

Модели и алгоритмы стохастической микродинамики (обзор и некоторые задачи)

М. А. Двуреченская, А. Ю. Попков,
Ю. С. Попков, Е. Ю. Шкловский

Аннотация. В работе рассматриваются процессы стохастической микродинамики и декларируется технологическая платформа, являющаяся инструментом их научного исследования. Стохастическая микродинамика рассматривается как развитие молекулярной динамики на многочастичные системы со стохастическим поведением элементов. Приводится краткий обзор методов молекулярной динамики и методов Монте-Карло. Предлагаются модели стохастической микродинамики и трансформации микросостояний в макросостояния. Сформулированы некоторые задачи дальнейших исследований.

Ключевые слова: микро- и макродинамика, макросистема, стохастические процессы, молекулярная динамика, метод Монте-Карло, равновесие, энтропия, компьютерная имитация.

Введение

Одной из актуальных проблем современной науки является изучение взаимосвязи индивидуального и коллективного. Различные отрасли науки занимались исследованием этой проблемы, используя собственные инструменты, заимствуя их в других научных дисциплинах или синтезируя новые инструменты.

Сама проблема предполагает некоторое специфическое структурное устройство исследуемого объекта, который содержит большое количество элементарных частей, имеющих определенные индивидуальные свойства и взаимодействующих друг с другом. В то же время объект как целостная система (не разделенная на элементарные части) приобретает новые, «системные» свойства, отличные от индивидуальных свойств элементарных частей.

Важным фактором трансформации индивидуальных свойств в коллективные являются временные шкалы соответствующих процессов, количественные характеристики которых определяются временами релаксации. Мы будем различать две временных шкалы: «медленную» с временем релаксации τ_{slow} , и «быструю» с временем релаксации $\tau_{\text{fast}} \ll \tau_{\text{slow}}$. Эволюция коллективных свойств объекта реализуется в шкале медленного времени. При этом динамические характеристики элементарных частей объекта измеряются в шкале быстрого времени.

Объявленная выше проблема соотношения индивидуального и коллективного весьма обширная и многоаспектная, и потому инструментальная база, применяемая для ее исследования, различна в научных дисциплинах. Но исследовательский подход — общий. Это подход, основанный на модельном представлении проблемы. В теоретических направлениях естественных наук он основан на математических моделях.

Указанный подход стал впервые развиваться в статистической физике и термодинамике, где изучалась система, состоящая из большого количества частиц (молекул), случайным образом распределяющихся по подмножествам фазового пространства [1, 2]. Соотношения между индивидуальным и коллективным поведением составляют раздел математической теории поведения [3]. Параметры порядка, составляющие фундамент синергитической концепции, являются реальным инструментом математического моделирования динамики формирования коллективных свойств [4]. Концепция пространственно-временной самоорганизации систем и перехода от «хаоса к порядку» объясняла многие структурные эффекты, наблюдаемые как в жидкостях, так и в социальных средах [5–7].

Определенный вклад в изучение соотношения индивидуального и коллективного внесла теория мак-

росистем, построенная на обобщенном вариационном принципе максимизации энтропии на компактных множествах, в терминах которого определяется понятие равновесного состояния [8]. В рамках этой теории, используя стохастическую феноменологическую модель распределения элементов по подмножествам фазового пространства, удастся моделировать равновесные цены в системах обмена экономическими ресурсами, квазидетерминированное распределение материальных и информационных потоков в стохастических сетях (транспортных, трубопроводных, компьютерных и др.), стационарную миграцию населения и т. д.

Развиваемая теория макросистем базируется на феноменологической двухуровневой модели (микро- и макроуровень), в которой реальные процессы, происходящие с элементами на микроуровне, заменяются их стационарными состояниями. Последние в свою очередь описываются соответствующими распределительными моделями, основанными на стохастических механизмах независимого распределения неразличимых элементов по подмножествам близких состояний с определенной априорной вероятностью, а состояние системы как целого характеризуется распределением чисел заполнения подмножеств близких состояний.

Принципиальной особенностью данного подхода является, во-первых, моделирование соотношений стационарных состояний большого количества элементов и стационарных состояний системы как целого и, во-вторых, декларирование вариационного принципа, позволяющего выделить из множества возможных стационарных состояний системы единственное, имеющее максимум энтропии.

Известно, что, оставаясь декларацией, вариационный принцип имеет многочисленные экспериментальные подтверждения для физических систем, в которых, во-первых, количество элементов весьма велико и, во-вторых, динамика элементов вполне определенная, а именно, ньютоновская.

Представленная макросистемная концепция распространялась многочисленными исследователями на нефизические системы, используя принцип аналогий, и оказывалась вполне конструктивной при решении многих прикладных задач. Под конструктивностью получаемых решений имеется в виду прежде всего их вполне приемлемая адекватность реально наблюдаемым характеристикам макросостояний.

Но при этом известно, что такие особенности реальных объектов, как количество элементов микроуровня, собственная динамика элементов и характер их взаимодействий, влияние макроограничений на поведение элементов микроуровня, стохастичность процессов в различных временных шкалах, на микро- и макроуровнях и др. никак не учитываются в существующей макросистемной концепции. А они оказываются часто принципиальными как раз при изучении нефизических систем.

Исследование этих проблем предлагается проводить, используя компьютерную имитацию про-

цессов, происходящих в системе, содержащей большое количество взаимодействующих элементов со стохастической микродинамикой.

Методы, позволяющие реализовывать компьютерную имитацию стохастических микродинамических процессов, которые далее будем называть **методами стохастической микродинамики (МСМ)**, ориентированы на **формирование** математических моделей стохастических *микродинамических* процессов и их **трансформацию** в стохастические *макродинамические* процессы, развитие специализированного программного и информационного обеспечения, и разработку инструментария для интеллектуальной обработки результатов и их визуализации.

МСМ представляют собой обобщение *методов молекулярной динамики* и нацелены на компьютерную имитацию стохастического поведения широкого класса элементов со свойствами, отличными от свойств частиц, движущихся в некотором потенциальном поле. Необходимость такого расширения класса элементов связана с применением макросистемной концепции для решения различных задач сетевой инфраструктуры, экономического обмена, демографии, социологии и других «немолекулярных» систем. Основное отличие элементов в этих предметных областях состоит в том, что их собственная динамика и их взаимодействия имеют не вполне детерминированную природу, которая допускает стохастическое представление.

1. Структура стохастической микродинамики

Стохастическую микродинамику следует квалифицировать как технологическую платформу научного исследования динамических систем, содержащих большое количество элементов со стохастическим поведением и взаимодействием.

Технологическая платформа «Стохастическая микродинамика» включает (см. рис. 1):

- математические модели «ММ» элементарной стохастической динамики «ММЭСД» и стохастического взаимодействия элементов «ММСВ»;
- специализированные вычислительные методы «СВМ» последовательных «СВП» и параллельных «СВПр» вычислений;
- проблемно-ориентированные методы эффективного статистического эксперимента «ЭСЭ»;
- математические модели трансформации стохастических микродинамических процессов в показатели макросостояния системы как целого «ММТ»;
- средства визуализации результатов компьютерного моделирования «СВ»;
- информационная и программная среда «ИПС».

Компонента «ММ» данной платформы представляет собой набор математических методов и готовых моделей, имитирующих пространственно-вре-

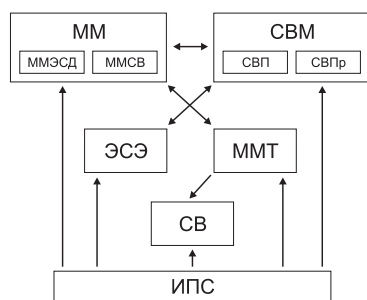


Рис. 1. Структура технологической платформы «Стохастическая микродинамика»

менную динамику элемента с различными типами стохастического поведения, а также характер взаимодействия, интервал времени взаимодействия и количество взаимодействующих элементов.

Типы стохастического поведения элемента отождествляются с соответствующим классом случайного процесса. Примерами таких типов и соответствующих им классов являются:

- ансамбль детерминированных на конечном интервале времени процессов со случайными параметрами из заданного множества с заданными вероятностными характеристиками;
- случайный процесс с независимыми состояниями («белый шум»);
- случайный процесс с независимыми приращениями (винеровский процесс);
- стационарный случайный процесс с заданной одномерной функцией плотности распределения вероятностей и корреляционной функцией;
- гауссовый стационарный случайный процесс с заданной корреляционной функцией;
- случайный процесс, генерируемый динамической системой со случайным энтропийным оператором;
- ...

Важной особенностью математических моделей стохастической микродинамики является локализация траекторий элементов в заданной области фазового пространства с вероятностью 1.

Некоторое количество элементов (возможно, случайное) с указанными типами поведения взаимодействуют в течение фиксированного интервала времени друг с другом. Характер этого взаимодействия универсален. Это стохастический порционный обмен энергией, ресурсами, информацией.

Компонента платформы «СВМ» является весьма важной, так как количество элементов в системе может варьироваться от нескольких десятков тысяч до миллиона, а иногда и выше. Поэтому, даже учитывая мощность современных вычислительных машин, алгоритмы последовательных и параллельных вычислений должны обладать достаточно высокой производительностью.

