения. Тем не менее она имеет и два серьезных недостатка: неконсервативность по энергии и вычислительную сложность на каждом шаге порядка $O(N^2)$, см. равенство (14). Решением этих проблем мы займемся в последующих главах; далее будет строго доказана неконсервативность по энергии, ее связь со сходимостью схемы и приведены результаты одного вычислительного эксперимента.

3.2. Необходимое условие сходимости

В этом параграфе мы полагаем потенциал U независимым явно от времени. Введем на сетке Ω_τ ошибку по энергии как

$$\Delta E^n = E^n - E^* = E(\mathbf{r}_1^n, \mathbf{v}_1^n, \dots, \mathbf{r}_N^n, \mathbf{v}_N^n) - E|_{t=0}. \quad (15)$$

Установим связь между сходимостью произвольной численной схемы решения задач МД и величиной ошибки по энергии (15).

Утверждение 1. Пусть все парные силы являются непрерывными функциями своих аргументов при положительных расстояниях между телами.

Пусть все внешние силы являются непрерывными в \mathbb{R}^3 функциями. Пусть траектории частиц суть гладкие на отрезке $[0, T]$ функции. Пусть имеется численная схема решения задачи Коши (3)–(4), порядок сходимости которой равен $\gamma > 0$. Тогда справедливо равенство

$$\max_{n=0, \dots, N_\tau} |\Delta E^n| = O(\tau^\gamma), \quad \tau \rightarrow 0. \quad (16)$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Уточним, что ни для каких двух частиц не должно иметь места совпадение их начальных положений, т. к. в противном случае потенциал U обращается в бесконечность при $t = 0$.

Внесем в траекторию и скорость i -ой частицы пробные (т. е. сколь угодно гладкие) возмущения $\Delta \mathbf{r}_i(t)$, $\Delta \mathbf{v}_i(t)$ соответственно. Потребуем от них неизменности н. у. (4). Запишем вызванное ими приращение полной энергии ΔE , пользуясь формулой Тейлора и удерживая лишь члены первого порядка по возмущению. Эта операция законна, поскольку, во-первых, из-за сохранения энергии для точного решения

$$\exists r_{\min} > 0 \quad | \quad r_{ij}(t) \geq r_{\min} \quad \forall i, j = \overline{1, N} \quad \forall t \in [0, T],$$

а во-вторых, потенциал U по условию Утверждения непрерывно дифференцируем при $r_{ij} \geq r_{\min}$. Итак,

$$\Delta E \approx \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{v}_i \Delta \mathbf{v}_i - \mathbf{F}_i \Delta \mathbf{r}_i.$$

Спроецируем полученное равенство на сетку Ω_τ :

$$[\Delta E]^n \approx \sum_{i=1}^N m_i [\mathbf{v}_i]^n [\Delta \mathbf{v}_i]^n - [\mathbf{F}_i]^n [\Delta \mathbf{r}_i]^n.$$

Придадим возмущениям $\Delta \mathbf{r}_i$, $\Delta \mathbf{v}_i$ конкретный смысл: пусть они являются ошибками, вносимыми разностной схемой:

$$[\Delta \mathbf{r}_i]^n = \Delta \mathbf{r}_i^n = \mathbf{r}_i^n - [\mathbf{r}_i]^n, \quad [\Delta \mathbf{v}_i]^n = \Delta \mathbf{v}_i^n = \mathbf{v}_i^n - [\mathbf{v}_i]^n, \quad i = \overline{1, N}.$$

Тогда $[\Delta E]^n$ очевидным образом переходит в ΔE^n , определенное равенством (15). Перепишем ошибку по энергии на n -ом узле в виде:

$$\Delta E^n \approx \sum_{i=1}^N m_i [\mathbf{v}_i]^n \Delta \mathbf{v}_i^n - [\mathbf{F}_i]^n \Delta \mathbf{r}_i^n. \quad (17)$$

Зафиксируем $t_n = \tilde{t}$ и устремим шаг τ к нулю ($n \rightarrow \infty$). Т. к. по условию схема сходится с порядком $\gamma > 0$, то имеют место соотношения

$$\Delta \mathbf{r}_i^n = \mathbf{O}(\tau^\gamma), \quad \Delta \mathbf{v}_i^n = \mathbf{O}(\tau^\gamma), \quad \tau \rightarrow 0, \quad i = \overline{1, N}.$$

С другой стороны, из гладкости траекторий и непрерывности сил при $r_{ij} > 0$ следует их ограниченность в окрестности точки $t = \tilde{t}$. Пользуясь теоремой Вейерштрасса, их также можно равномерно ограничить по модулю на всем отрезке $[0, T]$ константами, не зависящими от шага τ :

$$\exists M_{1,2} > 0 \quad | \quad \forall i = \overline{1, N} \quad \max_{t \in [0, T]} |\mathbf{v}_i(t)| \leq M_1, \quad \max_{t \in [0, T]} |\mathbf{F}_i(t)| \leq M_2.$$

В итоге с учетом (17) мы получаем

$$\Delta E^n = O(\tau^\gamma), \quad \tau \rightarrow 0.$$

В силу произвольности выбора точки $t = \tilde{t}$ окончательно имеем

$$\max_{n=0, \dots, N_\tau} |\Delta E^n| = O(\tau^\gamma), \quad \tau \rightarrow 0,$$

что и требовалось доказать. ■

Следствием доказанного утверждения является то, что любая разностная схема решения задач МД неконсервативна, т. е. полная энергия в расчете не сохраняется. Это относится и к схеме Верле. Равенство (16) полезно также для проверки правильности работы вычислительной программы. Проведя несколько расчетов одной и той же постановки (иначе говоря, н. у. неизменны) при разных шагах по времени, можно построить зависимость максимальной ошибки по энергии от шага в логарифмическом масштабе. В области достаточно мелких шагов она должна слабо отличаться от прямой, коэффициент наклона которой равен γ , порядку сходимости. Если это не наблюдается, то с необходимостью в процессе реализации алгоритма была допущена ошибка. Согласие априорных и апостериорных зависимостей, однако, не гарантирует корректности работы программы, но позволяет надеяться на оное.

В следующем параграфе мы приведем результаты вычислительного эксперимента, иллюстрирующие сделанные выше теоретические оценки.

3.3. Вычислительный эксперимент

Рассмотрим столкновение двух кластеров, состоящих из тождественных атомов Леннарда—Джонса, внешние поля равны нулю, парное взаимодействие между частицами определяется по формуле (7). Опишем н. у. и параметры расчетов.

Пусть $N_1 = 4$, $\beta = (N_1 - 1)/2$; обозначим $\mathbf{g} = (i, j, k)$ — вектор с целочисленными компонентами, $r = a = \sigma \sqrt[6]{2} = \sqrt[6]{2}$ — точка глобального минимума потенциала (7). Кластер \mathcal{A} , $N_1 \times N_1 \times N_1 = N_1^3$ атомов:

$$\mathbf{r}_{\mathbf{g}} = (a(i-\beta)+0.25, a(j-\beta)-10, a(k-\beta)), \quad \mathbf{v}_{\mathbf{g}} = (0, 5, 0), \quad i, j, k = \overline{0, N_1 - 1}.$$

Кластер \mathcal{B} , $(N_1 + 2) \times N_1 \times N_1 = N_1^2(N_1 + 2)$ атомов:

$$\mathbf{r}_{\mathbf{g}+\mathbf{d}} = (a(i - \beta) - 0.25, a(j - \beta) + 10, a(k - \beta)), \quad \mathbf{v}_{\mathbf{g}+\mathbf{d}} = (0, -5, 0),$$

$$i = \overline{0, N_1 + 1}, \quad j, k = \overline{0, N_1 - 1}, \quad \mathbf{d} = (N_1, N_1, N_1).$$

Всего имеется $N = 2N_1^2(N_1 + 1) = 160$ тел; прицельный параметр, или сдвиг кластеров относительно друг друга по оси Ox , равен 0.5, расстояние между их центрами в проекции на плоскость Ozy равно 20, относительная скорость сближения есть 10. Геометрический центр кубического кластера \mathcal{A} находится в точке $(0.25, -10, 0)$. Максимальное время T равно 3. Раскадровку столкновения по нескольким моментам времени можно найти в Приложении I, рис. 19–24.

Зададимся целью найти в этом частном случае зависимость максимальной за все время T абсолютной ошибки по энергии от величины шага по времени τ и сравнить ее с теоретической зависимостью (16).

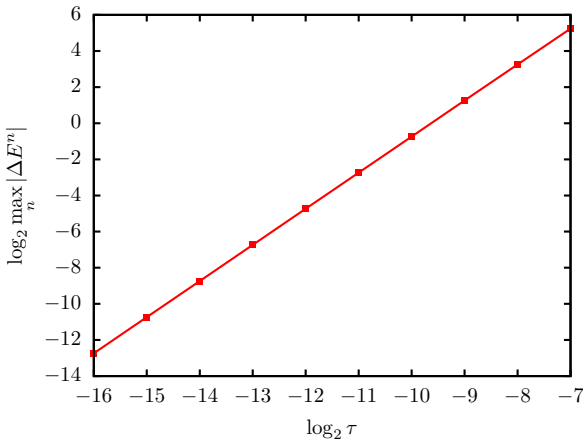


Рис. 2. Зависимость максимальной ошибки по энергии от шага по времени в логарифмическом масштабе по обеим осям

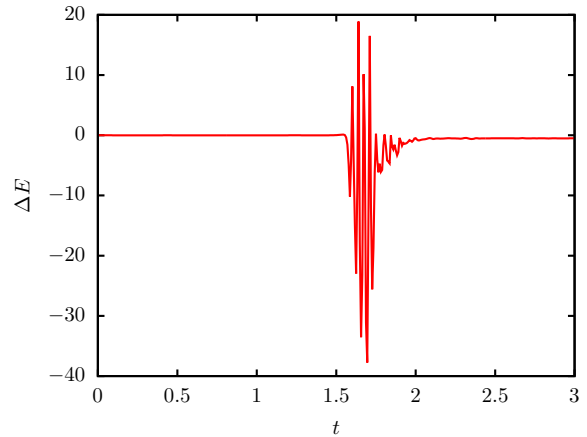


Рис. 3. Зависимость ошибки по энергии от времени, шаг τ равен 2^{-7} , начальная энергия $E^* \approx 1448$, столкновение кластеров происходит в момент времени $t \approx 1.663$

На рис. 2 приведена искомая зависимость. Хорошо видно, что она является прямой с коэффициентом наклона 2 (отклонение от двойки наблюдается лишь в 5-ом знаке после запятой). Полученный результат идеально согласуется с предсказанной ранее теоретической зависимостью (16) и тем, что схема Верле имеет второй порядок аппроксимации. Следовательно, разумно ожидать, что классическая схема Верле для данной постановки сходится со вторым порядком.

Теперь, после того как была изложена классическая схема Верле, были описаны основные ее свойства и было доказано необходимое условие сходи-

мости произвольной схемы численного решения задач МД, можно переходить к выводу критерия выбора шага в задаче двух тел, который затем ляжет в основу адаптивного алгоритма измельчения шага в задаче многих тел.

