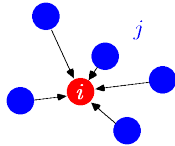


Molekulová dynamika

1/8
s03/3

- tuhé koule ap. – nárazy, algoritmus založen na události „další srážka“
 - „klasická“ MD – integrace pohybových rovnic
 - Brownovská (stochastická) dynamika, disipativní částicová dynamika = MD + náhodné síly
- Potřebujeme **síly**:

$$\vec{f}_i = -\frac{\partial U(\vec{r}^N)}{\partial \vec{r}_i} \quad i = 1, \dots, N$$



Příklad – párové síly:

$$U = \sum_{i < j} u(r_{ij}) \Rightarrow \vec{f}_i = \sum_{j=1}^N \vec{f}_{ji} = - \sum_{j=1}^N \frac{du(r_{ji})}{dr_{ji}} \frac{\partial r_{ji}}{\partial \vec{r}_i} = - \sum_{j=1}^N \frac{du(r_{ji})}{dr_{ji}} \frac{\vec{r}_{ji}}{r_{ji}}$$

Značení: $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_j - \vec{r}_i$, $r_{ij} = |\vec{r}_{ij}|$

Ekvivalence metod Verlet and leap-frog

5/8
s03/3

Leap-frog:

$$\left. \begin{aligned} \vec{v}(t+h/2) &:= \vec{v}(t-h/2) + \vec{a}(t)h \\ \vec{r}(t+h) &:= \vec{r}(t) + \vec{v}(t+h/2)h \\ t &:= t+h \end{aligned} \right\} \text{opakuje se}$$

2. rovnici napíšeme dvakrát ve dvou časech

$$\begin{aligned} \vec{r}(t+h) &= \vec{r}(t) + \vec{v}(t+h/2)h & \times +1 \\ \vec{r}(t) &= \vec{r}(t-h) + \vec{v}(t-h/2)h & \times -1 \end{aligned}$$

Rovnice odečteme:

$$\vec{r}(t+h) - \vec{r}(t) = \vec{r}(t) - \vec{r}(t-h) + \vec{v}(t+h/2)h - \vec{v}(t-h/2)h$$

substituce pro rozdíl rychlostí:

$$\vec{r}(t+h) - 2\vec{r}(t) + \vec{r}(t-h) = h[\vec{v}(t+h/2) - \vec{v}(t-h/2)] = \vec{a}(t)h^2 = \frac{f(t)}{m}h^2$$

což jest Verletova metoda

Newtonovy rovnice

2/8
s03/3

$$\frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = \frac{\vec{f}_i}{m_i} \quad i = 1, \dots, N$$

Metoda konečných diferencí – krok h

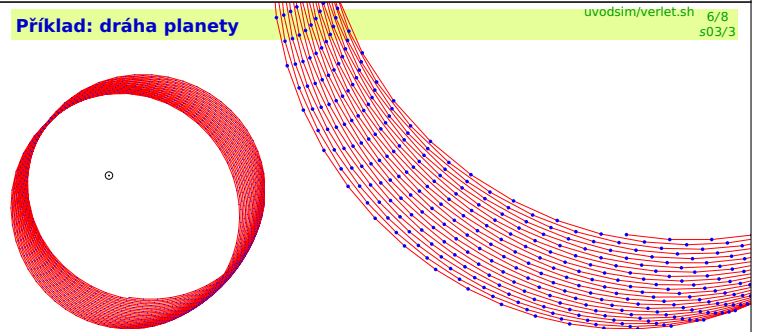
Počáteční úloha (známe $\vec{r}$ a $\vec{v}$ v čase t_0)

Metody:

- Runge-Kutta: mnoho výpočtů pravé strany
- Prediktor-korektor: lepší, ale ... (viz dále)
- Verlet a jeho klony (je symplektický = dobré zachování energie)
- “Multiple timestep” metody: více časových škál, obv. symplektické
- Geometrické integrátory (symplektické)

Příklad: dráha planety

uvodsim/verlet.sh 6/8
s03/3



- energie se zachovává
- precise perihelia $\mathcal{O}(h^2)$
- harmonický oscilátor: frekvence je posunuta o $\mathcal{O}(h^2)$