Математические модели элементарной динамики и взаимодействия элементов имеют параметры, точ-

ное значения которых установить невозможно. Кроме этого, начальные состояния элементов и граничные условия также не вполне определенные. Все это приводит к необходимости генерировать ансамбли элементарных траекторий, используя методы статистического эксперимента (методы Монте-Карло). Традиционная для этих методов проблема — сколько испытаний провести и как сделать так, чтобы за минимальное количество испытаний получить максимальную информацию об ансамбле элементарных траекторий. Для этой цели в данную платформу введена компонента «ЭСЭ».

Пожалуй наиболее проблематичной является компонента «ММТ». Задача описания преобразования ансамбля микросостояний в макросостояние системы является не вполне корректной, так как не существует универсальных индикаторов макросостояния. Так, для систем с неразличимыми частицами макросостояние описывается в терминах распределений чисел заполнения подмножеств близких состояний или в терминах максвеловских распределений импульсов и скоростей в 6-мерном фазовом пространстве. Однако, эти индикаторы не пригодны, например, для характеристики макросостояний в системах с экономически или информационно мотивированными элементами.

Компонента «СВ» необходима для компактного и информативного представления результатов моделирования. Выше указывалось, что система может иметь очень большое количество элементов и даже на уровне макросостояний размерность выбранных индикаторов может быть значительной. Прямая их визуализация — не конструктивна, так как делает невозможной оценку результатов моделирования. Поэтому синтезирование методов агрегирования, осреднения и графического 2D- и 3D-представления является важной задачей для данной технологии.

Следует отметить, что все перечисленные компоненты как бы имеют два слоя: методический и программный. Кроме этого они должны быть связаны единой информационно-программной средой. Поэтому «ИПС» является надстройкой над всеми компонентами рассматриваемой технологической платформы.

2. Молекулярная динамика

Базовый принцип, который лежит в основании методов математического моделирования процессов молекулярной динамики, состоит в компьютерной имитации динамического поведения каждой частицы и их взаимодействия, а также формирования характеристик макросостояния рассматриваемого ансамбля (системы) частиц. Реализация этого принципа для систем, содержащих порядка 10^7 – 10^9 частиц, оказалась возможной на современных суперкомпьютерах, что существенно продвинуло эффективность таких исследований. Более того, бытует

мнение, что как раз такого рода задачи обосновывают необходимость в суперкомпьютерах и стимулируют их совершенствование.

В основе методов молекулярной динамики лежат модельные представления о поведении системы с большим числом частиц (в частности, молекул, атомов), в которой частицы рассматриваются как материальные точки, обладающие фиксированной массой, а их движение описывается какой-либо механической или квантово-механической моделью. В зависимости от предметной области, в которой применяются методы молекулярной динамики, возникают различные ориентации этого подхода на исследование биомолекул и нанобиоструктур, химических реакций, механических разрушений и др.

Методам молекулярной динамики посвящена обширная литература, в том числе и монографического и учебного характера. В целом список работ содержит более тысячи наименований.

Рассмотрим некоторые важные аспекты для дальнейшего положения этой области науки, и отнесем читателя к прекрасным монографиям [25–28].

2.1. Математические модели динамики частиц

Теоретический базис математического моделирования процессов молекулярной динамики был заложен еще в работах Эйлера, Ньютона, Гамильтона, Лагранжа и других выдающихся ученых XVIII–XX вв. Ими были построены различные формы уравнений движения частицы и ее взаимодействия с другими частицами. Некоторые из них были основаны на новых знаниях о поведении частиц, другие представляли собой элегантное обобщение известных модельных представлений, которое открывало путь для развития теории. Простейшая форма моделирования динамики частицы — уравнения Ньютона. Моделирование так называемых «жестких» частиц потребовало привлечения уравнений Эйлера и формализма Гамильтона. Для описания поведения частиц с несколькими степенями свободы и геометрическими ограничениями более удобными оказались уравнения Лагранжа [15].

1. Уравнения Гамильтона. Ядром методологии молекулярной динамики являются модельные представления о поведении отдельно взятой частицы, взаимодействующей с другими частицами. В качестве примера такого модельного представления рассмотрим консервативную систему, содержащей N частиц. Напомним, что в такой системе гамильтониан не зависит от времени, и движение частиц происходит по энергетической поверхности, где значение гамильтониана постоянно и равно полной энергии. Частицы в рассматриваемой модели представляют собой материальные точки с определенной массой и взаимодействующие между собой посредством сил отталкивания и притяжения (типа сил Ван-дер-Ваальса). Поэтому гамильтониан системы частиц мож-

но определить в виде

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{(\mathbf{p}^i)^2}{2m} + U(\mathbf{q}^i) + \sum_{i < j} \Phi(|\mathbf{q}^i - \mathbf{q}^j|) \right], \quad (1)$$

где \mathbf{q} — вектор, составленный из векторов $\mathbf{q}^i = \{q_1^i, q_2^i, q_3^i\}$ — обобщенных координат частиц, \mathbf{p} — вектор, составленный из векторов $\mathbf{p}^i = \{p_1^i, p_2^i, p_3^i\}$ — векторов импульсов частиц, $\Phi(\mathbf{q})$ — потенциал взаимодействия, описывающий притяжение частиц в некоторой области конечного радиуса R и сильное отталкивание вне этой области. Частицы рассматриваются как «твердые сферы» радиуса ϱ . Функция $U(\mathbf{q})$ описывает потенциал внешних сил.

Состояние системы характеризует вектор $\mathbf{r} = \{\mathbf{q}, \mathbf{p}\}$ в $6N$ -мерном фазовом Γ -пространстве, которое образовано прямым произведением частных фазовых пространств μ^1, \dots, μ^N , попарно ортогональных:

$$\mu^i \perp \mu^j \quad \text{для всех } (i, j) \in [1, N]. \quad (2)$$

Тогда Γ -пространство имеет вид

$$\Gamma = \mu^1 \otimes \mu^2 \otimes \dots \otimes \mu^N. \quad (3)$$

Вектор состояния консервативной системы ($H = \text{const}$) и, следовательно, его компоненты q_j^i, p_j^i , $i \in [1, N], j \in [1, 3]$, с течением времени будут перемещаться в Γ -пространстве согласно *уравнениям движения Гамильтона*:

$$\begin{aligned} \frac{dq_j^i}{dt} &= \frac{\partial H(\mathbf{q}, \mathbf{p})}{\partial p_j^i}, \\ \frac{dp_j^i}{dt} &= -\frac{\partial H(\mathbf{q}, \mathbf{p})}{\partial q_j^i}, \quad i \in [1, N], j \in [1, 3] \quad (4) \\ \mathbf{q}(0) &= \mathbf{q}^0, \quad \mathbf{p}(0) = \mathbf{p}^0. \end{aligned}$$

На рис. 2 представлена условная иллюстрация Γ -пространства для системы из трех частиц, состояние которой в момент времени t характеризуется точкой $\gamma(t)$. Ее проекции на частичные трехмерные пространства μ^1, μ^2, μ^3 дают точки $\gamma^1(t), \gamma^2(t), \gamma^3(t)$, характеризующие состояние частиц в момент времени t .

Заметим, что временные интервалы, характеризующие динамику частиц, имеют порядок нескольких наносекунд. Поэтому в течении интервала времени, измеряемого в шкале календарного времени, траектория вектора состояния $\mathbf{r}(t) \in \Gamma$ рассматриваемой консервативной системы, «заметает» некоторую часть S поверхности $H = \text{const}$ (рис. 2).

2. Уравнения Ньютона. Одно из активно развивающихся применений молекулярной динамики связано с моделированием формирования различных биомолекул (BioSimGrid <http://www.biosimgrid.org>). В основе методов математического моделирования (био)молекулярной динамики [15, 22] лежат модельные представления о поведении каждой частицы, описываемые ньютоновским уравнением

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \mathbf{F}_i, \quad \mathbf{v}_i = \frac{d\mathbf{r}_i}{dt}, \quad i = 1, \dots, N, \quad (5)$$

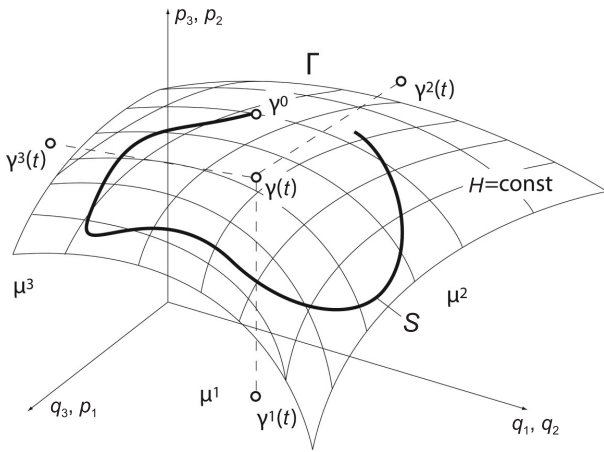


Рис. 2. Траектория частиц на поверхности $H = \text{const}$

где N — количество частиц в системе, m_i — масса частицы, \mathbf{r}_i — радиус-вектор частицы в момент времени t , \mathbf{v}_i — вектор скорости частицы в момент времени t , \mathbf{F}_i — равнодействующая сил, действующих на частицу.