4. Критерий выбора шага в задаче двух тел

4.1. Основные идеи и предпосылки

В настоящей главе мы займемся выводом критерия выбора шага в задаче двух тел. Поясним, почему мы делаем это именно в частном случае задачи двух тел, а не трех, или вообще в случае N тел.

В главе, посвященной математической модели, мы условились рассматривать только парное взаимодействие между атомами. Широкая практика МД моделирования показала также, что ошибка по энергии возникает в основном из-за столкновений между частицами, т. е. тогда, когда потенциал парного взаимодействия меняется сильно. Это видно и при расчете постановки из параграфа 3.3, см. рис. 3. Тройные, четверные и т. д. столкновения происходят крайне редко, во всяком случае, их число значительно меньше числа двойных (парных) столкновений. Следовательно, естественно рассмотреть «элементарную», «базовую» задачу о столкновении или движении двух тел, выяснить, как ведет себя ошибка по энергии, и получить явное выражение для вычисления шага по текущим положениям и скоростям частиц. Отталкиваясь от этого результата, можно строить уже алгоритм адаптивного выбора шага в задаче многих тел.

Мы будем исходить из общего для всех N неравенства

$$\left| \frac{E^{n+1} - E^n}{\tau} \right| \leq I_{\max}, \quad n = \overline{0, N_\tau - 1}. \quad (18)$$

Смысл неравенства (18) таков: интенсивность схемного источника энергии

$$I_{\text{sch}}^n = \frac{E^{n+1} - E^n}{\tau} \quad (19)$$

не должна превосходить некоторую пороговую интенсивность I_{\max} . Последняя, в свою очередь, обязана удовлетворять условию

$$I_{\max} \ll |I_{\text{phys}}|, \quad I_{\text{phys}} = \frac{dE}{dt} = \frac{\partial E}{\partial t}. \quad (20)$$

Суть всех написанных выше соотношений (18)—(20) сводится к тому, что интенсивность схемного источника энергии должна быть много меньше интенсивности реальных, физических источников энергии. Такой подход к ограничению дрейфа энергии является более аккуратным, нежели непосредственное ограничение величины ошибки по энергии, по нескольким причинам.

Во-первых, далеко не всегда даже в точной постановке имеется сохранение энергии (внешние переменные во времени поля, стохастические источники), и непонятно тогда, какую ошибку считать «большой», а какую — «малой». Во-вторых, относительная ошибка по энергии при $\partial U/\partial t = 0$, как правило, невелика и составляет несколько процентов, в то время как интенсивность схемного источника крайне велика и может потенциально превосходить I_{phys} (уже при $\partial U/\partial t \neq 0$).

Если физических источников энергии в системе нет, то I_{max} необходимо выбирать другим способом. Один из них будет предложен в параграфе 4.6.

Итак, мы объяснили переход к частному случаю задачи двух тел, а также обосновали неравенство, ограничивающее дрейф энергии. Далее мы упростим неравенство (18) и получим явную формулу для вычисления шага.

4.2. Постановка задачи и переход в систему центра масс

Опишем постановку задачи. Число атомов равно двум, $N = 2$. Внешние поля мы полагаем равными нулю, $V_i \equiv 0$. Потенциал U сводится к одному слагаемому:

$$U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = U_{12}(r_{12}).$$

Как уже говорилось ранее, в этом случае \mathbf{p}_Σ является интегралом движения. Следовательно, центр масс системы двух тел движется равномерно и прямолинейно. Перейдем в систему отсчета, связанную с центром масс C :

$$\mathbf{r}_C = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{M}, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad M = m_1 + m_2.$$

Формулы перехода в исходную систему отсчета:

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_C + \frac{m_2}{M} \mathbf{r}, \quad \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_C - \frac{m_1}{M} \mathbf{r}.$$

Полная энергия системы дается выражением:

$$E = E(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \frac{Mv_C^2}{2} + \frac{\mu v^2}{2} + U(r), \quad r = |\mathbf{r}|, \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}.$$

Первое слагаемое в энергии постоянно как для точного, так и для разностного решения. Уравнения движения принимают вид:

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v}, \quad \dot{\mathbf{v}} = \mathbf{w}(\mathbf{r}) = \frac{f(r)}{\mu r} \mathbf{r}.$$

Н. у. :

$$\mathbf{r}|_{t=0} = \mathbf{r}^*, \quad \mathbf{v}|_{t=0} = \mathbf{v}^*.$$

Схема Верле допускает аналогичное преобразование:

$$\begin{cases} \frac{\mathbf{r}^{n+1} - \mathbf{r}^n}{\tau} = \mathbf{v}^n + \frac{\mathbf{w}^n \tau}{2}, \\ \frac{\mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{v}^n}{\tau} = \frac{\mathbf{w}^n + \mathbf{w}^{n+1}}{2}, & n = \overline{0, N_\tau - 1}; \\ \mathbf{r}^0 = \mathbf{r}^*, \quad \mathbf{v}^0 = \mathbf{v}^*. \end{cases} \quad (21)$$

Наконец, у нас все готово для вывода критерия.

4.3. Вывод критерия

Предполагая четырежды непрерывную дифференцируемость потенциала U в области $r > 0$, разложим $E^{n+1} - E^n$ в окрестности точки $(\mathbf{r}^n, \mathbf{v}^n)$ по формуле Тейлора для функций многих переменных с остаточным членом в форме Лагранжа до членов третьего порядка по τ включительно. Приращения аргументов берем из системы (21). Все производные вычисляются в точке \mathbf{r}^n , если не указано обратного.

Начнем с U .

$$\begin{aligned} U^{n+1} &= U(\mathbf{r}^{n+1}) = U(\mathbf{r}^n + \mathbf{v}^n \tau + \frac{1}{2} \mathbf{w}^n \tau^2) = \\ &= U^n + \tau \sum_{k=1}^3 \frac{\partial U}{\partial r_k} v_k^n + \frac{\tau^2}{2} \left(\sum_{k,l=1}^3 \frac{\partial^2 U}{\partial r_k \partial r_l} v_k^n v_l^n + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial U}{\partial r_k} w_k^n \right) + \\ &+ \tau^3 \left(\frac{1}{6} \sum_{k,l,m=1}^3 \frac{\partial^3 U}{\partial r_k \partial r_l \partial r_m} v_k^n v_l^n v_m^n + \frac{1}{4} \sum_{k,l=1}^3 \frac{\partial^2 U}{\partial r_k \partial r_l} (v_k^n w_l^n + w_k^n v_l^n) \right) + O(\tau^4). \end{aligned}$$

Т. к. потенциал U четырежды непрерывно дифференцируем в окрестности точки \mathbf{r}^n , то смешанные производные до 4-го порядка включительно, отличающиеся лишь порядком взятия, совпадают. Следовательно,

$$\begin{aligned} U^{n+1} - U^n &= \tau \sum_{k=1}^3 \frac{\partial U}{\partial r_k} v_k^n + \frac{\tau^2}{2} \left(\sum_{k,l=1}^3 \frac{\partial^2 U}{\partial r_k \partial r_l} v_k^n v_l^n + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial U}{\partial r_k} w_k^n \right) + \\ &+ \tau^3 \left(\frac{1}{6} \sum_{k,l,m=1}^3 \frac{\partial^3 U}{\partial r_k \partial r_l \partial r_m} v_k^n v_l^n v_m^n + \frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^3 \frac{\partial^2 U}{\partial r_k \partial r_l} v_k^n w_l^n \right) + O(\tau^4). \end{aligned}$$

Перейдем к кинетической энергии $K = (\mu v^2)/2$. Ее изменение:

$$K^{n+1} - K^n = \frac{\mu\tau}{2} \mathbf{v}^n (\mathbf{w}^n + \mathbf{w}^{n+1}) + \frac{\mu\tau^2}{8} |\mathbf{w}^n + \mathbf{w}^{n+1}|^2.$$

Ускорение на следующем слое:

$$\begin{aligned} \mathbf{w}_k^{n+1} = \mathbf{w}_k(\mathbf{r}^{n+1}) &= \mathbf{w}_k(\mathbf{r}^n + \mathbf{v}^n \tau + \frac{1}{2} \mathbf{w}^n \tau^2) = \mathbf{w}_k^n - \frac{\tau}{\mu} \sum_{l=1}^3 \frac{\partial^2 U}{\partial \mathbf{r}_k \partial \mathbf{r}_l} v_l^n - \\ &- \frac{\tau^2}{2\mu} \sum_{l=1}^3 \frac{\partial^2 U}{\partial \mathbf{r}_k \partial \mathbf{r}_l} \mathbf{w}_l^n - \frac{\tau^2}{2\mu} \sum_{l,m=1}^3 \frac{\partial^3 U}{\partial \mathbf{r}_k \partial \mathbf{r}_l \partial \mathbf{r}_m} v_l^n v_m^n + O(\tau^3), \quad k = \overline{1,3}. \end{aligned}$$

Вернемся к кинетической энергии:

$$\begin{aligned} K^{n+1} - K^n &= -\tau \sum_{k=1}^3 \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_k} v_k - \frac{\tau^2}{2} \left(\sum_{k,l=1}^3 \frac{\partial^2 U}{\partial \mathbf{r}_k \partial \mathbf{r}_l} v_k^n v_l^n + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_k} \mathbf{w}_k^n \right) - \\ &- \tau^3 \left(\frac{1}{4} \sum_{k,l,m=1}^3 \frac{\partial^3 U}{\partial \mathbf{r}_k \partial \mathbf{r}_l \partial \mathbf{r}_m} v_k^n v_l^n v_m^n + \frac{3}{4} \sum_{k,l=1}^3 \frac{\partial^2 U}{\partial \mathbf{r}_k \partial \mathbf{r}_l} v_k^n \mathbf{w}_l^n \right) + O(\tau^4). \end{aligned}$$

(Здесь мы учли равенство $\mu \mathbf{w}_k = -\partial U / \partial \mathbf{r}_k$.) Очевидно,

$$E^{n+1} - E^n = K^{n+1} - K^n + U^{n+1} - U^n.$$

Для изменения энергии за шаг окончательно получаем выражение

$$E^{n+1} - E^n = -\frac{\tau^3}{12} \sum_{k,l,m=1}^3 \frac{\partial^3 U}{\partial \mathbf{r}_k \partial \mathbf{r}_l \partial \mathbf{r}_m} v_k^n v_l^n v_m^n - \frac{\tau^3}{4} \sum_{k,l=1}^3 \frac{\partial^2 U}{\partial \mathbf{r}_k \partial \mathbf{r}_l} v_k^n \mathbf{w}_l^n + O(\tau^4). \quad (22)$$

Введем функцию

$$S = S(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \frac{1}{3} \sum_{k,l,m=1}^3 \frac{\partial^3 U}{\partial \mathbf{r}_k \partial \mathbf{r}_l \partial \mathbf{r}_m} v_k v_l v_m + \sum_{k,l=1}^3 \frac{\partial^2 U}{\partial \mathbf{r}_k \partial \mathbf{r}_l} v_k \mathbf{w}_l. \quad (23)$$

Интенсивность схемного источника с подстановкой $E^{n+1} - E^n$ из равенства (22) запишется так:

$$I_{\text{sch}}^n = \frac{E^{n+1} - E^n}{\tau} = -\frac{\tau^2}{4} S^n + O(\tau^3).$$

Пренебрегая членом $O(\tau^3)$, пользуясь неравенством (18), получим искомый критерий локального выбора шага

$$\tau = \tau_n = t_{n+1} - t_n \leq 2 \left(\frac{I_{\text{max}}}{|S^n|} \right)^{1/2}. \quad (24)$$

Обратим внимание на то, что сетка Ω_τ перестает быть равномерной.

