

**Отчет по гранту ФПМУ ИТЭС ОИВТ РАН**  
**Казеева Никиты Александровича**  
**за 2011/2012 г.г. по теме**  
**«Разработка алгоритмов интегрирования уравнений**  
**движения с переменным шагом для метода молекулярной динамики»**

**Введение**

Метод молекулярной динамики (МД) широко используется в различных областях вычислительных наук: квантовой химии, вычислительной биологии, науках о материалах и физике плазмы. Одной из определяющих составляющих МД модели является выбор потенциала взаимодействия. Сложность программной реализации тех или иных потенциалов зависит от ряда причин. Основной трудностью в применении методов молекулярной динамики к моделированию неидеальной плазмы является квантовый характер взаимодействия электронов с ионами на коротких расстояниях. Для решения этой проблемы существует ряд подходов, один из которых основан на представлении электронов в виде гауссовских волновых пакетов. Этот метод получил название молекулярной динамики с волновыми пакетами (МДВП) [2]. Он позволяет учесть эффекты вырождения электронного газа и более точно моделировать столкновения частиц на близких расстояниях, при этом оставаясь вычислительно более простым, нежели метод функционала плотности. Тем не менее, динамика получающихся уравнений чрезвычайно иррегулярна и для их интегрирования требуется либо очень маленький, либо переменный шаг численной схемы.

**Описание использованных методов интегрирования с варьируемым шагом**

Традиционно для интегрирования уравнений движения в МД используются явные разностные схемы, такие как схема с перешагиванием (Leap-Frog), схемы Рунге-Кутты различного порядка и др. При этом шаг интегрирования выбирается исходя из требований к точности сохранения интегралов движения, например, полной энергии. Как правило этот шаг является постоянным и не изменяется в процессе расчета.

Цель разработки схемы с переменным шагом - удерживать вычислительную ошибку в заданных границах, обеспечивая достаточную точность рассчитываемых характеристик системы и, в тоже время, не тратить компьютерное время напрасно.

Мы отталкивались от метода, подробно описанного в [3], устроенного следующим образом: начиная с первого шага, длина которого выбрана произвольно, система интегрируется схемой Рунге-Кутты 4-го порядка. После каждой итерации проверяется изменение полной энергии системы (при условии, что система является консервативной). Если эта энергия изменилась больше, чем на желаемую величину ошибки, итерация отменяется и повторяется с меньшим шагом, который получается из величины “неудачного” шага умножением на коэффициент  $\beta$  ( $0 < \beta < 1$ ). Так продолжается до тех пор, пока изменение энергии не окажется приемлемым. Когда найден шаг, позволяющий достичь нужного уровня сохранения энергии, итерация принимается, а шаг умножается на коэффициент  $\alpha$  ( $\alpha > 1$ ), чтобы предотвратить его монотонное уменьшение. Далее этот метод обозначен VTS\_Stuart.

За отчетный период мы разработали и исследовали две модификации этого метода:

- a. Для избежания большого количества повторных расчётов силы и, в случае прихода системы к относительно стабильному состоянию, перехода к оптимальному постоянному шагу, мы ввели два дополнительных параметра  $\epsilon_m$  и  $\epsilon_t$ . Шаг изменялся по следующему алгоритму (далее он обозначен VTS\_Improved):
  - i.  $\Delta E/\Delta t < \epsilon_m$        $\Delta t$  увеличивается:  $\Delta t_{next} = \alpha \Delta t_{old}$
  - ii.  $\epsilon_m < \Delta E/\Delta t < \epsilon_t$        $\Delta t$  не меняется
  - iii.  $\epsilon_t < \Delta E/\Delta t < \epsilon$        $\Delta t$  уменьшается:  $\Delta t_{next} = \beta \Delta t_{old}$  но итерация не отменяется
  - iv.  $\Delta E/\Delta t > \epsilon_h$        $\Delta t$  уменьшается:  $\Delta t_{next} = \beta \Delta t_{old}$  и итерация отменяется
- b. Полученная зависимость  $\Delta E(\Delta t)$  может быть приближена степенной. На основе этой зависимости мы предлагаем алгоритм, далее обозначенный VTS\_Predictive - после каждой итерации шаг меняется по формуле  $\Delta t_{new} = \Delta t_{old} \cdot \min[(\frac{\epsilon_t \Delta t}{\Delta E})^{1/b}, \alpha]$  и, если ошибка в полной энергии больше  $\epsilon$  - параметра алгоритма - итерация отменялась. Коэффициент  $\alpha > 1$  ограничивает рост шага, что необходимо в силу существенной случайности поведения численной ошибки.