Равнодействующая сила складывается из двух составляющих:

$$\mathbf{F}_i = -\frac{\partial U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}{\partial \mathbf{r}_i} + \mathbf{F}_i^{ex}, \quad (6)$$

где $U(\cdot)$ — потенциальная энергия системы, \mathbf{F}_i^{ex} — внешняя сила, возникающая в результате взаимодействия частиц с частицами среды.

Первая составляющая — сила, возникающая при движении частицы в потенциальном поле, создаваемом всем ансамблем частиц. Поэтому она определяется градиентом потенциальной энергии системы. Потенциальную энергию можно представить в виде суммы вкладов от различных типов взаимодействий между частицами. В частности, при изучении динамики белков и пептидов используется модель потенциального поля, учитывающая потенциальную энергию валентных связей, валентных углов, торсионных углов, плоских групп и псевдоторсионных углов, кулоновских сил, взаимодействий Ван-дер-Ваальса и водородных связей.

3. Уравнения Ланжевена. Наряду с указанными моделями динамики частиц, общей характеристикой которых является их детерминизм, в методологии молекулярной динамики используются стохастические модели динамики частиц, в частности, модели Ланжевена [26]. В этих моделях добавлены, по сравнению с детерминированными моделями, случайные возмущения с определенными статистическими характеристиками. Простейшая модель Ланжевена имеет вид

$$M\ddot{\mathbf{r}} = -\nabla H(\mathbf{r}) - \gamma M\dot{\mathbf{r}} + \mathbf{R}(t), \quad (7)$$

где M — матрица масс частиц, H — гамильтониан системы частиц, γ — параметр, характеризующий

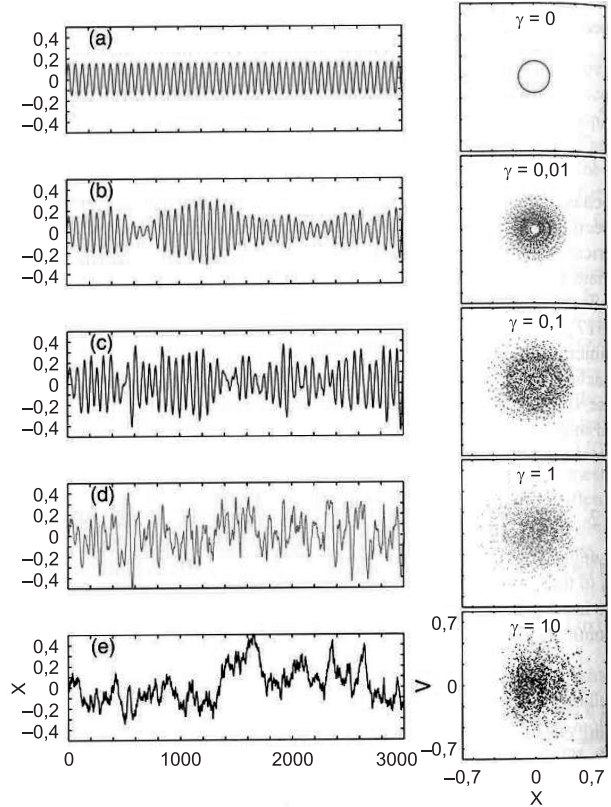


Рис. 3. Траектория частиц на поверхности $H = \text{const}$

соударения частиц, $\mathbf{R}(t)$ — векторный стационарный нормальный процесс со следующими статистическими характеристиками:

$$\langle \mathbf{R}(t) \rangle = 0, \quad \langle \mathbf{R}(t)\mathbf{R}(t') \rangle = 2\gamma k_B T M \delta(t - t'), \quad (8)$$

где k_B — константа Больцмана, T — температура, $\delta(t - t')$ — дельта-функция.

Важным параметром в этой модели является параметр γ . На рис. 3 показано его влияние на процессы в гармоническом осциляторе с собственной частотой, равной 1 [26].

2.2. Микро- и макросостояния

Компьютерная имитация микродинамических процессов предполагает существование показателей макросостояния системы частиц и правил преобразования микросостояний в макросостояния. Для пояснения этой проблемы обратимся снова к Γ -пространству (3). Поскольку все μ^i -пространства в (3) устроены одинаково, можно рассмотреть одно μ -пространство с координатами (\mathbf{q}, \mathbf{p}) (рис. 2) и в него поместить точки $\gamma^1(t), \dots, \gamma^N(t)$, каждая из которых характеризует состояние отдельной частицы. В результате в μ -пространстве образуется конечное множество \mathcal{M}_t фазовых точек N частиц, которое характеризует состояние системы в момент времени t .

При формировании множества \mathcal{M}_t может оказаться, что некоторые точки будут накладываться

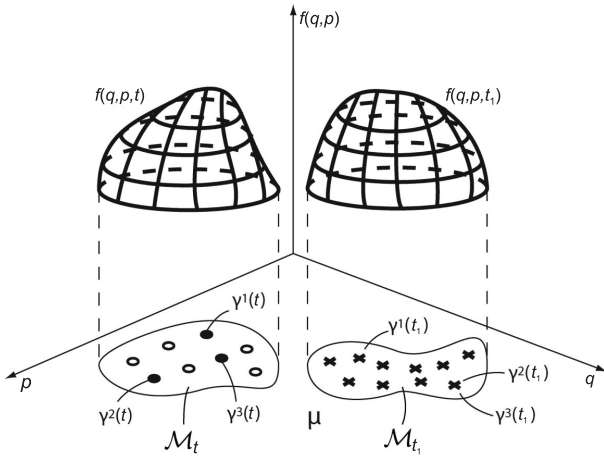


Рис. 4. Эволюция распределений частиц в μ -пространстве

друг на друга. На рис. 4 показана возможная такая ситуация для множества M_{t_1} : точки $\gamma^2(t_1), \gamma^3(t_1)$ оказались совмещенными. Это означает, что в момент времени t_1 они взаимодействуют друг с другом. Момент взаимодействия является весьма важным в молекулярной динамике и одновременно сложным с точки зрения его математического моделирования. Так, например Л. Больцман рассматривал только парные взаимодействия, т. е. когда могут совпадать только две точки в μ -пространстве. Универсальной характеристикой множества M_t является плотность распределения $f(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ для момента времени t . Для момента времени $t_1 > t$, точка $\gamma(t_1) \in \Gamma$ отобразится в другое множество $M_{t_1} \in \mu$. Следовательно, при движении фазовой точки в Γ -пространстве, в μ -пространстве происходит эволюция множества M_t , т. е. плотность распределения $f(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ трансформируется в $f(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t_1)$ (см. рис. 4).

Максвелл установил, что для рассматриваемой модели многочастичной системы при достаточно больших временах распределение $f(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ фазовых точек (или, что то же самое, частиц) в μ -пространстве стремится к стационарному $f^0(\mathbf{q}, \mathbf{p})$. Поэтому распределение $f(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ имеет смысл принять за *характеристику макросостояния системы частиц*.

Пример другого подхода к описанию преобразования микросостояний в макросостояния используется в (био)молекулярной динамике. В реальных экспериментах молекулы обычно находятся в растворах и активно взаимодействуют с молекулами растворителя. Температура системы поддерживается за счет энергообмена с внешней средой. Детальный учет взаимодействия молекул с внешней средой часто невозможен. Для учета этих эффектов используются термостаты.

В (био)молекулярной динамике температура системы вводится через удельное *среднее по ансамблю частиц (молекул) значение кинетической энергии для фиксированного момента времени*:

$$E(t) = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N m_i v_i^2(t). \quad (9)$$

Из статистической физики известно, что кинетическая энергия системы и ее «мгновенная» температура связаны следующим соотношением:

$$E(t) = \frac{3}{2} k_B T(t), \quad (10)$$

где k_B — постоянная Больцмана.

Далее проводя усреднение по времени, получаем значение температуры в молекулярно-динамическом эксперименте:

$$\bar{T} = \frac{1}{3Nk_B\tau} \int_{t_0}^{t_0+\tau} \sum_{i=1}^N m_i v_i^2(t) dt, \quad (11)$$

где τ — интервал осреднения. Здесь как раз видно, что в качестве макрохарактеристики рассматриваемой многочастичной системы выбрана функция «мгновенной» температуры:

$$T(t) = \frac{\sum_{i=1}^N m_i v_i^2(t)}{3Nk_B}. \quad (12)$$

При исследовании (био)молекулярной динамики обычно фиксируют температуру термостата. Температура модельной молекулярной системы может при этом меняться вследствие различных причин. Например, из-за конечного шага интегрирования частица может оказаться в запрещенной области фазового пространства. Это приведет к резкому скачку расчетной энергии, а затем и температуры.

Для борьбы с этим явлением используют математические модели термостатов. Чаще всего используется коллизионный термостат, основанный на динамике столкновений, и термостат Берендесена, использующий в уравнениях движения знакпеременное нелинейное трение.

Коллизионный термостат представляет собой среду виртуальных частиц, взаимодействующих путем столкновений с частицами изучаемой молекулярной системы. Столкновения происходят по закону упругих шаров. Варьируя массу виртуальных частиц и частоту столкновений частицами системы, можно добиваться наилучшего совпадения с экспериментальными данными.