Если учесть тот факт, что потенциал U зависит только от r , то выражение (23) для функции S несколько упрощается:

$$S = \frac{(\mathbf{r}\mathbf{v})^3}{r^5} \left(r f' - f - \frac{r^2}{3} f'' \right) + \frac{\mathbf{r}\mathbf{v}}{\mu r^3} (\mu v^2 (f - r f') - r^2 f f'). \quad (25)$$

В следующем параграфе мы выясним свойства функции, определяющей шаг в критерии (24).

4.4. Зависимость шага от координат и скоростей

Исследуем зависимость шага, рассчитываемого по критерию (24) (в котором неравенство заменено на равенство), от расстояния между частицами и относительной скорости. Поскольку движение двух тел является плоским, всевозможные взаимные расположения частиц можно свести к тому, которое изображено на рис. 4. И вектор \mathbf{r} , и вектор \mathbf{v} лежат в одной плоскости Oxy :

$$\mathbf{r} = -(\sqrt{r^2 - b^2}, b, 0), \quad \mathbf{v} = (v, 0, 0), \quad \mathbf{v}_1 = \mathbf{v}/2, \quad \mathbf{v}_2 = -\mathbf{v}/2,$$

где b — прицельный параметр.

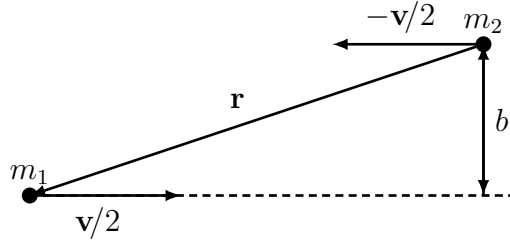


Рис. 4. Взаимное расположение частиц

Зависимости двоичного логарифма шага от расстояния между частицами и относительной скорости при разных значениях b , $I_{\max} = 0.01$ и при взаимном их расположении с рис. 4 приведены на рис. 5–6. Видно, что как при уменьшении расстояния между частицами, так и при увеличении скорости шаг уменьшается. Ясно, что величина b слабо влияет на вид графика функции $\tau = \tau(r, v)$. Заметим, что на обоих графиках присутствуют по две особенности — кривые, на которых шаг формально обращается в бесконечность, что можно строго показать, найдя нули функции S , задаваемой выражением (25). Здесь, конечно, нет никакого противоречия: обращение шага в бесконечность

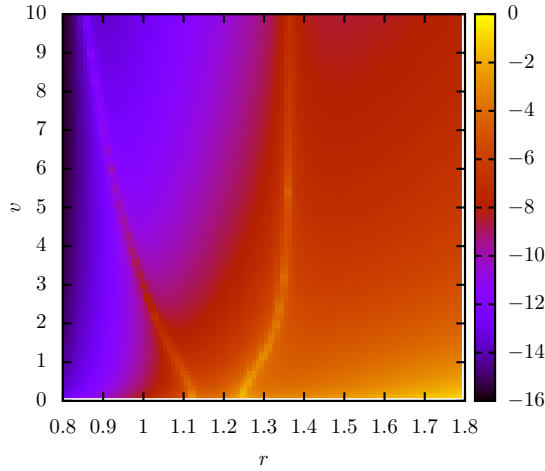


Рис. 5. Зависимость двоичного логарифма шага от расстояния между частицами и относительной скорости, пороговая интенсивность $I_{\max} = 0.01$, прицельный параметр $b = 0$

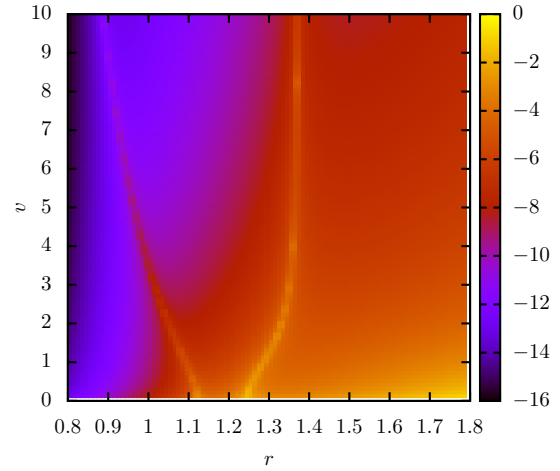


Рис. 6. Зависимость двоичного логарифма шага от расстояния между частицами и относительной скорости, пороговая интенсивность $I_{\max} = 0.01$, прицельный параметр $b = 0.5$

в смысле критерия (24) означает лишь то, что с точностью до членов четвертого порядка по шагу и выше локальное приращение энергии (22) равно нулю. Иначе говоря, критерий дает тривиальную оценку $\tau < +\infty$ на шаг τ .

Подведем итоги. Сделав некоторые предположения относительно свойств потенциала U , мы вывели из общего неравенства (18) критерий (24), или готовую формулу для явного вычисления временного шага по текущим положениям и скоростям частиц. Дополнительно мы проанализировали то, как зависит шаг, вычисляемый по критерию (24), от относительных расстояния и скорости. Однако, одного лишь критерия в виде (24) недостаточно, и необходимо вводить максимальный шаг, определяемый физикой задачи, например, характерным периодом собственных колебаний на дне парного потенциала (если такое дно имеется). Этим мы займемся в следующем параграфе на примере системы тождественных частиц, взаимодействующих посредством потенциала Леннарда—Джонса (7).

4.5. Максимальный шаг по времени

Найдем частоты собственных колебаний для системы двух одинаковых тел, взаимодействующих посредством потенциала Леннарда—Джонса (7). Ее

лагранжиан:

$$L = L(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = K - U = \frac{\mu v^2}{2} - U(r).$$

Здесь мы пренебрегли константой $(Mv_C^2)/2$, поскольку ее наличие или отсутствие не влияет на вид уравнений Лагранжа. Нетрудно показать, что все положения равновесия имеют вид:

$$\mathbf{r} = a\mathbf{e}, \quad |\mathbf{e}| = 1, \quad a = \sigma\sqrt{2}. \quad (26)$$

Их устойчивость качественно следует из формы графика потенциала U .

Линеаризуем потенциальную энергию в окрестности положения (26), вектор \mathbf{e} фиксирован. Сделаем замену

$$\mathbf{r} = a\mathbf{e} + \mathbf{q}, \quad \mathbf{v} = \dot{\mathbf{r}} = \dot{\mathbf{q}},$$

где $|\mathbf{q}|$ есть достаточно малая величина. Применив формулу Тейлора с остаточным членом в форме Пеано с учетом слагаемых до $o(|\mathbf{q}|^2)$, получим

$$\begin{aligned} U(\mathbf{r}) = U(a\mathbf{e} + \mathbf{q}) &= U(a\mathbf{e}) + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial U}{\partial r_i} \Big|_{a\mathbf{e}} q_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \frac{\partial^2 U}{\partial r_i \partial r_j} \Big|_{a\mathbf{e}} q_i q_j + o(|\mathbf{q}|^2) = \\ &= -\varepsilon + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \frac{\partial^2 U}{\partial r_i \partial r_j} \Big|_{a\mathbf{e}} q_i q_j + o(|\mathbf{q}|^2). \end{aligned}$$

Вторая смешанная производная от потенциала U в точке $a\mathbf{e}$ дается выражением

$$\frac{\partial^2 U}{\partial r_i \partial r_j} \Big|_{a\mathbf{e}} = J e_i e_j, \quad i, j = \overline{1,3}, \quad J = \frac{72\varepsilon}{a^2}.$$

Приближенный лагранжиан (константа ε опущена):

$$L \approx \frac{1}{2} \dot{\mathbf{q}}^T A \dot{\mathbf{q}} - \frac{1}{2} \mathbf{q}^T C \mathbf{q}.$$

Матрицы A и C являются постоянными:

$$\begin{aligned} A &= \|a_{ij}\|_{i,j=\overline{1,3}}, \quad C = \|c_{ij}\|_{i,j=\overline{1,3}}; \\ a_{ij} &= \mu \delta_{ij}, \quad c_{ij} = J e_i e_j, \quad i, j = \overline{1,3}, \end{aligned}$$

где δ_{ij} — символ Кронекера. Запишем линеаризованные уравнения Лагранжа:

$$A\ddot{\mathbf{q}} + C\mathbf{q} = \mathbf{0}. \quad (27)$$

Ищем решение уравнений (27) в виде $\mathbf{q}(t) = \mathbf{u}e^{i\omega t}$. В конечном счете мы получаем СЛАУ для определения амплитудного вектора \mathbf{u} :

$$(-A\omega^2 + C)\mathbf{u} = \mathbf{0}.$$

Она имеет нетривиальное решение при выполнении т. н. векового уравнения:

$$\det(-A\omega^2 + C) = 0.$$

Вычислив детерминант матрицы $-A\omega^2 + C$, который, как и должно было быть, не зависит от \mathbf{e} , запишем вековое уравнение более подробно:

$$\mu^2\omega^4(J - \mu\omega^2) = 0. \quad (28)$$

По ω^2 уравнение (28) имеет три решения: нулевое кратности два, соответствующее равномерному и прямолинейному движению и единственное нетривиальное

$$\omega_{\text{osc}} = \sqrt{\frac{J}{\mu}} = \frac{1}{a} \sqrt{\frac{72\varepsilon}{\mu}} = \frac{12}{a} \sqrt{\frac{\varepsilon}{m}},$$

т. к. $\mu = m/2$ в силу тождественности частиц. Период колебаний по определению есть

$$T_{\text{osc}} = \frac{2\pi}{\omega_{\text{osc}}} = \frac{\pi a}{6} \sqrt{\frac{m}{\varepsilon}}. \quad (29)$$

Максимальный шаг по времени τ_{max} оценивается так: чтобы различать собственные колебания на дне потенциала Леннарда—Джонса, необходимо разбить период колебаний T_{osc} , см. (29), по крайней мере на $1/\eta$ частей, где η лежит в пределах между 0.01 и 0.1. Итак, мы можем написать

$$\tau_{\text{max}} = \eta T_{\text{osc}} = \frac{\eta\pi a}{6} \sqrt{\frac{m}{\varepsilon}} \ll T_{\text{osc}}. \quad (30)$$

Оказывается, выбор шага τ , по своей величине не превосходящего τ_{max} , дает не только связь с физикой задачи, но и еще, как правило, гарантирует устойчивость схемы численного интегрирования.

4.6. Способ оценки параметра I_{max}

Поставим себе целью найти оценку для максимально допустимой интенсивности схемного источника энергии I_{max} в случае задачи N тел, и когда $\partial U/\partial t = 0$.

