

Lekce 8

Metoda molekulární dynamiky II

Numerická integrace pohybových rovnic

Osnova

1. Metody konečných diferencí
2. Verletovy metody
3. Eulerova metoda
4. Další numerické metody
5. Použití v molekulárně-dynamických simulacích
6. Diskretizační a zaokrouhlovací chyby

Metody konečných diferencí

MD simulace jako matematický problém

Soustava obyčejných diferenciálních rovnic 2. řádu

$$\ddot{\vec{r}}_K = \vec{f}_K(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) \quad \left[\vec{f}_K = \vec{F}_K / M_K, K = 1, \dots, N \right]$$

s počáteční podmínkou

$$\vec{r}_K(t = t_{\text{ini}}) = \vec{r}_{K0}, \quad \dot{\vec{r}}_K(t = t_{\text{ini}}) = \vec{v}_{K0}.$$

Numerické řešení (metoda konečných diferencí)

Řešení hledáme na intervalu $\langle t_{\text{ini}}, t_{\text{fin}} \rangle$ v konečném počtu bodů

$$t_0 = t_{\text{ini}}, \quad t_1 = t_{\text{ini}} + \Delta t, \quad \dots, \quad t_j = t_{\text{ini}} + j\Delta t, \quad \dots, \quad t_n = t_{\text{fin}}$$

tak, že k určení hodnot řešení v čase t_j využívané informace o řešení v časech předcházejících $t_{j-1}, t_{j-2}, \dots, t_0$.

Metody konečných diferencí

Klasifikace

- $t_{j-1} \rightarrow t_j$ explicitní jednokrokové metody
- $t_j, t_{j-1} \rightarrow t_j$ implicitní jednokrokové metody
- $t_{j-1}, t_{j-2}, \dots, t_{j-r} \rightarrow t_j$ explicitní vícekrokové metody (prediktory)
- $t_j, t_{j-1}, \dots, t_{j-r} \rightarrow t_j$ implicitní vícekrokové metody (korektory)

Implicitní metody se obvykle užívají k upřesnění kroku provedeného metodou explicitní. Jsou výpočetně náročné.

Verletovy metody

Pro jednoduchost se omezíme na jedinou diferenciální rovnici $\ddot{r} = f(r, t)$.

Základní Verletova metoda

Označení: $r^{(j)} = r(t_j)$, $f^{(j)} = f(r^{(j)}, t_j)$, $\Delta t = t_j - t_{j-1}$.

$$r^{(j+1)} = 2r^{(j)} - r^{(j-1)} + f^{(j)}\Delta t^2$$

Vlastnosti

- dvoukrokový prediktor
- chyba výpočtu v jednom kroku $\sim o(\Delta t^3)$

Odvození

$$r(t + \Delta t) = r(t) + \dot{r}(t) \cdot \Delta t + \frac{1}{2} \ddot{r}(t) \Delta t^2 + \frac{1}{6} \dddot{r}(t) \Delta t^3 + o(\Delta t^3)$$

$$r(t - \Delta t) = r(t) - \dot{r}(t) \cdot \Delta t + \frac{1}{2} \ddot{r}(t) \Delta t^2 - \frac{1}{6} \dddot{r}(t) \Delta t^3 + o(\Delta t^3)$$

$$r(t + \Delta t) + r(t - \Delta t) = 2r(t) + \ddot{r}(t) \Delta t^2 + o(\Delta t^3) = 2r(t) + f(r(t), t) \Delta t^2 + o(\Delta t^3)$$

$$r(t + \Delta t) \approx 2r(t) - r(t - \Delta t) + f(t) \Delta t^2$$

$$r^{(j+1)} \approx 2r^{(j)} - r^{(j-1)} + f^{(j)} \Delta t^2$$

Verletovy metody

Modifikace základní Verletovy metody

„Leap-frog“ Verletova metoda

$$\dot{r}(t + \frac{\Delta t}{2}) = \dot{r}(t - \frac{\Delta t}{2}) + f(t) \Delta t$$
$$r(t + \Delta t) = r(t) + \dot{r}(t + \frac{\Delta t}{2}) \Delta t$$

Rychlostní Verletova metoda

$$r(t + \Delta t) = r(t) + \dot{r}(t) \Delta t + \frac{1}{2} f(r(t), t) \Delta t^2$$
$$\dot{r}(t + \Delta t) = \dot{r}(t) + \frac{1}{2} [f(r(t), t) + f(r(t + \Delta t), t + \Delta t)] \Delta t$$

Prediktor - korektor!

Eulerova metoda

K použití Verletovy metody potřebujeme znát $r^{(0)}$ a $v^{(0)}$, počáteční podmínka MD simulace je ale zadaná pomocí r_0 a v_0 .

Eulerova metoda = přechod $(r_0, v_0) \rightarrow (r^{(0)}, r^{(1)})$ = start metody Verletovy

$$r^{(1)} = r_0 + v_0 \cdot \Delta t.$$

Vlastnosti

- jednokroková metoda,
- není moc přesná, chyba $\sim o(\Delta t)$ (používáme jen jednou, takže tato nepřesnost celkový výsledek nemusí významně ovlivnit).