Температура термостата определяет функцию распределения вероятностей виртуальных частиц по скоростям:

$$f(v) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} v^2 \exp \left(-\frac{mv^2}{2k_B T} \right). \quad (13)$$

Термостат Берендесена основан на регулировании температуры согласно закону Ландау—Теллера:

$$\frac{dT(t)}{dt} = \frac{T_0 - T(t)}{\tau}, \quad (14)$$

где T_0 — равновесное значение температуры, τ — время релаксации.

2.3. Вычислительные методы

Для решения системы уравнений (5) существуют различные вычислительные методы. В молекулярной динамике широко используется метод Верле [9, 21], который следует рассматривать как компромисс между точностью процедуры и скоростью ее реализации.

Силы, действующие на частицу, находятся как компоненты градиента функции, характеризующей потенциальную энергию системы в момент времени t :

$$F_i(t) = \nabla_i U(r_1(t), \dots, r_N(t)). \quad (15)$$

Затем вычисляются ускорения

$$a_i(t) = \frac{F_i(t)}{m_i}, \quad i = 1, \dots, N, \quad (16)$$

и рассчитываются новые координаты частиц

$$r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + v_i(t)\Delta t + \frac{1}{2}a_i(t)\Delta t^2. \quad (17)$$

Далее вычисляются новые скорости частиц:

$$v_i(t + \Delta t) = v_i(t) + \frac{a_i(t + \Delta t) + a_i(t)}{2}\Delta t. \quad (18)$$

Одной из наиболее существенных проблем процедуры интегрирования является выбор шага. При большом шаге погрешности интегрирования могут быть значительными и даже привести к расходящейся

траектории, которая не наблюдается в реальном эксперименте. При малом шаге существенно увеличивается время расчета. Кроме того, если частицы в молекулярной системе имеют существенно разные массы, то и шаги интегрирования должны быть разными. Начальные скорости частиц выбираются с помощью генератора случайных чисел в соответствии с распределением Максвелла при заданной температуре.

Приведенное описание метода молекулярной динамики дает общее представление. Разумеется применения его к конкретным проблемам гораздо более сложные. Эволюция развития некоторых количественных характеристик методов молекулярной динамики, а именно, числа частиц и длин траектории частицы (нс) в имитационном эксперименте показана на рис. 5.

При моделировании молекулярной динамики часто возникает необходимость вычислять электростатические силы, действующие на заряженные частицы рассматриваемой системы на больших расстояниях. Обычно, алгоритмы, решающие эти задачи, имеют квадратичную от количества частиц сложность. Это приводит к ограничению частиц в рассматриваемых системах до нескольких десятков тысяч. Кроме того, взаимодействие частиц рассматривается в некотором шаре, радиус которого специально выбирается для снижения вычислительной сложности. В работе [10] приводится метод, позво-

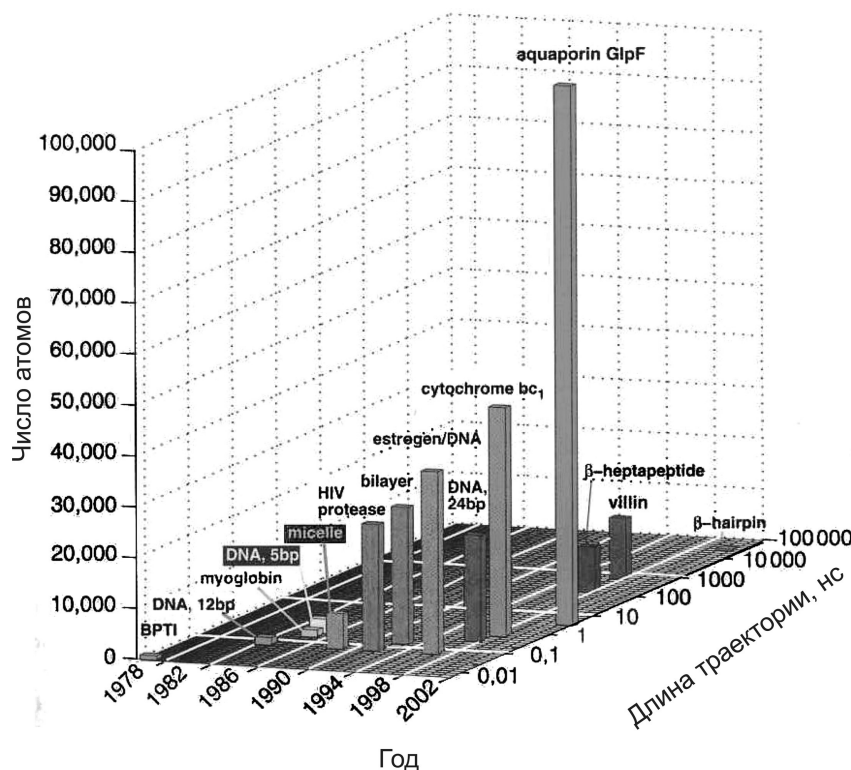


Рис. 5. Эволюция количественных характеристик методов молекулярной динамики

ляющий рассматривать все парные взаимодействия, причем утверждается, что сложность растет линейно от размера системы.

Предложенный в работе алгоритм включает такое преобразование уравнений, которое позволяет перейти к вычислениям потенциала в «ближней зоне» мультиполя, после чего суммировать все мультиполя. Таким образом возможно распараллелить вычисления [19].

В предлагаемой модификации данных алгоритмов используется быстрое преобразование Фурье, что позволяет сократить объем вычислений между взаимодействующими частицами. В процессе вычислений происходит генерация деревьев, которые позволяют упорядочить рассматриваемые частицы по «ящикам». Для определения взаимодействующих частиц далее строятся списки взаимодействия. Предлагаемые в статье модификации известных алгоритмов позволяют сократить длину этих списков и, в результате, сократить объем вычислений.

Скоростные оценки предлагаемой методики проводились в основном на многопроцессорных системах с общей памятью (Cray T3D, KSR).

В [11] рассматриваются аналогичные алгоритмы в применении к астрофизическим системам небесных тел. Для распараллеливания вычислений применяется метод бинарного ортогонального разбиения области системы. Эта методика применяется для того, чтобы распределить частицы (небесные тела) по процессорам. После такого распределения описывается способ построения локальных деревьев и их последующего объединения.

Главной особенностью предлагаемого метода является распределение данных по вычислительным узлам и работа с ними уже локально. Таким образом, вычисления выполняются полностью параллельно, что уменьшает время решения задачи.

Кроме того, в алгоритме предлагается метод разделения всего вычислительного процесса на фазы: вычислительную и коммуникационную. Это позволяет оптимизировать задержки, возникающие при коммуникации между процессорами (вычислительными узлами), тем самым оптимизировав весь процесс вычислений. Благодаря этой особенности алгоритм может быть эффективно использован на вычислительных системах с распределенной памятью, например, на кластерах или в сети рабочих станций неоднородной структуры, коммуникационная среда которых обладает невысокой пропускной способностью.

В [12] рассматривается способ распараллеливания решения уравнений неявным методом Рунге—Кутты. Рассматриваются уравнения, возникающие в задачах молекулярной динамики.

Предлагаемый в статье алгоритм предназначен для применения в вычислительных системах с топологией кольцо (системы, в которых процессоры или вычислительные узлы соединены кольцом). Этот факт используется для оптимизации коммуникаций между процессорами.

Как и в алгоритмах, рассмотренных в [10], [11], основная идея состоит в распределении частиц моделируемой системы по процессорам. Таким образом сразу достигается распараллеливание вычислений на некоторых стадиях процесса решения, например, на стадии инициализации. Далее, за счет оптимизации распределения частиц по процессорам можно оптимизировать количество коммуникаций между процессорами с целью передачи рассчитанных локально величин.

Для увеличения шага интегрирования в численных методах решения уравнений движения прибегают к обрыванию потенциала взаимодействия между частицами на далеких расстояниях [13]. Однако в нескольких работах было показано, что такое пренебрежение взаимодействием на дальних расстояниях может качественно изменить поведение физической системы. Для того чтобы избежать усечения потенциала было предложено несколько аппроксимирующих схем. Наиболее широкое распространение получила схема FMM (fast multipole method). В [14] приведено краткое изложение этой схемы. Основная идея метода состоит в применении мультипольного разложения к функции Грина системы. На основе этого разложения близкие частицы объединяются в группы, и далее такие группы рассматриваются как некоторая эффективная частица, действующая на другие частицы с усредненной силой. Время, затрачиваемое на расчет сил в FMM, ведет себя как $O(N)$, где N — число частиц.

3. Метод Монте-Карло в задачах молекулярной динамики

Интерес к методам *Монте-Карло* (МК), или, в русскоязычной литературе, к методам *статистических испытаний* (СИ), в последние годы вызван колоссальным прогрессом в компьютерных технологиях. Современные компьютеры позволяют решать многие задачи вычислительной математики, физики элементарных частиц, массового обслуживания, статистической физики, молекулярной динамики и др. за обозримое время и с высокой точностью.

В основе методов Монте-Карло лежит компьютерное моделирование ансамблей физических, химических, биологических, социальных, экономических экспериментов с помощью генераторов случайных последовательностей [23, 29]. Машинный эксперимент позволяет непосредственно исследовать роль различных факторов в моделируемом объекте, поскольку при моделировании можно создавать искусственные ситуации, манипулируя отдельными факторами. Возможности машинного эксперимента при этом существенно шире, чем у реального.