Пусть сначала $E^* \neq 0$. Предположим, что от нас требуется сохранение энергии с относительной точностью α . Тогда I_{max} можно оценить по формуле

$$I_{\text{max}} = \frac{\alpha|E^*|}{T}. \quad (31)$$

Поясним соотношение (31). Если значение I_{max} фиксировано, то максимальную ошибку по энергии можно получить, «идя» от момента времени $t = 0$ до

момента времени $t = T$ с одной и той же интенсивностью схемного источника I_{\max} «вниз» или «вверх», см. рис. 7. Обращая эти рассуждения, приходим к оценке (31).

Теперь пусть $E^* = 0$ (или очень близко к нулю, т. е. $\ll \varepsilon$). Тогда вновь справедливо равенство (31), но уже при замене $\alpha|E^*|$ на максимально допустимую абсолютную ошибку по энергии δ_{\max} :

$$I_{\max} = \frac{\delta_{\max}}{T}. \quad (32)$$

Наконец, после подробного исследования задачи двух тел, мы можем перейти к построению алгоритма локально-адаптивного выбора шага интегрирования в общей задаче МД, или задаче многих тел.

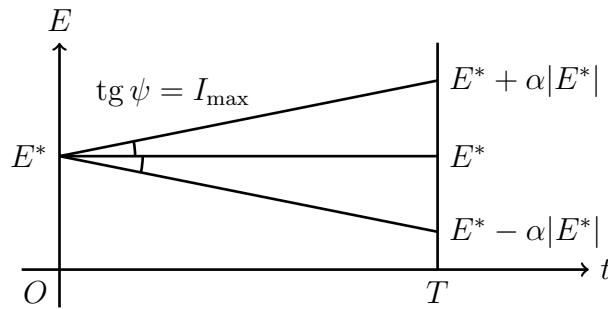


Рис. 7. К оценке I_{\max}

5. Алгоритм локально-адаптивного выбора шага интегрирования в задаче N тел

5.1. Цели алгоритма

Вспомним, какими особенностями обладают все задачи МД и численные методы их решения. Зная данные особенности, мы можем сформулировать проблемы, которые должен решать локально-адаптивный алгоритм выбора шага в задаче N тел.

Первая особенность связана с вычислительной сложностью, обусловленной выбором математической модели. Если ограничиваться рассмотрением парного взаимодействия и внешних полей, то, как было показано в главе, посвященной классическому алгоритму Верле, для расчета системы сил на каждом шаге потребуется количество операций, квадратичное по числу частиц N . Разумеется, при учете взаимодействий более высоких порядков степень при N также будет увеличиваться.

Вторая особенность относится уже чисто к численным методам. В главе 3 мы доказали, что любая разностная схема решения задач МД является неконсервативной по энергии, или, говоря более строго, имеет схемный источник (сток) энергии. Следовательно, в дискретной модели присутствует нефизичный процесс.

Таким образом, мы приходим к двум проблемам: трудоемкости расчета сил и наличию нефизичного процесса. Значит, целями алгоритма являются одновременное улучшение скорости счета и уменьшение влияния схемного источника энергии.

5.2. Построение алгоритма

Введем на отрезке $[0, T]$ равномерную сетку Ω_τ с весьма крупным шагом $\tau = \tau_{\max}$, см. равенство (30). Вычислим I_{\max} . При $\partial U/\partial t \neq 0$ нужно использовать оценку (20), а при $\partial U/\partial t = 0$ — формулу (31) или формулу (32).

Теперь изложим идею, лежащую в основе алгоритма. Пусть нам известны положения и скорости всех тел в момент времени $t = t_n$, и мы хотим «привести» их к следующему моменту времени $t = t_{n+1}$. Однократное применение классической схемы Верле здесь недопустимо, т. к. в силу больших значений τ это неминуемо приведет к грубым ошибкам в траекториях и к большим значениям интенсивности схемного источника. Поэтому необходимо ввести на отрезке $[t_n, t_{n+1}]$ некую *вспомогательную* достаточно мелкую *сетку*, и провести на нем некое *уточняющее* и не слишком затратное *интегрирование* уравнений движения. Предлагается сделать это следующим способом.

Начнем с построения вспомогательной сетки. Рассмотрим i -ую частицу. Устроим перебор всех пар частиц (i, j) , $j \neq i$ и применим к каждой из пар критерий выбора шага (24) для задачи двух тел. Чтобы избежать лишних трудностей, условимся при применении критерия вычислять шаги, которые являются половинами, четвертями и т. д. *базового шага* τ . Из всех полученных в этой процедуре $N - 1$ шагов возьмем наименьший шаг и обозначим его как τ_i^n . С этим *индивидуальным шагом* i -ая частица будет «продвигаться» к моменту времени t_{n+1} во время уточняющего интегрирования. Очевидно, в конечном счете на отрезке $[t_n, t_{n+1}]$ построится вспомогательная сетка с шагом

$$\tau_{\min}^n = \min_{i=1, N} \tau_i^n. \quad (33)$$

Прокомментируем мысль о выборе для каждой частицы ее индивидуального временного шага. Казалось бы, естественно взять один на всех шаг τ_{\min}^n , определенный равенством (33), и применить на вспомогательной сетке интегрирование по обычной, единой для всех схеме Верле (или по какой-либо

другой схеме). Однако в ансамбле N частиц всегда найдется хотя бы одна пара активно взаимодействующих частиц, которая сделает шаг τ_{\min}^n слишком мелким и которая заставит остальные пары просчитывать взаимодействия, являющиеся потенциально малыми и несущественными. Ясно тогда, что в этом случае никакого ускорения счета не будет — с таким же успехом можно было просто применить классическую схему Верле на подробной сетке.

Раскроем более формально сделанное выше на словах построение вспомогательной сетки. Удобно каждой частице в любой момент времени t_n приписать целочисленный неотрицательный параметр, т. н. *ранг разбиения*:

$$s_i^n = \max \left\{ 0, \max_{\substack{j=1, \overline{N} \\ j \neq i}} \left[\log_2 \left(\frac{(N-1)\tau^2 S(\mathbf{r}_{ij}^n, \mathbf{v}_{ij}^n)}{I_{\max}} \right)^{1/2} \right] \right\}, \quad i = \overline{1, N}, \quad (34)$$

который характеризует степень измельчения отрезка $[t_n, t_{n+1}]$:

$$\tau_i^n = \frac{\tau}{2^{s_i^n}}, \quad i = \overline{1, N}. \quad (35)$$

Имеет место очевидная связь

$$\tau_{\min}^n = \frac{\tau}{2^{s_{\max}^n}},$$

где

$$s_{\max}^n = \max_{i=1, \overline{N}} s_i^n. \quad (36)$$

Ради уменьшения громоздкости записи договоримся не писать у величин s_i^n , τ_i^n , s_{\max}^n , τ_{\min}^n индекс n сверху, молчаливо подразумевая, что все они относятся к узлу t_n сетки Ω_τ . Минимальный шаг τ_{\min} обозначим для краткости как δt .

В формуле (34) в качестве максимально допустимой интенсивности схемного источника мы берем не величину I_{\max} , которая определена для всей системы N тел, а величину $I_{\max}/(N-1)$, т. е. максимально допустимую интенсивность схемного источника в пересчете на количество пар для одной частицы. Также, в отличие от оригинального критерия (24), мы не пишем двойки перед корнем, лишь усиливая неравенство на шаг.

Обратимся к схеме уточняющего интегрирования. Пусть индекс k сверху означает номер узла вспомогательной сетки, $k = 0, 1, \dots$; для простоты запиши рассмотрим частный случай $n = 0$. Пересчет координат и скоростей i -ой частицы происходит по равноускоренному закону:

$$\begin{cases} \mathbf{r}_i^{(k+1)/2^{s_{\max}}} = \mathbf{r}_i^{k/2^{s_{\max}}} + \mathbf{v}_i^{k/2^{s_{\max}}} \delta t + \frac{\mathbf{w}_i^0 \delta t^2}{2}, \\ \mathbf{v}_i^{(k+1)/2^{s_{\max}}} = \mathbf{v}_i^{k/2^{s_{\max}}} + \mathbf{w}_i^0 \delta t \end{cases} \quad (37)$$

до тех пор, пока $k + 1$ не поделится нацело на $2^{s_{\max} - s_i}$, что эквивалентно выполнению соотношения $t = t_0 + \tau_i$, или не окажется справедливым равенство $k + 1 = 2^{s_{\max}}$ (достигнут следующий момент времени t_1). Если же хотя бы одно из этого будет верно, то необходимо «обновить» скорость и ускорение i -ой частицы по скоростной части схемы Верле (12):

$$\mathbf{v}_i^{(k+1)/2^{s_{\max}}} = \mathbf{v}_i^0 + \frac{\tau_i}{2} \left(\mathbf{w}_i^0 + \mathbf{w}_i^{(k+1)/2^{s_{\max}}} \right), \quad \mathbf{w}_i^0 \rightarrow \mathbf{w}_i^{(k+1)/2^{s_{\max}}}, \quad (38)$$

т. е. в системе (37) начальное ускорение \mathbf{w}_i^0 заменить на новое, а затем продолжить счет по тем же правилам.

Заметим, что схема уточняющего интегрирования является ничем иным, как классической схемой Верле, в которой, во-первых, не вычисляются медленно меняющиеся силы, а во-вторых, с крупным шагом «продвигаются» медленные частицы. Именно в этом и заключается ускорение счета — при одной и той же точности, понимаемой в смысле максимального за все время процесса абсолютного значения интенсивности схемного источника, предлагаемый алгоритм сделает меньше расчетов сил, нежели классический алгоритм Верле.

Итак, построение алгоритма завершено: была дана общая идея, лежащая в его основе, были объяснены построение вспомогательной сетки и выбор индивидуальных шагов, а также была полностью описана схема уточняющего интегрирования. В следующем параграфе мы составим краткое описание алгоритма.

5.3. Описание алгоритма и его блок-схема

Дадим пошаговое описание алгоритма локально-адаптивного выбора шага интегрирования в задаче N тел.

Шаг 0. Вводим на отрезке $[0, T]$ равномерную сетку Ω_τ с базовым шагом $\tau = \tau_{\max}$, определяемым равенством (30). Полагаем $n = 0$. Задаем начальные условия для неизвестных сеточных функций $\mathbf{r}_i^n, \mathbf{v}_i^n$. Оцениваем I_{\max} при $\partial U/\partial t \neq 0$ по неравенству (20), а при $\partial U/\partial t = 0$ — по формуле (31) или (32).

Шаг $n + 1$. Рассмотрим момент времени $t = t_n$, в который нам известны приближенные значения координат \mathbf{r}_i^n и скоростей \mathbf{v}_i^n всех частиц. Разобьем этот шаг на два этапа.

Этап I. Вычисляем по формуле (34) ранг разбиения и по формуле (35) индивидуальный шаг для каждой частицы. Затем определяем максимальный ранг разбиения s_{\max} и минимальный шаг по времени δt , см. (36) и (33) соответственно. Строим на отрезке $[t_n, t_{n+1}]$ вспомогательную равномерную

сетку с мелким шагом δt , распространяем на нее область определения сеточных функций $\mathbf{r}_i^n, \mathbf{v}_i^n$.