**Основные результаты**

Описанные в предыдущем разделе методы интегрирования уравнений движения с переменным шагом были включены в разрабатываемый в лаб. 1.4.4 НИЦ ТЭС программный пакет, предназначенный для моделирования неидеальной плазмы методом молекулярной динамики с расщепляемыми волновыми

пакетами [4]. Использование метода с переменным шагом позволило добиться в существенного (в 2-8) раза роста производительности по сравнению с использованием постоянного шага в задачах об ионизации атома водорода и рассеянии электрона на ионе. Также использование переменного шага позволяет избежать ручного подбора оптимального значения шага для каждого запуска программа. В отличие от постоянного шага, свободные параметры схемы с переменным шагом, как показали тесты, достаточно универсальны и не требуют подбора под каждый конкретный расчёт. Более того, для отдельных параметров, расчёт с постоянным шагом вообще не был возможен с использованием имеющихся вычислительных ресурсов из-за сильных скачков энергии взаимодействия, требующих установки очень малых значений шага.

Была исследована эффективность алгоритма с переменным шагом в зависимости от параметров схемы. Расчёт проводился следующим образом: для фиксированного значения  $\epsilon$  - уровня ошибки, при котором итерация отменялась, проводился расчёт одной и той же задачи - ионизации атома водорода лазерным импульсом - с разными  $\epsilon_i$  и  $b$ . Минимум на рис. 1а определяет оптимальные параметры -  $\epsilon_t/\epsilon = 0.35$  и  $b = 5.4$  для VTS\_Predictive. Для VTS\_Improved оптимальные параметры были найдены аналогичным образом:  $\epsilon_m/\epsilon = 0.72$  и  $\epsilon_e/\epsilon = 0.64$ . Из рис. 1б видно, что схема с переменным шагом оказывается достаточно эффективной при различных параметрах моделирования (амплитуда лазерного импульса).