Конкретные реализации методов МК (СИ), используемые при решении различных задач, могут весьма сильно отличаться друг от друга. Принципиальное сходство этих методов заключается в том, что в их основе лежит закон больших чисел, а в алгоритмах

обязательно используются датчики случайных чисел. Последние необходимы для формирования ансамблей экспериментов, тогда как закон больших чисел гарантирует асимптотические свойства этих ансамблей.

Методы МК (СИ) являются основным инструментом в задачах молекулярной динамики, и, как будет видно, в задачах стохастической микродинамики. Рассмотрим некоторые применения методов МК (СИ).

1. Вычисление средних. Первый вариант метода Монте-Карло в статистической термодинамике был предложен в [24]. Хотя с тех пор он существенно усовершенствовался, основные его идеи, заложенные в этой работе, остались неизменными. Первая — это генерация с помощью компьютерной модели ансамбля случайных событий. Вторая — представление термодинамических параметров в виде средних значений некоторых функций состояния макросистемы. Третья — вычисление указанных средних на ансамбле случайных событий.

Продемонстрируем эти идеи на примере приближенного вычисления интеграла [29]. Рассмотрим двумерную плоскость с координатами x, y и произвольную область G в ней. Необходимо приближенно вычислить интеграл

$$I = \int_G f(x, y)p(x, y) dx dy, \quad (19)$$

где $p(x, y)$ — непрерывная функция, определенная на G , такая что

$$\int_G p(x, y) dx dy = 1. \quad (20)$$

Причем известно, что

$$I = \int_G |f(x, y)|p(x, y) dx dy \quad (21)$$

существует. Это предположение позволяет трактовать интеграл (19) как математическое ожидание случайной величины $Z = f(x, y)$, т. е. $I = \mathcal{M}\{f(x, y)\}$.

Выберем в области G некоторое количество N случайных и независимых точек: $(x_1, y_1), \dots, (x_N, y_N)$. Следовательно будем иметь N независимых случайных значений $Z_1 = f(x_1, y_1), \dots, Z_N = f(x_N, y_N)$. Тогда оценкой интеграла (19) может служить величина

$$I_N = N^{-1} \sum_{i=1}^N Z_i. \quad (22)$$

Согласно закону больших чисел оценка I_N сходится по вероятности к значению интеграла I .

Выше уже отмечалось, что большинство вариантов метода Монте-Карло в статистической термодинамике построено по одной и той же формальной схеме. Это связано с тем, что искомые термодинамические величины могут быть представлены в одном

и том же общем виде

$$\bar{F} = \sum_{A_i} F(A_i)u_i, \quad (23)$$

где A_i — состояние,

$$u_i \geq 0, \quad \sum_i u_i = 1. \quad (24)$$

Под состоянием A_i понимается набор значений микро- и макро- переменных, характеризующих систему. В зависимости от того, каким было исходное выражение, отличаются друг от друга и наборы переменных, входящих в A_i . $F(A_i)$ — известная функция состояния A_i , вид $F(A_i)$ различен для различных термодинамических величин \bar{F} . Множитель $u_i = u_i(A_i)$ трактуется как вероятность реализации состояния A_i . Для термодинамической системы — это распределение Гиббса.

Совокупность всех возможных состояний A_i рассматривается как набор значений случайной дискретной величины, распределенной с вероятностью u_i . Производя достаточно большое количество испытаний этой случайной величины, можно образовать последовательность состояний и вычислить соответствующие средние, т. е. термодинамические величины. Получение такой последовательности, отвечающей заданному распределению вероятности u_i , достигается с помощью аппарата цепей Маркова.

Будем считать, что совокупность всех возможных состояний A_i , образует цепь Маркова с постоянными вероятностями переходов $A_i \rightarrow A_j$, равными $p_{ij} \geq 0$ и удовлетворяющими условию нормировки. В теории цепей Маркова доказывается, что предельные вероятности (в нашем случае u_i) связаны системой линейных уравнений с вероятностями переходов p_{ij} :

$$u_j = \sum_i u_i p_{ij} \text{ для всех } j. \quad (25)$$

Явный вид p_{ij} естественно, зависит от того, что понимается под состояниями A_i .

В качестве начального состояния A_i выбирается некоторое произвольное состояние; затем случайным образом выбирается состояние A_j из состояний, связанных с A_i вероятностью $p_{ij} \neq 0$, и вычисляется вероятность p_{ij} . Зная значение p_{ij} , можно производить испытания, имитирующие переход $A_i \rightarrow A_j$.

Простейшая реализация испытания состоит в следующем. Датчик случайных чисел выдает случайное число ξ , равномерно распределенное на интервале $(0, 1)$. Если оказывается, что $\xi \leq p_{ij}$, то переход считается осуществившимся и в качестве A_i выбирается A_j ; если же оказывается, что $\xi > p_{ij}$, то в качестве A_i выбирается снова A_i . Начиная с выбранного A_i вся процедура повторяется сначала. После проведения большого числа таких последовательных испытаний образуется последовательность состояний, называемая траекторией цепи Маркова.

2. Случайный поиск. Методы случайного поиска также относятся к одной из модификаций методов Монте-Карло, так как их основой является генерация ансамбля случайных событий. Но в отличие от предыдущей модификации ансамбль случайных событий в методах случайного поиска используется не для вычисления средних, а для поиска решений в задачах оптимизации.

Рассмотрим задачу

$$\min f(x), \quad x \in X, \quad (26)$$

где $f(x)$ — унимодальная непрерывная функция, X — непустое, выпуклое множество. Простейший метод Монте-Карло (случайного поиска) для поиска точки минимума представляет собой итерационный процесс, на каждом шаге которого генерируется фиксированное количество N случайных точек, равномерно распределенных в допустимых множествах $X_k \in X$, формируемых по соответствующему правилу. Алгоритм, реализующий эту идею имеет вид:

- 1) $k = 1, X_1 = X$;
- 2) Генерируются случайные точки x^1, \dots, x^N , равномерно распределенные в X_1 ;
- 3) Определяется $f_1 = \min_{i \in [1, N]} f(x^i)$;
- 4) Формируется множество $X_2 = X_1 \cap \{x : f(x) < f_1\}$,

и процесс повторяется.

Сходимость этого простого итерационного процесса удается доказать для $f(x) = c^T x$ [16].

Один из важнейших этапов этого алгоритма состоит в механизме генерации *равномерно* распределенных в заданном множестве случайных точек. Для множеств, описываемых системой линейных матричных неравенств, эту задачу удается свести к генерации скалярной случайной величины, равномерно распределенной на ограниченном интервале [17].

3. Генерация случайных последовательностей с заданными вероятностными характеристиками. В методах МК (СИ) равномерно распределенная на интервале $[0, 1]$ случайная величина является источником случайных последовательностей с заданными вероятностными характеристиками. Рассмотрим случайный вектор a с независимыми компонентами a_1, \dots, a_m и плотностью распределения

$$P(a) = \prod_{k=1}^m p_k(a_k), \quad a \in A, \quad (27)$$

где $p_k(a_k)$ — плотность вероятностей компоненты $a_k \in I_k = [a_k^-, a_k^+]$, A — область определения функции $P(a)$, которая представляет собой многомерный параллелепипед, образованный прямым произведением интервальных множеств I_k :

$$A = I_1 \times I_2 \times \dots \times I_m. \quad (28)$$

В силу независимости компонент (27) для генерации случайной точки в множестве A (28) необходимо m независимых генераторов случайных чисел,

например, с равномерной плотностью распределения $p_0(\eta)$, где случайная величина $\eta \in [0, 1]$.

Рассмотрим компоненту a_k , плотность распределения вероятностей которой $p_k(a_k)$. Один из способов генерации значений этого параметра основан на использовании функции распределения вероятностей

$$W_k(a_k) = \int_{a_k^-}^{a_k^+} p_k(x) dx, \quad (29)$$

которая принимает значения на интервале $[0, 1]$. Рассмотрим уравнение

$$W_k(a_k) = \eta, \quad (30)$$

где η — случайная величина, равномерно распределенная на интервале $[0, 1]$. Известно [29], что случайная величина a_k , являющаяся решением этого уравнения, имеет плотность распределения вероятностей $p_k(a_k)$.

Более сложной оказывается задача генерации случайного вектора a , когда компоненты a_1, \dots, a_m зависимы. Одна из форм зависимости может быть описана условными плотностями распределения вероятностей, например в следующем виде: $p_1(a_1), p_2(a_2|a_1), \dots, p_m(a_m|a_1, \dots, a_{m-1})$. Тогда совместная плотность распределения

$$p(a) = p_1(a_1)p_2(a_2|a_1) \dots p_m(a_m|a_1, \dots, a_{m-1}). \quad (31)$$

Введем условные распределения вероятностей

$$W_i(a_i|a_1, \dots, a_{i-1}) = \int_{a_i^-}^{a_i^+} p_i(x|a_1, \dots, a_{i-1}) dx, \quad (32)$$

$$i \in [1, m],$$

и рассмотрим систему уравнений

$$\begin{aligned} W_1(a_1) &= \eta_1, \\ W_2(a_2|a_1) &= \eta_2, \\ &\dots \dots \dots \\ W_m(a_m|a_1, \dots, a_{m-1}) &= \eta_m. \end{aligned} \quad (33)$$

Если η_1, \dots, η_m — независимые случайные величины, равномерно распределенные на интервале $[0, 1]$, то совокупность случайных параметров a_1, \dots, a_m имеет совместную плотность $p(a)$ (31).