Этап II. Выполняем на отрезке $[t_n, t_{n+1}]$ уточняющее интегрирование уравнений движения. На каждом промежуточном шаге с номером $k = 0, \dots, 2^{s_{\max}} - 1$ пересчитываем по равноускоренному закону (37) координаты и скорости всех частиц. Если же для i -ой частицы оказывается, что $k+1$ делится нацело на $2^{s_{\max}-s_i}$ или равняется $2^{s_{\max}}$, то обновляем скорость и ускорение i -ой частицы по скоростной части схемы Верле, см. (38). В противном случае сразу переходим к следующей частице или увеличиваем k на единицу, если $i = N$.

После завершения уточняющего интегрирования мы знаем координаты и скорости всех частиц в момент времени t_{n+1} . Если $n+1 < N_\tau$, то увеличиваем n на единицу и переходим к новому шагу алгоритма. Иначе, если $n+1 = N_\tau$, то, очевидно, достигнут момент времени $t = T$ и поставленная задача Коши решена численно, останов.

Работу алгоритма в промежутке времени от t_n до t_{n+1} иллюстрирует блок-схема, приведенная на рис. 8.

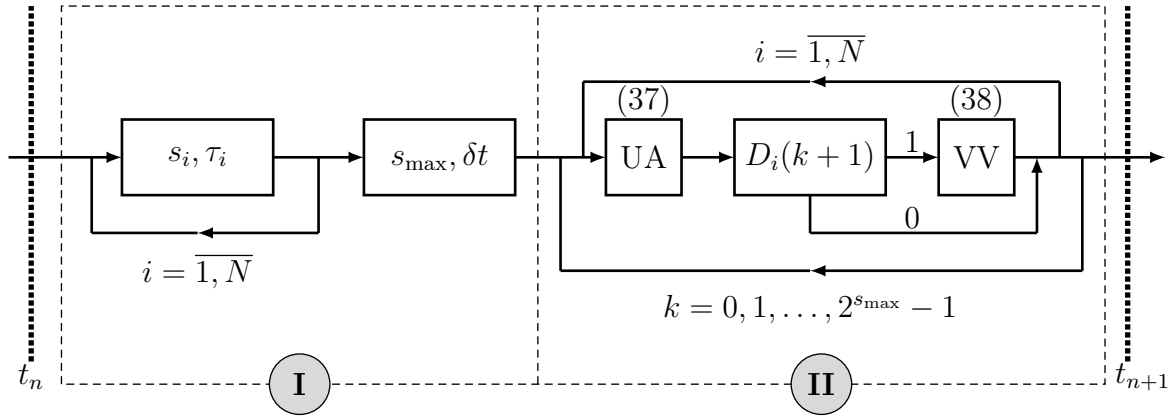


Рис. 8. Блок-схема алгоритма локально-адаптивного выбора шага интегрирования в задаче N тел. *Этап I* — построение вспомогательной сетки. *Этап II* — уточняющее интегрирование на $[t_n, t_{n+1}]$ уравнений движения

Поясним сокращения, использованные в блок-схеме. Аббревиатура «UA» означает «равноускоренный» (от англ. «Uniformly Accelerated»), а «VV» — «скорости Верле» (от англ. «Verlet's Velocities»). Номера в скобках над соответствующими блоками (UA, VV) обозначают ссылки на применяемые в данном блоке формулы. Функция $D_i(k+1)$ при неотрицательных k задается так:

$$D_i(k+1) = \begin{cases} 1, & k+1 : 2^{s_{\max}-s_i} \quad \text{или} \quad k+1 = 2^{s_{\max}}, \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases} \quad (39)$$

Стрелки, направленные влево и помеченные индексом, меняющимся в некоторых пределах, означают цикл по этому индексу. В тех блоках, в которых написаны обозначения величин (ранга разбиения, индивидуального шага и т. д.), подразумевается вычисление этих величин.

Подытожим все сказанное в настоящей главе. Сначала мы обозначили цели алгоритма, или те проблемы, которые он должен решать. Затем мы построили алгоритм локально-адаптивного выбора шага интегрирования для решения задачи N тел. Мы также свели все действия алгоритма в блок-схему и привели его пошаговое описание. Далее, в главе, посвященной результатам численного моделирования, мы увидим, насколько хорошо предлагаемый алгоритм соответствует предъявляемым ему требованиям.

6. Результаты численного моделирования

6.1. Столкновение кластеров

Апробируем метод локально-адаптивного выбора шага интегрирования на примере модельной задачи из параграфа 3.3 о столкновении двух кластеров, состоящих из тождественных атомов Леннарда—Джонса.

Условия эксперимента те же, что и в параграфе 3.3. Дополнительно мы должны подобрать параметры η и I_{\max} . Возьмем $\eta = 0.01$ и обозначим полученный по формуле (30) базовый шаг за τ' , а $I_{\max} = 1$, отвечающим сохранению энергии с относительной точностью в $\alpha \approx 0.2\%$, что отражено в равенстве (31).

Чтобы понять, как происходит локально-адаптивное измельчение сетки Ω_τ , построим распределение (или гистограмму) частиц по рангам разбиения s_i , и исследуем его (или ее) поведение во времени. Данная зависимость приведена на рис. 9. Напомним, что момент столкновения двух кластеров есть $t \approx 1.663$. Видно, что до момента столкновения частицы почти не измельчают свои шаги — подавляющее большинство из них двигаются с шагами, лежащими в диапазоне от базового шага τ' до шага $\tau'/4$ включительно. Затем, в момент столкновения и его малой окрестности, почти все частицы измельчают свои шаги вплоть до значения $\tau'/512$ (максимальный ранг разбиения равен 9, т.е. $2^9 = 512$). Ближе к финалу $t = T$, на разлете после столкновения, все частицы вновь двигаются с крупными шагами.

Проанализируем то, как зависит максимальное за все время процесса абсолютное значение интенсивности схемного источника от величины базового шага τ для разных алгоритмов: классического Верле, локально-адаптивного и известного алгоритма RESPA [20] (от англ. Reference System Propagator

Algorithm). Не вдаваясь в подробности описания сути и терминологии последнего алгоритма, упомянем, что в нем под «холодными» частицами мы подразумеваем частицы с нулевым рангом разбиения, а в качестве мелкого шага берем δt из локально-адаптивного алгоритма. Грубо говоря, в таком рассмотрении отличие предлагаемого алгоритма от алгоритма RESPA состоит лишь в схеме уточняющего интегрирования.

Вернемся к зависимости. Начальный базовый шаг для всех алгоритмов равен τ' , а затем мельчится в два раза. Сама зависимость приведена на рис. 10. Масштаб по обеим осям логарифмический.

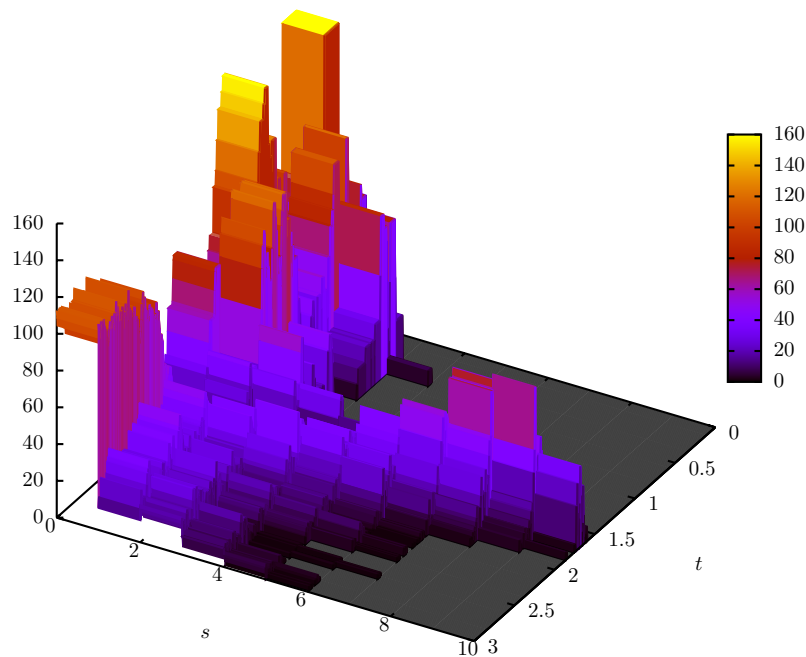


Рис. 9. Эволюция распределения частиц по рангам разбиения во времени, на вертикальной оси отложено число частиц

Хорошо заметно, что локально-адаптивный алгоритм укладывается в отведенные ему рамки, за исключением лишь одной крайне правой точки. В ней I_{\max} превышает на 20%, что можно объяснить откидыванием члена $O(\tau^3)$ при выводе критерия. Уже следующая слева точка лежит под барьером I_{\max} . При очень малых базовых шагах локально-адаптивный алгоритм естественным образом переходит в классический алгоритм Верле, т. к. никакого локального измельчения сетки не происходит.

Очевидно, сравнение локально-адаптивного алгоритма с алгоритмом Верле при одном и том же значении τ некорректно — в схеме Верле не происходит

никаких промежуточных (внутри отрезка $[t_n, t_{n+1}]$) вычислений, и поэтому он проиграет в точности. Корректным же является сравнение при одном и том же максимальном абсолютном значении интенсивности схемного источника. Если судить по рис. 10, то хорошей парой для сравнения является предлагаемый алгоритм на сетке $\Omega_{\tau'/2}$ и классический алгоритм Верле на сетке $\Omega_{\tau'/64}$. Этим сравнением мы займемся далее.

Что же касается алгоритма RESPA, то тут мы наблюдаем неудовлетворительную картину. Интенсивность схемного источника крайне велика, а сходимость по сетке сильно немонотонная. Бесспорно, применение этого алгоритма дает обещанное авторами ускорение счета, но цена его весьма сомнительна.

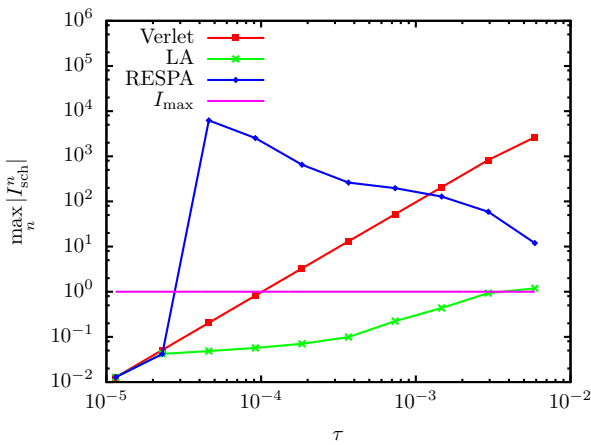


Рис. 10. Зависимость максимального за весь расчет модуля интенсивности схемного источника от величины базового шага τ , приведены результаты для алгоритмов Верле, локально-адаптивного (LA), RESPA

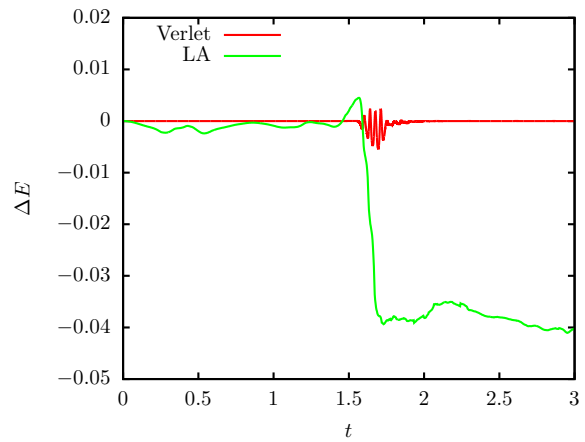


Рис. 11. Зависимость ошибки по энергии от времени для алгоритма Верле на сетке с шагом $\tau'/64$ и для локально-адаптивного алгоритма с базовым шагом $\tau'/2$

Сопоставим результаты, получаемые при использовании классического алгоритма Верле на сетке $\Omega_{\tau'/64}$ и локально-адаптивного алгоритма на сетке $\Omega_{\tau'/2}$.