Zpřesněná Eulerova metoda

$$r^{(1)} = r_0 + v_0 \cdot \Delta t + \frac{1}{2} f(r_0, t_0) \Delta t^2 = r_0 + v_0 \Delta t + \frac{1}{2} f^{(0)} \Delta t^2.$$

Další numerické metody

Existuje celá řada dalších metod pro numerické řešení obyčejných diferenciálních rovnic a jejich soustav:

- **jednokrokové** - metody Rungeho-Kuttovy, Gearovy,
- **více krokové** - metody Adamsovy-Bashforthovy-Moultonovy.

Obvykle výpočetně velmi náročné a v MD simulacích používané jen zřídka.

Použití Eulerovy a Verletovy metody v MD simulaci

První krok - Eulerova metoda

$$\vec{r}_K^{(1)} = \vec{r}_{K0} + \vec{v}_{K0} \Delta t$$

resp.

$$\vec{r}_K^{(1)} = \vec{r}_{K0} + \vec{v}_{K0} \cdot \Delta t + \frac{1}{2} \vec{f}_K^{(0)} \Delta t^2$$

Další kroky - opakování Verletovy metody

$$\vec{r}_K^{(j+1)} = 2\vec{r}_K^{(j)} - \vec{r}_K^{(j-1)} + \vec{f}^{(j)} \Delta t^2$$

Diskretizační a zaokrouhlovací chyby

Lokální diskretizační chyba

Chyba způsobená v jednom integračním kroku aproximacemi použitými v rámci metody.

Např. u Verletovy metody je lokální diskretizační chyba řádu $\mathcal{O}(\Delta t^3)$, u metody Eulerovy řádu $\mathcal{O}(\Delta t)$ a u zpřesnění Eulerovy metody $\mathcal{O}(\Delta t^2)$.

Globální diskretizační chyba

Rozdíl mezi přesným řešením rovnice v daném čase, $r(t_j)$, a přibližným řešením získaným pomocí zvolené metody, $r^{(j)}$, tedy $r^{(j)} - r(t_j)$. Vzniká kumulací lokálních diskretizačních chyb.

Většinou je o řád větší než lokální diskretizační chyba, takže například u Verletovy metody je řádu $\mathcal{O}(\Delta t^2)$.

Diskretizační a zaokrouhlovací chyby

Minimalizace diskertizačních chyb

$$\Delta t \rightarrow 0$$

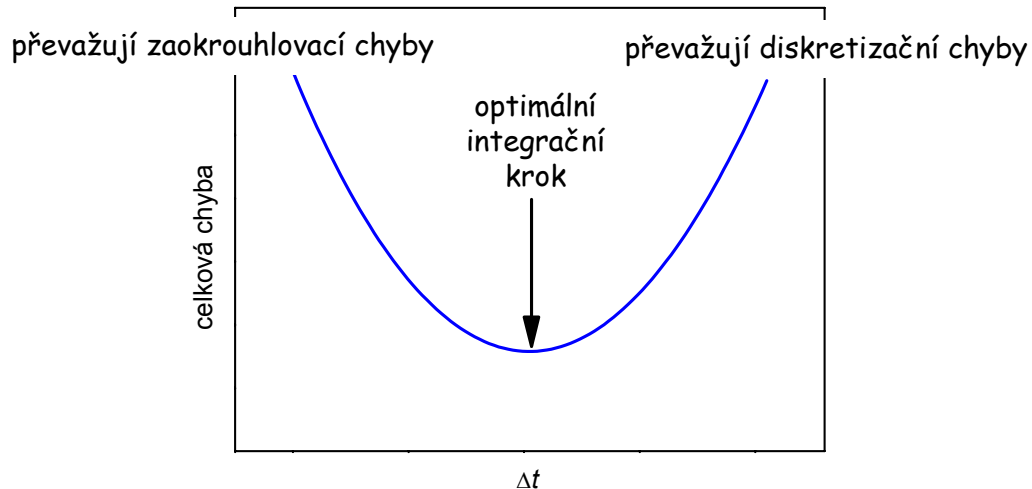
Problémy

Se zmenšujícím se integračním krokem Δt

- vzrůstají výpočetní nároky,
- zvyšuje se vliv zaokrouhlovacích chyb.

Zaokrouhlovací chyby

Vznikají v důsledku konečné přesnosti aritmetických operací (cca 15-17 desetinných míst v dvojnásobné přesnosti).



Diskretizační a zaokrouhlovací chyby

Nároky kladené molekulární dynamikou

Důraz není kladen na individuální trajektorie částic, ale na:

- zachování celkové energie,
- přesnost počítaných termodynamických parametrů.

Jak se chyby projevují

- systematický drift
- náhodný šum

Více vadí systematický drift!

Doporučená literatura

I. NEZBEDA, J. KOLAFKA, M. KOTRLA

Úvod do počítačových simulací, kap. 3
Karolinum, Praha 2003

D. C. RAPAPORT

The Art of Molecular Dynamics Simulations, kap. 3
Cambridge University Press, Cambridge 2004

M. M. WOOLFSON, G. J. PERT

An Introduction to Computer Simulation, kap. 1.3, 2
Oxford University Press, New York 1999

A. HINCHLIFFE

Molecular Modelling for Beginners, kap. 9
J. Wiley, Chchester 2006