4. Пример исследования многочастичной системы в среде MATLAB

4.1. Моделирование динамики взаимодействующих частиц

Рассмотрим физическую систему, состоящую из абсолютно упругих шаров, находящихся в некотором ограниченном объеме трехмерного пространства. Зададим потенциальную энергию взаимодей-

ствия двух шаров диаметра d в зависимости от расстояния r между их центрами в следующем виде:

$$u(r) = \begin{cases} \infty, & \text{если } r \leq d; \\ 0, & \text{если } r > d. \end{cases} \quad (34)$$

Ограничившись случаем парных взаимодействий между шарами одинаковой массы и диаметра, обсудим основные аспекты моделирования динамики такой системы.

Согласно выражению для потенциальной энергии (34) шары взаимодействуют только в момент столкновения, а в течение времени между столкновениями они совершают равномерное прямолинейное движение. В таком случае, задав какое-либо начальное состояние системы, будем последовательно находить время до ближайшего столкновения, координаты всех шаров в момент столкновения и пересчитывать скорости сталкивающихся шаров. Вычисление времен столкновений основано на законах сохранения энергии и импульса. Если происходит столкновение между двумя шарами с координатами центров \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 , обладающих скоростями до столкновения \mathbf{v}_1 и \mathbf{v}_2 , то скорости шаров \mathbf{u}_1 и \mathbf{u}_2 после столкновения вычисляются по формулам:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_1 &= \mathbf{v}_1 - \langle (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2), \mathbf{r}_{12} \rangle * \frac{\mathbf{r}_{12}}{|\mathbf{r}_{12}|^2}; \\ \mathbf{u}_2 &= \mathbf{v}_2 + \langle (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2), \mathbf{r}_{12} \rangle * \frac{\mathbf{r}_{12}}{|\mathbf{r}_{12}|^2}, \end{aligned} \quad (35)$$

где $\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$ — вектор, соединяющий центры шаров.

Алгоритм для моделирования динамики упругих шаров условно можно разделить на три части:

- инициализация;
- отслеживание перехода к равновесию;
- генерирование необходимых данных.

На стадии инициализации задается первоначальное состояние шаров. Это состояние определяется количеством шаров N , плотностью их упаковки η , которая равна отношению объема всех шаров к объему пространства, в котором они находятся и значениями фазовых переменных — координат и скоростей всех шаров.

Вторая часть алгоритма служит для того, чтобы определить тот момент, когда система перешла к макроскопическому равновесию. В равновесии средние по времени характеристики системы не должны зависеть от начального состояния, из которого началось моделирование. Другими словами с момента начала эксперимента должно пройти достаточное время для того, чтобы система «забыла» каким способом она была инициализирована. На практике переход к равновесию отслеживается путем вычисления некоторых параметров, которые характеризуют состояние системы в фазовом пространстве.

На третьем этапе происходит накопление необходимых экспериментальных данных и расчет интересных макроскопических показателей системы.

4.2. Таблица времен столкновений

Первоначально определяется произойдет ли столкновение между двумя шарами и в какой момент. Время столкновения между шарами t_c находится из условия равенства расстояния между центрами шаров их диаметру:

$$t_c = t_0 + \left(-\langle \mathbf{v}_{12}, \mathbf{r}_{12} \rangle - \frac{\sqrt{\langle \mathbf{v}_{12}, \mathbf{r}_{12} \rangle^2 - \mathbf{v}_{12}^2 (\mathbf{r}_{12}^2 - d^2)}}{\mathbf{v}_{12}^2} \right), \quad (36)$$

где t_0 — начальное время, $\mathbf{v}_{12} = \mathbf{v}_1(t_0) - \mathbf{v}_2(t_0)$, $\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_1(t_0) - \mathbf{r}_2(t_0)$. Необходимое условие для столкновения состоит в том, что шары должны сближаться друг с другом:

$$\langle \mathbf{v}_{12}, \mathbf{r}_{12} \rangle < 0; \quad (37)$$

достаточное условие заключается в том, чтобы подкоренное выражение в (36) было неотрицательным:

$$\langle \mathbf{v}_{12}, \mathbf{r}_{12} \rangle^2 - \mathbf{v}_{12}^2 (\mathbf{r}_{12}^2 - d^2) \geq 0. \quad (38)$$

Случай равенства нулю подкоренного выражения соответствует ситуации, когда один шар не сталкивается с другим, а лишь касается его.

Главная задача в моделировании движения упругих шаров состоит в том, чтобы зная положения и скорости N шаров в момент времени t_0 , определить какие два шара столкнутся между собой раньше остальных и через какое время произойдет это столкновение. Очевидный способ решения этой задачи заключается в том, чтобы после каждого столкновения для каждой из $\frac{1}{2}N(N-1)$ пар шаров рассчитывать времена столкновений по формулам (36)–(38) и выбирать из них наименьшее. Однако для систем состоящих из большого количества шаров такой способ требует значительных вычислительных ресурсов. Можно сократить объем вычислений при помощи создания матрицы времен столкновений и пересчета лишь некоторых ее элементов по формулам (36)–(38).

Матрица создается на стадии инициализации, до вхождения в главную часть программы. Зная начальные скорости и координаты шаров, определим время столкновения каждой из $\frac{1}{2}N(N-1)$ пар. Таким образом, элемент t_{ij} искомой матрицы — это время столкновения шара i с шаром j ($i = 1, \dots, N-1$; $j = i+1, \dots, N$). Затем в главном цикле программы для нахождения следующих пар сталкивающихся шаров происходит поиск новой матрицы. Переходя от первого столкновения ко второму по формулам (36)–(38) вычисляются лишь те элементы матрицы, которые соответствуют столкнувшимся шарам i^* , j^* на первом шаге. Если $t_{i^*j^*}$ — время до ближайшего столкновения, то пересчитав скорости сталкивающихся шаров по (35) заново вычисляются только те элементы матрицы t_{ij} , которые состоят в строках и столбцах с номерами i^* , j^* . Остальные элементы

матрицы на втором шаге находятся простым вычитанием времени $t_{i,j}$ из элементов матрицы на первом шаге, что значительно ускоряет процесс моделирования.

Для того чтобы наиболее точно промоделировать свойства макроскопической системы и минимизировать поверхностные эффекты, связанные с взаимодействием шаров со стенками сосуда, в котором они находятся, применяются периодические граничные условия. Пусть при моделировании все шары располагаются в кубе, который назовем первичной ячейкой. Для того чтобы избавиться от шаров, находящихся рядом со стенками, и окружить их другими шарами, первичная ячейка окружается периодически повторяющимися собственными копиями. Каждая копия содержит N шаров, обладающих такими же скоростями и находящимися в таких же относительных положениях, как и в первичной ячейке. Когда шар вылетает из первичной ячейки (или влетает в первичную ячейку) с одной стороны, это перемещение сопровождается одновременным влетом (или вылетом) копии этого шара из соседнего кубика с противоположной стороны. Таким образом, количество моделируемых частиц в первичной ячейке в каждый момент постоянно. Так как моделирование в молекулярной динамике происходит в безразмерных единицах, то положим длину стороны куба за единицу измерения длины, т. е. $L = 1, V = L^3 = 1$.

Когда вычисляются времена столкновений для системы с периодическими границами, то следует рассматривать не только возможность столкновения шара i с шаром j , но и случаи столкновения с образами j . При моделировании в трехмерном пространстве ограничимся рассмотрением 26 копий первичного кубика. Отметим, что сразу несколько образов шара j могут удовлетворять условиям (37), (38). Требуется найти только тот образ, на котором достигается минимальное время до столкновения с шаром i . По прошествии этого времени все другие образы шара j будут взаимодействовать с некоторыми образами шара i .

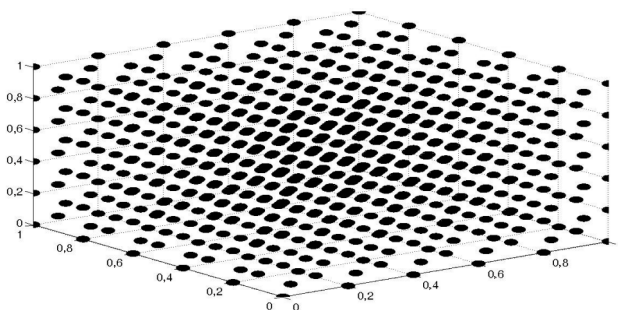


Рис. 6. Начальное расположение шаров в вершинах границированной кубической решетки; $N = 500, \eta = 0,01$

4.3. Отслеживание перехода к равновесию

При моделировании молекулярной динамики до наступления равновесного состояния в системе все ее физические характеристики не являются достоверными результатами моделирования. Поэтому необходимо найти момент перехода в равновесное состояние, после которого на основе полученных результатов можно делать какие-то выводы.