Начнем с графиков зависимости ошибки по энергии от времени, см. рис. 11. Казалось бы, схема Верле здесь лучше, т. к. меньше и амплитуда осцилляций, и ошибка при $t = T$. Однако более внимательное и аккуратное рассмотрение говорит нам о том, что оба алгоритма порождают ничтожно малый дрейф энергии: Верле — $3.5 \cdot 10^{-4}\%$, локально-адаптивный — $2.8 \cdot 10^{-3}\%$. Вторая цифра почти на два порядка меньше заявленной относительной точности $\alpha \approx 0.2\%$. Более того, ограничение величины ошибки по энергии не являлось прямой целью построения предлагаемого алгоритма, хотя и возникло косвенно при оценке I_{\max} в случае $\partial U/\partial t = 0$. Целью же являлось огра-

ничество интенсивности схемного источника, или производной по времени от ошибки по энергии.

На рис. 12 приведены графики зависимости интенсивности схемного источника от времени. Ясно, что размах их обоих приблизительно одинаков и укладывается в пределы $\pm I_{\max}$, чего и следовало ожидать, т. к. именно из этого соображения мы и подбирали сетки для двух алгоритмов. Таким образом, построенный в настоящей работе алгоритм отвечает первому из предъявленных ему в параграфе 5.1 требований.

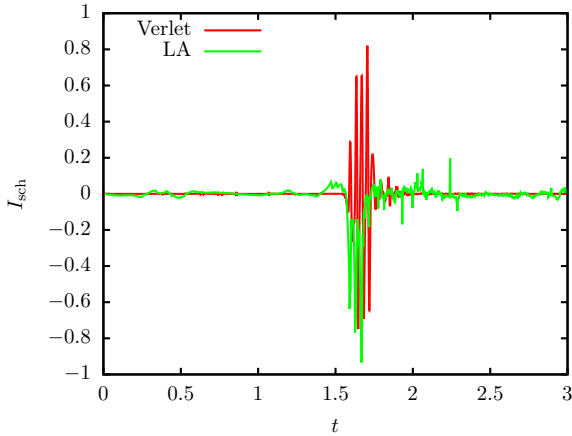


Рис. 12. Зависимость интенсивности схемного источника от времени для алгоритма Верле на сетке с шагом $\tau'/64$ и для локально-адаптивного алгоритма с базовым шагом $\tau'/2$

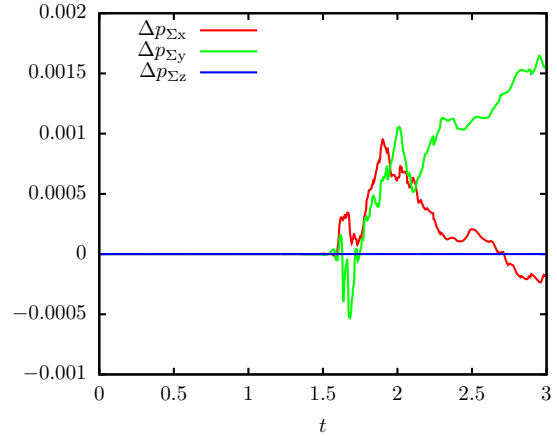


Рис. 13. Несохранение суммарного импульса в расчете, начальное значение суть $\mathbf{p}_\Sigma^* = (0, -160, 0)$

На рис. 13–14 изображены графики зависимости невязок в компонентах суммарного импульса \mathbf{p}_Σ и суммарного момента импульса \mathbf{L}_Σ от времени, см. определения (9) и (10). Алгоритм — локально-адаптивный выбор шага, сетка $\Omega_{\tau'/2}$. Как видим, эти величины не сохраняются в расчете, в отличие от точной постановки и алгоритма Верле. Опять же, при построении нашего алгоритма мы не требовали сохранения суммарных импульса и момента импульса. Кроме того, невязки в компонентах векторов \mathbf{p}_Σ и \mathbf{L}_Σ чрезвычайно малы — относительные значения не более чем $10^{-3}\%$ и $6 \cdot 10^{-4}\%$ соответственно. То же справедливо и для их производных по времени. Здесь можно добавить, что эта «проблема» решается легко путем прямого применения третьего закона Ньютона в расчете сил; но это уже выходит за рамки настоящей работы.

Наконец, обсудим ускорение счета, которое мы объявили одной из целей нашего алгоритма. Разумно характеризовать его отношением A количества

подсчетов сил в алгоритме Верле к количеству подсчетов сил в локально-адаптивном алгоритме, при одинаковой точности обоих. Найдем зависимость A от N . Сперва сделаем ряд замечаний. Выбор сеток, равно как и остальных параметров, для алгоритмов тот же, что и был ранее. Очевидно, максимально допустимая интенсивность схемного источника I_{\max} отнюдь не является одинаковой для разных N , поскольку это экстенсивная величина. В расчете значение I_{\max} нормировалась так:

$$I_{\max}(N) = I_{\max}(160) \cdot \frac{N}{160} = \frac{N}{160}.$$

Число частиц N варьировалось путем изменения N_1 в пределах от 2 до 10. Напомним, что для данной постановки $N = 2N_1^2(N_1 + 1)$.

Искомая зависимость величины A от количества частиц N приведена на рис. 15. При малых N ускорение счета велико и достигает от 4 до 7 раз. При $N \geq 504$ значения A выходят на асимптоту, лежащую в пределах от 3.25 до 3.50. Следовательно, уверенно достигнута и вторая цель, поставленная перед алгоритмом — ускорение счета.

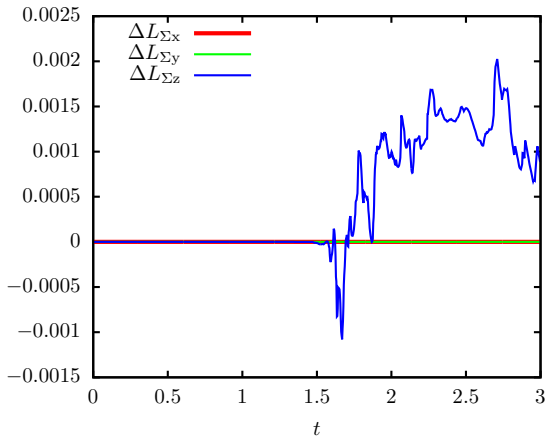


Рис. 14. Несохранение суммарного момента импульса в расчете, начальное значение $\mathbf{L}_\Sigma^* \approx (0, 0, -338.9)$

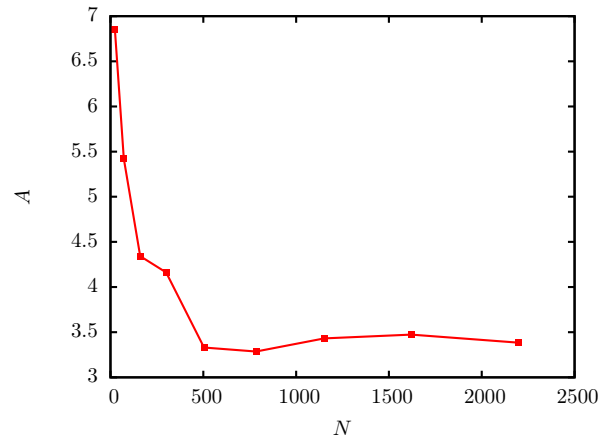


Рис. 15. Ускорение счета, или отношение A количества подсчетов сил в алгоритме Верле на сетке $\Omega_{\tau'/64}$ к количеству подсчетов сил в локально-адаптивном алгоритме на сетке $\Omega_{\tau'/2}$, в зависимости от числа частиц N

Резюмируем все изложенное в параграфе. Сначала мы проанализировали то, как происходит выбор индивидуальных шагов по критерию и увидели его качественное согласие с физикой явления. После этого мы сравнили 3 алгоритма: классический Верле, локально-адаптивного выбора шага и RESPA. Мы обоснованно пришли к выводу, что алгоритм RESPA недостаточно хорош

в смысле точности. Затем мы провели подробное сравнение алгоритма Верле и локально-адаптивного алгоритма при их одинаковой, наперед заданной точности. Сравнение показало, что построенный в настоящей работе алгоритм работает в 3–3.5 раза быстрее, при том что постановка модельной задачи является весьма жесткой.

6.2. Пробивание мембраны

Покажем, что алгоритм локально-адаптивного выбора шага может потенциально давать ускорение счета, превышающее 1 порядок. Сделаем это на примере модельной задачи о пробивании мембраны одной частицей. Опишем условия эксперимента.

Итак, имеется мембрана, состоящая из $N_x \times N_y \times N_z$ тождественных атомов Леннарда–Джонса с начальными положениями

$$\mathbf{r}_{\mathbf{g}} = a(i - \beta_x, j - \beta_y, -k), \quad i = \overline{0, N_x - 1}, \quad j = \overline{0, N_y - 1}, \quad k = \overline{0, N_z - 1}$$

и нулевыми начальными скоростями. Здесь $\mathbf{g} = (i, j, k)$ — вектор с целочисленными компонентами, $\beta_x = (N_x - 1)/2$, $\beta_y = (N_y - 1)/2$. Далее мы будем полагать $N_x = N_y = 10$, число N_z будет варьироваться в пределах от 1 до 10. Помимо мембраны, есть еще один атом, который ничем не отличается от составляющих ее атомов. В начальный момент времени его координаты и скорости таковы:

$$\mathbf{r}_N^* = \frac{10}{\sqrt{2}}(1, 0, 1), \quad \mathbf{v}_N^* = -\frac{20}{\sqrt{2}}(1, 0, 1).$$

Очевидно, к моменту времени $t \approx 0.5$ он достигнет центра верхней (т. е. лежащей в плоскости Oxy) грани мембраны, и затем упруго отразится от нее, не пересекая плоскость $z = 0$. Сама же мембрана испытает деформации. Наглядные картины пробивания для разных ее толщин N_z можно найти в Приложении II, см. рис. 25–30. Внешние поля равны нулю.