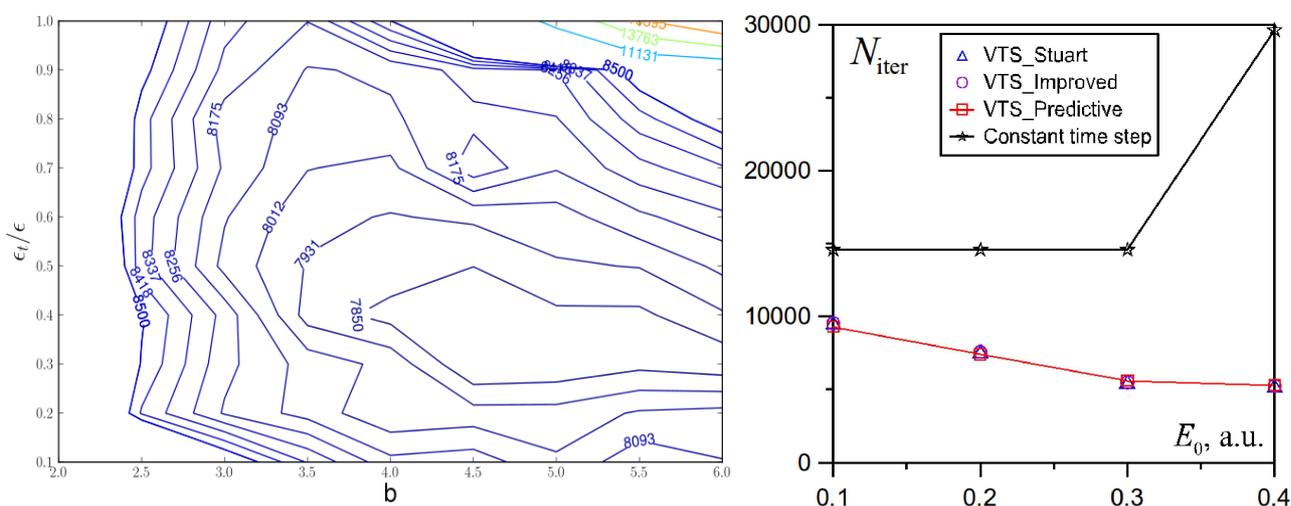


Рис. 1. (а) Зависимость числа итераций от параметров алгоритма выбора шага для постоянного времени моделирования. Чем меньше итераций, тем лучше производительность.  $t_{max} = 30fs$ ;  $N_{wp} = 5$ ,  $E_0 = 0.24a.u.$ ,  $\omega L = 0.057a.u.$ ,  $2T = 5.2fs = 219a.$  (б) Количество итераций, требуемое для достижения изменения полной энергии менее  $5 \cdot 10^{-3}$  эВ  $t_{max} = 5fs$ ;  $N_{wp} = 5$ ,  $\omega L = 0.057a.u.$ ,  $2T = 5.2fs = 219a.u.$

### Список литературы:

1. Морозов И.В., Норман Г.Э. Столкновения и плазменные волны в неидеальной плазме // ЖЭТФ. 2005. Т. 127. No2. С. 412–430.
2. I.V. Morozov, I.A. Valuev. Localization constraints in Gaussian wave packet molecular dynamics of nonideal plasmas // J. Phys. A. 2009. V. 42. P. 214044.
3. Steven J. Stuart, Jacob M. Hicks, and Michael T. Mury. An Iterative Variable-Timestep Algorithm for Molecular Dynamics Simulations // Molecular Simulation. 2003, Vol. 29, Issue 3
4. I.V. Morozov, I.A. Valuev. Improvement of Wave Packet Molecular Dynamics using Packet Splitting // Contrib. Plasma. Phys. 2012. V. 52. P. 140-144

## Список публикаций и докладов за отчетный период

### Публикации:

1. Казеев Н.А., Морозов И.В. Решение уравнений движения с переменным шагом по времени в методе молекулярной динамики с волновыми пакетами // Труды 54-й научной конференции МФТИ «Проблемы фундаментальных и прикладных естественных и технических наук в современном информационном обществе», г. Долгопрудный, 10-30 ноября 2011г. Управление и прикладная математика. Том 2. С. 20-21.
2. Kazeev N.A., Morozov I.V., Valuev I.A. Wave packet molecular dynamics with packet splitting // In: Physics of Extreme States of Matter, Chernogolovka, 2012. P. 131-134.

### Доклады (фамилия докладчика подчеркнута):

1. Казеев Н.А., Морозов И.В. Решение уравнений движения с переменным шагом по времени в методе молекулярной динамики с волновыми пакетами // 54-я научная конференция МФТИ «Проблемы фундаментальных и прикладных, естественных и технических наук в современном информационном обществе», г. Долгопрудный, 25-26 ноября 2011г.
2. Валуев И.А., Казеев Н.А., Морозов И. В. “Молекулярная динамика с расщепленными волновыми пакетами. Использование переменного шага по времени” // 10-й Российский симпозиум “Проблемы физики ультракоротких процессов в сильнонеравновесных средах”, г. Новый Афон, Абхазия, 2-11 августа 2012
3. N.A. Kazeev, I.V. Morozov, I.A. Valuev, Simulation of Electron Propagation in Nonideal Plasmas using Split Wave Packet Molecular Dynamics // 14th International Workshop on the Physics of Nonideal plasmas (PNP), Rostock, September 9 - 14, 2012.

## Отзыв руководителя лаборатории

В период выполнения проекта Казеев Н.А. существенным образом доработал программу моделирования неидеальной плазмы методом молекулярной динамики с волновыми пакетами, развиваемую в нашей лаборатории. Это достаточно перспективный метод и его доработка является актуальной задачей для решения ряда вопросов физики неидеальной плазмы. Схема с переменным шагом, реализованная Казеевым Н.А., оказалась очень востребованной, т.к. уравнения для параметров волновых пакетов (аналог уравнений движения в классической молекулярной динамике) имеют негамильтоновский вид, и их решение сопровождается резкими скачками энергии взаимодействия. Таким образом, схема с переменным шагом в ряде случаев оказалась единственным методом, позволяющим добиться удовлетворительного сохранения полной энергии консервативной системы.

По результатам работы Казеев Н.А. подготовил несколько публикаций в сборниках научных трудов и представил доклады на российских конференциях. В ближайшее время результаты его работы будут также отражены в публикации в рецензируемом журнале Contributions to Plasma Physics.

План работ на 2011/2012 г.г. выполнен полностью.

К.ф.-м.н., доц.

Морозов И. В.