Для отслеживания перехода к равновесию используются 2 параметра: один, отвечающий за упорядочивание шаров в координатном пространстве, а второй — за отслеживание перехода к максвелловскому распределению скоростей. Если в начальный момент шары расположены в вершинах границированной кубической решетки (см. рис. 6), то можно использовать величину трансляционного порядка [9] для определения меры разброса частиц в координатном пространстве. Для отслеживания перехода к максвелловскому распределению скоростей будем вычислять H -функцию Больцмана [2].

Рассмотрим параметр порядка $\lambda = \frac{1}{3}(\lambda_x + \lambda_y + \lambda_z)$,

где $\lambda_x = \frac{1}{N} \sum_1^N \cos\left(\frac{4\pi x_i}{a}\right)$, a — длина образующей

ячейки границированной кубической решетки; x_i — первая компонента вектора \mathbf{r} i -й частицы. Аналогичным образом записываются λ_y, λ_z . Так как в начальный момент все компоненты вектора координат шаров являются целыми множителями $\frac{1}{2}a$, то на стадии инициализации $\lambda = 1$. Когда решетка полностью разрушена и шары случайно распределены около вершин решетки, то λ колеблется около нуля. Амплитуда колебаний зависит от количества частиц и в равновесии порядка $\frac{1}{\sqrt{N}}$. Время, требуемое для разрушения первоначальной решетки, зависит от плотности упаковки шаров и начального распределения скоростей (см. рис. 7). Пунктиром изображены линии $\lambda = \pm \frac{1}{\sqrt{N}}$

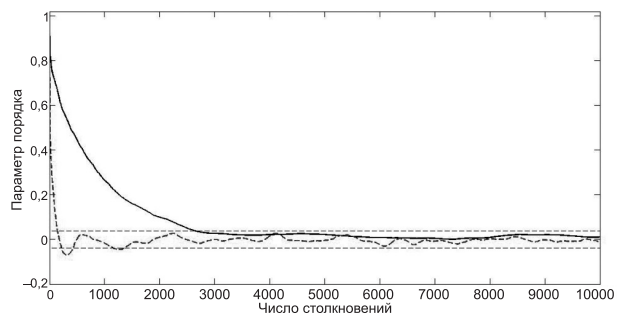


Рис. 7. Изменение параметра порядка для системы из $N = 500$ шаров с плотностью $\eta = 0,1$ (пунктир), $\eta = 0,3$ (сплошная линия), начальное распределение скоростей равномерное на $[-1, 1]$ для каждой компоненты

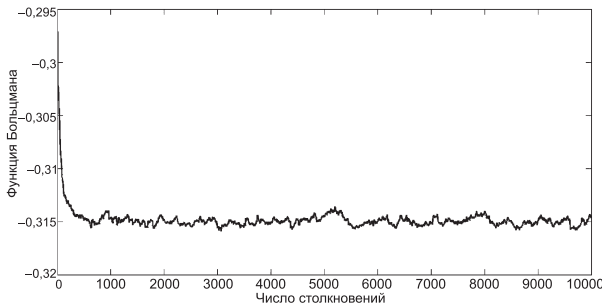


Рис. 8. Изменение H -функции Больцмана для системы из $N = 500$ шаров с плотностью $\eta = 0,1$, начальное распределение скоростей равномерное на $[-1, 1]$ для каждой компоненты

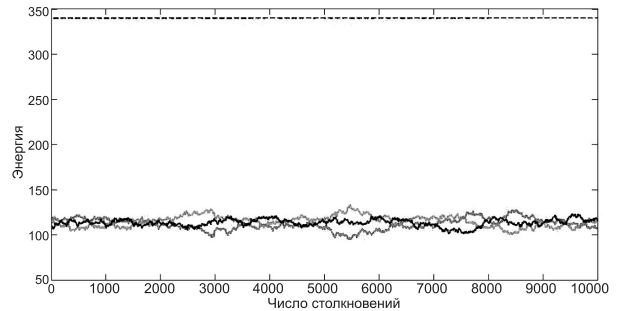


Рис. 9. График энергии для системы из $N = 500$ шаров с плотностью $\eta = 0,1$, начальное распределение скоростей равномерное на $[-1, 1]$ для каждой компоненты. Сплошные линии — кинетическая энергия шаров по компонентам x, y, z ; пунктир — полная энергия системы

Для отслеживания перехода к максвелловскому распределению скоростей можно вычислять само распределение $f(v)$ и следить за его изменением с течением времени. Однако отслеживать изменение распределения довольно неудобно, и хотелось бы иметь скалярную величину, отражающую суть протекающего процесса. Такой величиной может выступать H -функция Больцмана. Для ее вычисления необходимо оценивать распределение скоростей. Так как $f(\mathbf{v})d\mathbf{v} = \frac{1}{N}N(\mathbf{v})d\mathbf{v}$, где $N(\mathbf{v})$ — количество частиц, имеющих скорость в интервале $(\mathbf{v}; \mathbf{v} + d\mathbf{v})$, то для определения $f(v_x)dv_x$ выберем достаточно узкий интервал Δv_x и найдем количество частиц, имеющих скорость в интервале $v_x \pm \frac{1}{2}\Delta v_x$. Мгновенное значение H -функции Больцмана равно $H = \frac{1}{3}(H_x + H_y + H_z)$, где $H_i = \sum_{\Delta v_i} f(\Delta v_i) \ln f(\Delta v_i) \Delta v_i$, $i = x, y, z$ (см. рис. 8).

4.4. Накопление экспериментальных данных

Главный цикл программы, в котором вычисляются фазовые траектории системы [27], состоит из следующих этапов:

1. Из таблицы времен столкновений между шарами находим минимальный интервал до следующего столкновения Δt и определяем номера сталкивающихся шаров i^*, j^* .
2. Из текущих позиций $\mathbf{r}_k(t_0)$ смещаем шары в течение времени Δt до ближайшего столкновения: $\mathbf{r}_k(t_0 + \Delta t) = \mathbf{r}_k(t_0) + \mathbf{v}_k(t_0)\Delta t$, $k = 1, \dots, N$.
3. Применяем периодические граничные условия для каждого шара, покидающего первичную ячейку: заменяем его на шар, вошедший в первичную ячейку с противоположной стороны.
4. По формулам (35) рассчитываем новые скорости сталкивающихся шаров.
5. По формулам (36)–(38) вычисляем новые элементы матрицы времен столкновений для шаров i^*, j^* и для всех других шаров, которые могли бы столкнуться с i^* или j^* , если бы i^*, j^*

не сталкивались. Остальные элементы матрицы уменьшаем на Δt .

6. Вычисляем вклад в рассматриваемые параметры системы.
7. Повторяем шаги 1)–6) такое количество раз, которое позволит с требуемой точностью оценить исследуемые характеристики системы.

Заметим, что на 4-м шаге явно не определяется, какой именно образ шара j сталкивается с шаром i . Вместо этого на шаге 5) для вычисления скорости шаров после столкновения используется правило ближайшей частицы. Применяется следующее преобразование:

$$\begin{aligned} \text{если } x_{ij} > \frac{1}{2}, & \quad \text{тогда } x_{ij} = x_{ij} - 1; \\ \text{если } x_{ij} < -\frac{1}{2}, & \quad \text{тогда } x_{ij} = x_{ij} + 1, \end{aligned}$$

где x_{ij} — первая компонента вектора, соединяющего центры шаров i и j . Аналогичные преобразования применяются и для компонент y и z . Так как расстояние измеряется в единицах ребра куба первичной ячейки $L = 1$, то если какая-либо компонента вектора \mathbf{r}_{12} по модулю больше $\frac{1}{2}$, мы применяем это преобразование. При столкновении $|\mathbf{r}_{12}| = d$, а σ обязательно меньше L . Так как шар i может столкнуться только с шаром j или одним из его образов, то образ, ближайший к i в момент столкновения обязательно является тем, с которым сталкивается шар i . На шестом этапе могут вычисляться разные интересные исследователя свойства системы. Для физических моделей молекулярной динамики это могут быть давление газа, сдвиговая и объемная вязкость и др.

Важным этапом разработки любой программы является ее тестирование и проверка достоверности получаемых результатов. В нашем случае для проверки корректности кода можно проверить несколько фактов: λ флуктуирует вокруг нуля с амплитудой $\frac{1}{\sqrt{N}}$; H -функция приближается к значению, соответствующему распределению Максвелла; импульс

системы сохраняется; полная кинетическая энергия постоянна во времени, более того, одинаково распределена по направлениям движения (см. рис. 9); значение средних показателей одинаково вне зависимости от способа инициализации системы.

5. Стохастическая микродинамика

Напомним, что стохастическая микродинамика (СМ) представляет собой технологическую платформу научного исследования динамических систем, содержащих большое количество элементов со случайной собственной динамикой и случайными взаимодействиями. Молекулярная динамика является идеальным базисом этой платформы, но последняя ориентирована на «немолекулярные» элементы, движение которых происходит в среде, отличной от различного вида потенциальных (в физическом смысле) полей.

Технологическая платформа СМ ориентирована на исследование собственной стохастической элементарной динамики, возникающей как следствие параметрической или функциональной неопределенности, и взаимодействия случайного количества указанных элементов, которое представляет собой стохастический обмен экономическими или информационными ресурсами. Несмотря на данную ориентацию, технологическая платформа является открытой для иных форм стохастической микродинамики.