Перечислим значения прочих параметров. Максимальное время $T = 1.5$, пороговая интенсивность схемного источника $I_{\max} = 1$ (относительная ошибка по энергии равна 5%), параметр $\eta = 0.01$. Полученный при таком η по формуле (30) базовый шаг обозначим снова за τ' .

Заметим, что такая несколько простая постановка не является искусственной. Она может лечь в основу более сложных и практических задач о воздействии частиц с высокими энергиями, например, на мембрану биологической клетки, моноатомный слой графена и др.

Обратимся к результатам моделирования. Так же, как и в предыдущем параграфе, начнем с анализа работы критерия. На рис. 16 изображена эволюция распределения частиц по рангам разбиения во времени при толщине

мембраны $N_z = 1$. Легко видеть, что в момент падения N -ой частицы на мембрану происходит измельчение шагов у тех частиц, которые находятся близко к точке падения. Затем, после того как N -ая частица упруго отразилась и улетела достаточно далеко, начинается разрушение мембраны, которое вызывает достаточно слабое, вплоть до $\tau'/4$, измельчение шагов у подавляющего большинства атомов.

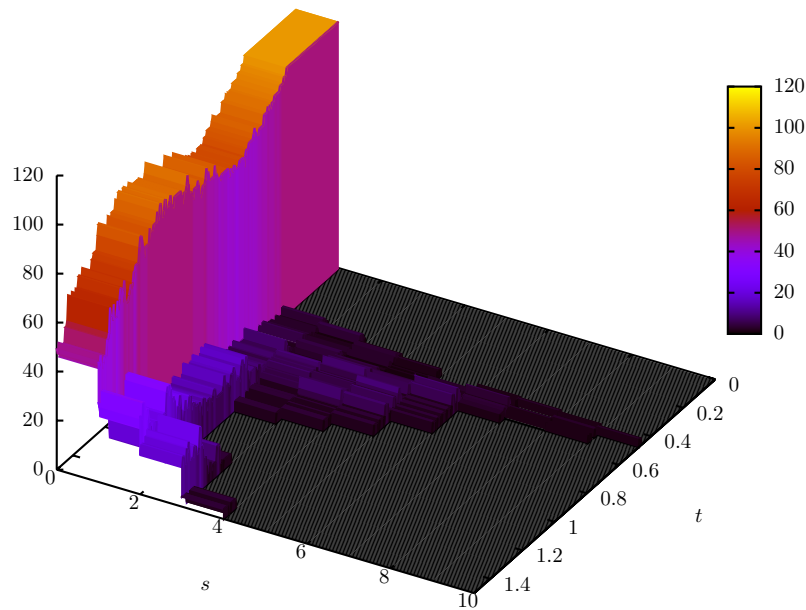


Рис. 16. Эволюция распределения частиц по рангам разбиения во времени, на вертикальной оси отложено число частиц, толщина мембраны $N_z = 1$

Подберем сетку для классического алгоритма Верле, такую, что точность его сопоставима с точностью алгоритма локально-адаптивного выбора шага. Толщина мембраны, как и прежде, равна 1. На рис. 17 изображены зависимости интенсивности схемного источника от времени для схемы Верле на сетке $\Omega_{\tau'/64}$ и для локально-адаптивного алгоритма на сетке $\Omega_{\tau'}$. Обратим внимание на то, что ограничение по интенсивности схемного источника в случае метода локально-адаптивного выбора шага выполнено с запасом в порядок. Точность метода Верле хоть и хуже, но по порядку величины сравнима с точностью предлагаемого алгоритма.

Теперь, поставив два алгоритма в равные условия по точности, мы можем оценить ускорение счета. Варьируя число частиц N путем изменения толщины мембраны N_z в пределах 1–10, строим зависимость от N отношения A

количества подсчетов сил в алгоритме Верле на сетке $\Omega_{\tau'/64}$ к количеству подсчетов сил в локально-адаптивном алгоритме на сетке $\Omega_{\tau'}$. Разумеется, вместе с увеличением N мы увеличиваем пропорционально и I_{\max} .

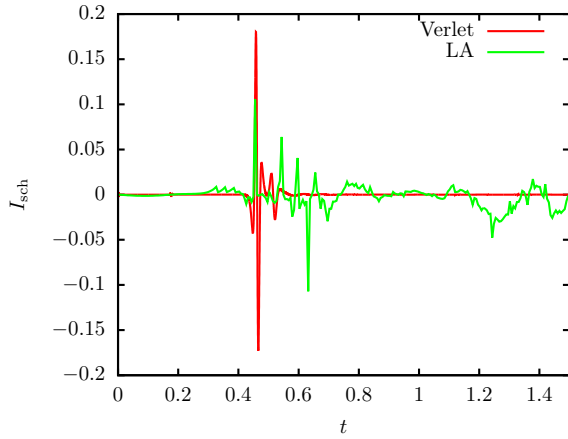


Рис. 17. Зависимость интенсивности схемного источника от времени для алгоритма Верле на сетке с шагом $\tau'/64$ и для локально-адаптивного алгоритма с базовым шагом τ' , $N_z = 1$

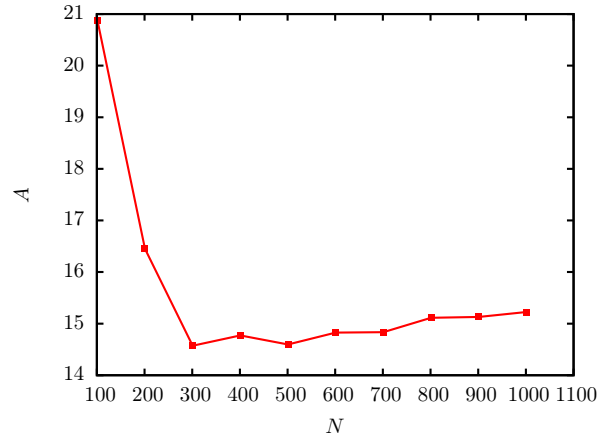


Рис. 18. Ускорение счета, или отношение A количества подсчетов сил в алгоритме Верле на сетке $\Omega_{\tau'/64}$ к количеству подсчетов сил в локально-адаптивном алгоритме на сетке $\Omega_{\tau'}$, в зависимости от числа частиц N . N_z меняется от в пределах 1 до 10

На рис. 18 изображен график этой зависимости. При $N_z = 1$ и при $N_z = 2$ ускорение счета весьма велико. Оно составляет 21 и 16.5 раз соответственно. Ясно, что при достаточно больших N ускорение счета асимптотически выходит на величину 14.5–15. Отсюда следует, что для данной постановки оно больше, чем 1 порядок, как и было заявлено в начале этого параграфа.

Заключение

В завершение работы перечислим полученные в ней результаты. В главе 3 мы сформулировали и строго доказали необходимое условие сходимости произвольного численного метода решения задач МД. Были приведены результаты вычислительного эксперимента, подтверждающие в частном случае справедливость этого условия сходимости.

Глава 4 была посвящена критерию выбора шага в задаче двух тел. Было установлено, каким образом должен вестись контроль за дрейфом или флуктуациями энергии при расчете задач МД. Из общего неравенства на интенсивность схемного источника мы вывели критерий выбора шага или готовую

формулу его вычисления по координатам и скоростям частиц. Была подробно исследована зависимость шага от определяющих его параметров. На основе физических соображений, связанных с собственными колебаниями на дне парного потенциала Леннарда—Джонса, мы получили максимальный шаг по времени. В конце главы мы дали рекомендации по оценке максимально допустимой интенсивности схемного источника в том случае, когда потенциальная энергия системы частиц не зависит явно от времени.

Критерий задачи двух тел лег в основу алгоритма локально-адаптивного выбора шага интегрирования в задачах МД, развитого в главе 5. Здесь мы аккуратно, шаг за шагом, построили алгоритм, приводя физические и вычислительные доводы в пользу тех или иных действий, предпринимаемых в этом процессе.

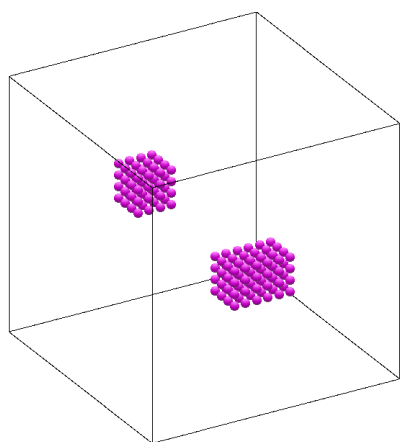
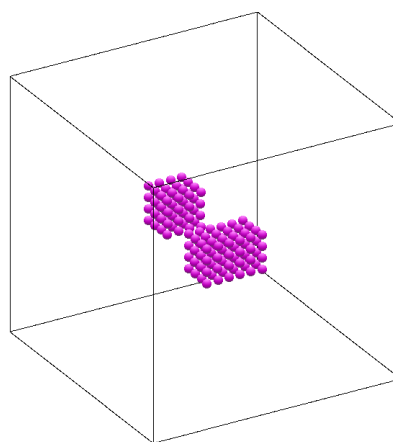
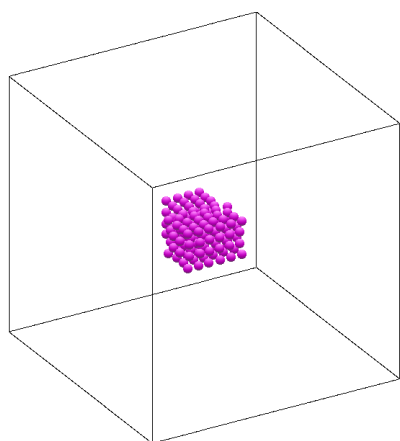
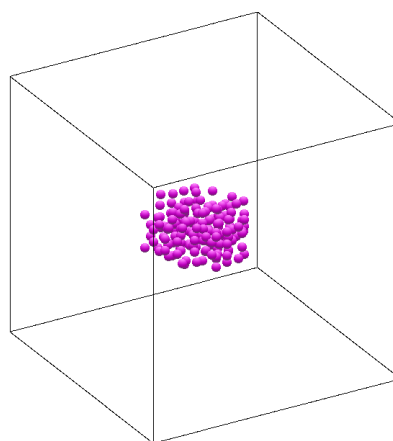
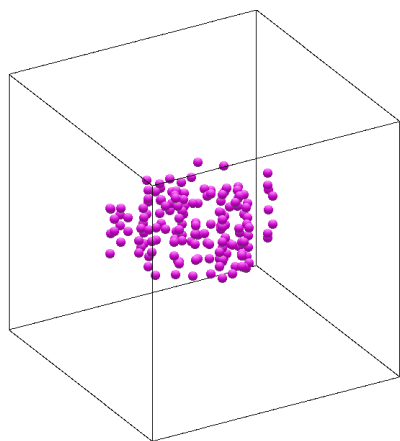
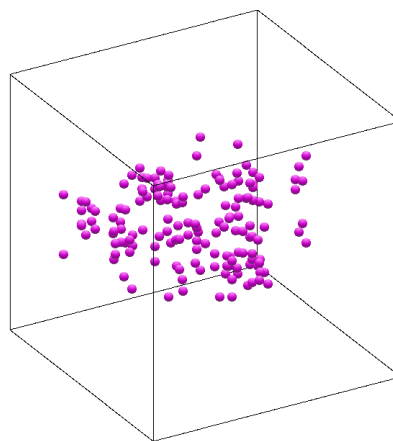
Результаты численного моделирования были изложены в главе 6.