Verletova metoda

3/8
s03/3

Taylorův rozvoj:

$$\begin{aligned} \vec{r}_i(t-h) &= \vec{r}_i(t) - h\vec{v}_i(t) + \frac{h^2}{2}\vec{a}_i(t) - \dots & +1 \times \\ \vec{r}_i(t) &= \vec{r}_i(t) & -2 \times \\ \vec{r}_i(t+h) &= \vec{r}_i(t) + h\vec{v}_i(t) + \frac{h^2}{2}\vec{a}_i(t) + \dots & +1 \times \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \text{numerická 2.derivace: } \vec{a}_i(t) = \frac{\vec{f}_i(t)}{m_i} = \frac{\vec{r}_i(t-h) - 2\vec{r}_i(t) + \vec{r}_i(t+h)}{h^2} + \mathcal{O}(h^2)$$

$$\text{Verletova metoda: } \vec{r}_i(t+h) = 2\vec{r}_i(t) - \vec{r}_i(t-h) + h^2 \frac{\vec{f}_i(t)}{m_i}$$

$$\text{Počáteční podmínky: } \vec{r}_i(t_0-h) = \vec{r}_i(t_0) - h\vec{v}_i(t_0) + \frac{h^2}{2} \frac{\vec{f}_i(t_0)}{m_i} + \mathcal{O}(h^3)$$

- časově reverzibilní ($\Rightarrow$ žádný drift celk. energie); dokonce symplektické
- nelze použít pro $\vec{r} = f(r, \vec{r})$, protože $\dot{r}(t)$ není známo v čase t

Identická trajektorie: leap-frog, velocity Verlet, Gear ($m=3$), Beeman

Verlet ještě jednou

+ 7/8
s03/3

Metodami teoretické mechaniky:

- vyjádříme polohy a hybnosti v operátorové formě
- tu nekomutují, takže musíme aproximovat
- tak se odvodí **rychlostní Verlet**:

$$\begin{aligned} \vec{r}(t+h) &= \vec{r}(t) + \vec{v}(t)h + \frac{f(t)h^2}{m} \frac{1}{2} \\ \vec{v}(t+h) &= \vec{v}(t) + \frac{f(t) + f(t+h)h}{m} \frac{1}{2} \end{aligned}$$

$$\text{Stejná trajektorie, rychlost jako původní Verlet s } \vec{v}(t) = \frac{\vec{r}(t+h) - \vec{r}(t-h)}{2h}$$

Kinetická energie se liší od leap-frog o člen $\mathcal{O}(h^2)$

... ale dozvěděli jsme se hodně o zachování energie

Metoda leap-frog

vlc movies/leap-frog.mp4; vlc movies/leap-frog2.mp4 4/8
s03/3

rychlost = dráha (změna polohy) za jednotku času h (vektor)

$$\vec{v}(t+h/2) = \frac{\vec{r}(t+h) - \vec{r}(t)}{h}$$

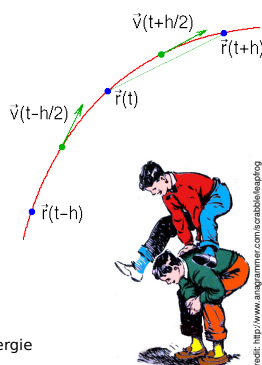
zrychlení = změna rychlosti za jednotku času

$$\vec{a}(t) = \frac{\vec{v}(t+h/2) - \vec{v}(t-h/2)}{h} = \frac{\vec{f}}{m}$$

$\Rightarrow$

$$\left. \begin{aligned} \vec{v}(t+h/2) &:= \vec{v}(t-h/2) + \vec{a}(t)h \\ \vec{r}(t+h) &:= \vec{r}(t) + \vec{v}(t+h/2)h \\ t &:= t+h \end{aligned} \right\} \text{opakuje se}$$

- ekvivalentní Verletově metodě (identická trajektorie)
- ale: rychlosti v jiném čase, trochu ($\mathcal{O}(h^2)$) jiná kinetická energie



K čemu to je dobré?

+ 8/8
s03/3

$$\exp(i\vec{L}_p h/2) \exp(i\vec{L}_r h) \exp(i\vec{L}_p h/2) = \exp(i\vec{L} h + \epsilon)$$

- chybu ϵ umíme odhadnout ($\propto h^3$)
- zpětně lze spočítat porušený Hamiltonián (chyba $\propto h^3$ na krok neboli $\propto h^2$ celkem), který Verletova metoda přesně zachovává
- tj. Verlet je **symplektický** $\Rightarrow$ chyba je omezená (pouze reverzibilita $\Rightarrow$ chyba $\propto t^{1/2}$)
- metody vyššího řádu, multiple-timestep metody

chyba zachování energie se používá k nastavení délky kroku h