В параграфе 6.1 мы убедились в правильности работы критерия, сопоставив на качественном уровне особенности явления столкновения двух атомных кластеров и получаемую при вычислениях эволюцию распределения частиц по шагам (рангам разбиения). Мы провели сравнение 3 алгоритмов, среди которых были классический алгоритм Верле, локально-адаптивный алгоритм, предлагаемый в настоящей работе, и алгоритм RESPA. Последний оказался недостаточно точным. При одной и той же, фиксированной заранее, точности первых двух алгоритмов было изучено, какое ускорение счета может дать метод локально-адаптивного выбора шага по сравнению с классическим методом Верле. Для рассмотренной довольно жесткой модельной задачи ускорение счета достигло 3—3.5 раза, при достаточно большом числе частиц.

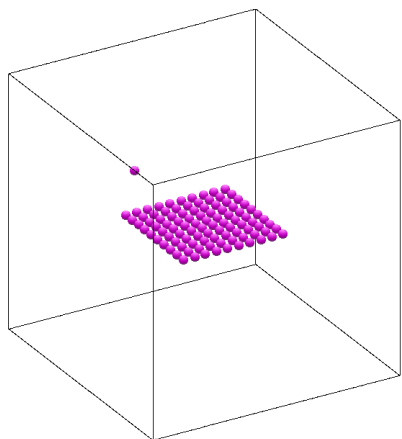
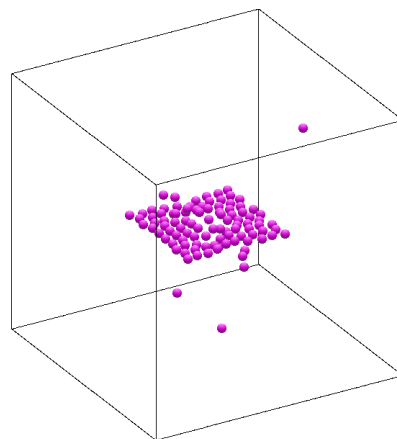
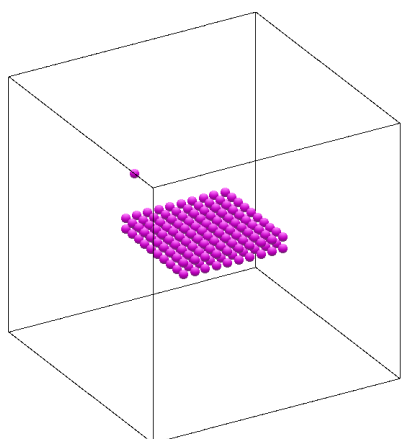
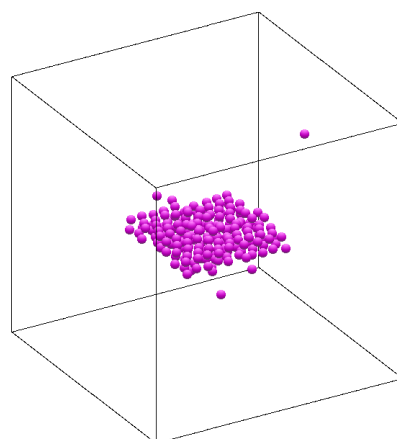
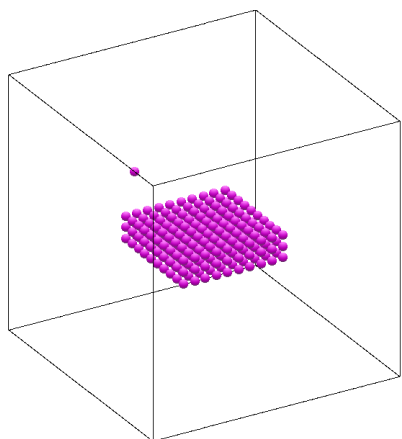
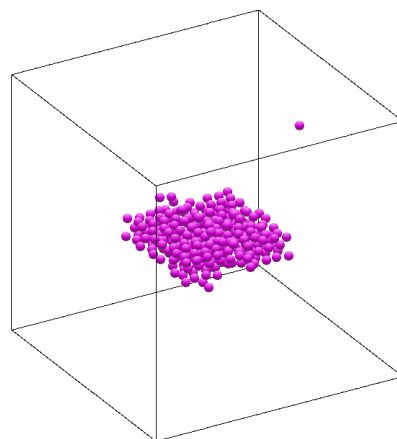
В параграфе 6.2 для модельной задачи о пробивании мембраны одной частицей мы увидели, что аналогичная величина составила 14.5—15 раз, т. е. больше 1 порядка. Вообще говоря, она существенно зависит от постановки задачи, и для флюидных систем ускорение счета может быть и выше.

Таким образом, построенный алгоритм отвечает обоим предъявляемым ему требованиям: во-первых, он позволяет контролировать величину интенсивности схемного источника, и, во-вторых, обеспечивает ускорение счета относительно даже такого экономичного алгоритма, как алгоритм Верле.

Приложение I. Визуализация столкновения кластеров

Рис. 19. Момент времени $t = 0$ Рис. 20. Момент времени $t = 1$ Рис. 21. Момент времени $t \approx 1.664$ Рис. 22. Момент времени $t = 2$ Рис. 23. Момент времени $t = 2.5$ Рис. 24. Момент времени $t = 3$

Приложение II. Визуализация пробивания мембраны

Рис. 25. Момент времени $t = 0$, $N_z = 1$ Рис. 26. Момент времени $t = 1.5$, $N_z = 1$ Рис. 27. Момент времени $t = 0$, $N_z = 2$ Рис. 28. Момент времени $t = 1.5$, $N_z = 2$ Рис. 29. Момент времени $t = 0$, $N_z = 3$ Рис. 30. Момент времени $t = 1.5$, $N_z = 3$

Список литературы

1. *Alder B. J., Wainwright T. E.* Transport Processes in Statistical Mechanics / Edited by I. Prigogine. — N.Y.: Wiley—Interscience, 1958.
2. Метод молекулярной динамики в физической химии / Ред.: Товбин Ю. К. — М.: Наука, 1996, 334 с.
3. *Лагарьков А. Н., Сергеев В. М.* Метод молекулярной динамики в статистической физике // Успехи физических наук, 1978, т. 125, № 3, с. 409—448.
4. *Verlet L.* Computer «Experiments» on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard—Jones Molecules // Physical Review, 1967, v. 159, n. 1, pp. 98—103.
5. *Бауман Е. Г., Шевкунов С. В.* Взаимодействие магнитных волн с ионизированным воздухом в присутствии кластерных ионов $H^+(H_2O)_n$ // Математическое моделирование, 2000, т. 12, № 9, с. 45—54.
6. *Пестряев Е. М.* О периодических граничных условиях для цепной молекулы в нерешеточной модели // Математическое моделирование, 2004, т. 16, № 2, с. 102—110.
7. *Вахрушев А. В., Липанов А. М.* Численный анализ атомной структуры и формы металлических наночастиц // Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 2007, т. 47, № 10, с. 1774—1783.
8. *Зыкова Е. Ю., Мосунов А. С., Юрасова В. Е.* Методика компьютерного моделирования распыления кристаллов // Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 2008, т. 48, № 10, с. 1908—1920.
9. *Рит М.* Наноконструирование в науке и технике. Введение в мир нанорасчета. — Москва—Ижевск: НИЦ «РХД», 2005, 160 с.
10. *Рапапорт Д. К.* Искусство молекулярной динамики. — НИЦ «РХД», ИКИ, 2012, 632 с.
11. *Мирный В., Фрэнер М.* Об одной программе моделирования молекулярной динамики газа с элементами распараллеливания алгоритма // Вычислительные технологии, 2001, т. 6, № 3, с. 32—50.
12. *Норман Г. Э., Стегайлов В. В.* Метод классической молекулярной динамики: замысел и реальность // Наноструктуры. Математическая физика и моделирование, 2011, т. 4, № 1, с. 31—58.

13. *Подрыга В. О.* Моделирование процесса установления термодинамического равновесия методом молекулярной динамики // Математическое моделирование, 2010, т. 22, № 11, с. 39—48.
14. *Подрыга В. О.* Моделирование процесса установления термодинамического равновесия нагретого металла // Математическое моделирование, 2011, т. 23, № 9, с. 105—119.
15. *Springel V., Yoshida N., White S. D. M.* GADGET: a code for collisionless and gasdynamical cosmological simulations // *New Astronomy*, 2001, v. 6, pp. 79—117.
16. *Springel V.* The cosmological simulation code GADGET-2 // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 2005, vol. 364, pp. 1105—1134.
17. *Tuckerman M. E., Berne B. J., Rossi A.* Molecular dynamics algorithm for multiple time scales: Systems with disparate masses // *Journal of Chemical Physics*, 1991, v. 94, n. 2, pp. 1465—1469.
18. *Tuckerman M. E., Berne B. J., Martyna G. J.* Molecular dynamics algorithm for multiple time scales: Systems with long range forces // *Journal of Chemical Physics*, 1991, v. 94, n. 10, pp. 6811—6815.
19. *Tuckerman M. E., Berne B. J., Martyna G. J.* Reversible multiple time scale molecular dynamics // *Journal of Chemical Physics*, 1992, v. 97, n. 3, pp. 1990—2001.
20. *Zhou R., Stuart S. J., Berne B. J.* Molecular dynamics for nonequilibrium systems in which there are a small number of very hot particles in a cold bath: Reference system propagator methods // *Journal of Chemical Physics*, 1996, v. 105, n. 1, pp. 235—239.
21. *Jones J. E.* On the Determination of Molecular Fields. II. From the Equation of State of a Gas // *Proceedings of the Royal Society of London A*, 1924, v. 106, pp. 463—477.
22. *Каплан И. Г.* Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы; пер. с англ. — М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012, 394 с.

Содержание

Введение	3
1. Математическая модель	5
2. Система единиц	7
3. Классический алгоритм Верле	7
3.1. Разностная схема	7
3.2. Необходимое условие сходимости	9
3.3. Вычислительный эксперимент	11
4. Критерий выбора шага в задаче двух тел	13
4.1. Основные идеи и предпосылки	13
4.2. Постановка задачи и переход в систему центра масс	14
4.3. Вывод критерия	15
4.4. Зависимость шага от координат и скоростей	17
4.5. Максимальный шаг по времени	18
4.6. Способ оценки параметра I_{\max}	20
5. Алгоритм локально-адаптивного выбора шага интегрирования в задаче N тел	21
5.1. Цели алгоритма	21
5.2. Построение алгоритма	22
5.3. Описание алгоритма и его блок-схема	24
6. Результаты численного моделирования	26
6.1. Столкновение кластеров	26
6.2. Пробивание мембраны	31
Заключение	33
Приложение I. Визуализация столкновения кластеров	35
Приложение II. Визуализация пробивания мембраны	36
Список литературы	37