5.1. Модели стохастической микродинамики

Феноменология. Будем рассматривать систему, состоящую из большого количества частиц (элементов, участников — термины могут быть разными в зависимости от конкретного класса систем). Это количество находится в интервале 10^3 – 10^7 . Каждая частица наделена собственной динамикой, которая предполагается стохастической. Это означает, что если бы система состояла из одной какой-то частицы, то ее поведение (движение) в системном пространстве (фазовом пространстве) описывалось некоторой случайной траекторией.

Частицы взаимодействуют друг с другом. Феноменология взаимодействий складывается из двух явлений, одно из которых связано с количеством взаимодействующих частиц в каждый интервал времени, а другое — с характером взаимодействия.

В предлагаемой модели первое явление предполагается случайным, причем, количество взаимодействующих частиц фиксировано, а их номера выбираются случайным образом.

Второе явление — акт взаимодействия, носит характер обмена ресурсами, понимаемым в широком смысле. Так например, обмены между экономическими агентами на рынке носят материальный характер (товары, деньги). Обмены между частицами в моделях молекулярной динамики являются энергетическими. Водитель, движущийся по двухполосной дороге и желающий обогнать впереди идущий автомобиль, принимает соответствующее решение,

обмениваясь информацией с водителями, окружающими его на соседних полосах, спереди и сзади. Количества обмениваемых ресурсов так же являются случайными.

Математическая модель. Рассмотрим систему из N частиц и пространство состояний R^n . Выделим в пространстве состояний область $X \in R^n$, которой принадлежат состояния всех частиц на интервале времени $[0, T]$. Пространство состояний может иметь произвольную размерность в отличие от μ -пространства, которое является 6-ти мерным.

Выделим в области X непересекающиеся множества G_1, \dots, G_m так, что

$$G_k \cap G_j = \emptyset \text{ для всех } k, j \in [1, m],$$

$$X = \bigcup_{j=1}^m G_j. \quad (39)$$

Состояние каждой частицы характеризует вектор $x^i(t) = \{x_1^i(t), \dots, x_n^i(t)\}$, где $i \in [1, N]$. Из феноменологического описания следует, что вектор $x^i(t)$ предполагается случайным, но с вероятностью 1 принадлежит области X для всех $t \in [0, T]$.

Изменение состояния частицы происходит под влиянием

- собственных динамических свойств, которые будем характеризовать вектор-функцией $F^i(x^i(t), \xi^i(t))$ и
- ее взаимодействия в данный момент времени с некоторым количеством других частиц с номерами $i_1(t), \dots, i_s(t)$, которое будем характеризовать вектор-функцией $\Phi^i(x^{i_1(t)}, \dots, x^{i_s(t)}, \zeta^i(t))$.

В этих выражениях $\xi^i(t)$ и $\zeta^i(t)$ — случайные функции, имитирующие случайные факторы в собственной динамике частиц и в их взаимодействии соответственно, s — фиксированный целочисленный скаляр, i_1, \dots, i_s — случайные числа из интервала $[1, N]$.

Поток, определяющий изменение вектора скорости частицы, характеризуется вектор-функцией $\mathcal{L}^i[F^i, \Phi^i]$.

Итак, стохастические микродинамические процессы описываются следующей системой дифференциальных уравнений:

$$\frac{dx^i(t)}{dt} = \mathcal{L}^i [F^i(x^i(t), \xi^i(t)), \Phi^i(x^{i_1(t)}, \dots, x^{i_s(t)}, \zeta^i(t))],$$

$$x^i(t) \in X, \quad i \in [1, N]. \quad (40)$$

Последнее условие в этих выражениях весьма существенное. Оно определяет свойства вектор-функций $\mathcal{L}^i, F^i, \Phi^i$, которые обеспечивают принадлежность траекторий частиц области X .

5.2. Микро-, мезо- и макроограничения

На динамику частицы оказывают влияние три типа ограничений. Ограничения первого типа (*микроограничения*) представляют собой некоторые допол-

нительные условия на траектории движения каждой частицы или некоторых их групп. Примером таких дополнительных ограничений является область X в (40). Феноменологически траектория частицы, достигнув границы области X должна «отразиться» от нее внутрь данной области. Для выбора направления «отражения» приходится привлекать дополнительные гипотезы о поведении частицы. Например, если область X задана системой неравенств $g_s(x_1, \dots, x_n) \leq 0$, $s \in [1, S]$, и в некоторый момент времени t^* траектория j -ой частицы достигла границы так, что одно из неравенств, а именно, $g_s(x_1^j(t^*), \dots, x_n^j(t^*)) = 0$, то вектор скорости на «отраженной» траектории может совпадать с направлением антиградиента $\nabla g_s(x_1^j(t^*), \dots, x_n^j(t^*))$.

Второй тип ограничений (*мезоограничения*) — это дополнительные условия на структуру и емкость подмножеств G_1, \dots, G_m . Например, в каждый момент времени количество частиц, попадающих в эти подмножества неограничено (аналог статистики Эйнштейна—Бозе). Противоположная ситуация, когда емкости подмножеств G_1, \dots, G_m ограничены, т. е. $0 \leq Q_k \leq q_k^0$, $k \in [1, m]$. Поэтому решая систему уравнений (40), необходимо контролировать заполняемость подмножеств в каждый момент времени. Если какое-то из них заполнено, а траектория какой-то частицы «хочет» проникнуть в это подмножество (вектор скорости направлен внутрь подмножества), ее следует «отразить» от границы подмножества. Правила «отражения» могут быть разные, но работают они на интервалах времени, равных шагу интегрирования.

И наконец, третий тип ограничений (*макроограничения*) возникает, когда вводятся дополнительные условия на систему в целом, т. е. на ее макросостояние.

5.3. Преобразование микросостояний в макросостояния

Траектория частицы (траектория ее микросостояния) в области X в течение достаточно большого промежутка времени посетит, по-видимому, все подмножества G_1, \dots, G_m , объединение которых образует область X . Но в каждый фиксированный момент времени t траектория будет находиться только в каком-то одном подмножестве, например, в G_k . В момент времени t в подмножестве G_k могут оказаться траектории и каких-то других частиц в количестве $Q_k(t)$. Поэтому в каждый момент времени t имеет место распределение количества частиц $Q(t) = \{Q_1(t), \dots, Q_k(t), \dots, Q_m(t)\}$ по подмножествам $G_1, \dots, G_k, \dots, G_m$, который можно принять за характеристику макросостояния системы частиц в момент времени t .

Одним из важных вопросов в этой схеме моделирования связи микро- и макросостояний является определение «посещения» траекторией частицы подмножества G_k . Будем считать, что i -ая частица посетила подмножество G_k , если ее траектория $x^i(t) \in$

G_k в течение интервала времени $t_+(i) - t_-(i) > \varpi$, где ϖ — заданная величина.

Для каждой частицы фиксируются моменты t_- входа ее траектории в соответствующее подмножество и моменты выхода t_+ из него. Вообще говоря, момент входа траектории в подмножество G_k есть момент выхода из подмножества G_j , и наоборот для t_+ . Но, поскольку для решения системы (40) применяется какая-либо разностная схема с шагом h , то эти моменты времени могут отличаться на величину шага. Если величина времени пребывания частицы в подмножестве меньше ϖ , то считается, что частица не посетила его и не внесла свой вклад в количество частиц, посетивших это подмножество.

6. Некоторые проблемы стохастической микродинамики

Моделирование стохастических микропроцессов:

1. Математическая модель стохастической динамической системы, траектории которой с вероятностью 1 принадлежат заданной области пространства состояний.
2. Модели влияния детерминированных мезо- и макроограничений на стохастические микропроцессы.
3. Математические модели стохастических микро-взаимодействий.

Эффективный метод Монте-Карло для моделирования стохастической микродинамики:

1. Методы генерации случайных последовательностей с асимптотически желаемыми вероятностными характеристиками.
2. Эффективное число испытаний в стохастической микродинамике, обеспечивающее приближение к асимптотическим вероятностным характеристикам с заданной точностью.

Трансформация микросостояний в макросостояния:

1. Развитие вероятностных инструментов для моделирования трансформации микросостояний в макросостояния.
2. Стационарные макросостояния и принцип максимизации энтропии для стохастической микродинамики.
3. Трансформация микросостояний в макросостояния для стохастических многочастичных динамических систем с фиксированной пространственной структурой.

Визуализация результатов:

1. Применение и развитие методов (2D, 3D)-статистических презентаций.
2. Разработка методов динамических презентаций.

Программное обеспечение для компьютерной имитации процессов стохастической микродинамики:

1. Разработка программного обеспечения для многопроцессорных вычислительных кластеров.
2. Разработка программного обеспечения для использования распределенных вычислительных ресурсов.

Заклучение

Познавательные и прагматические качества инструментария молекулярной динамики стимулировали желание попытаться использовать и, конечно, развить ее идеологию для компьютерной имитации микродинамических процессов иной природы, которые квалифицируются как процессы стохастической микродинамики. В отличие от ньютоновских (гамильтоновых) молекул, собственная динамика элементов является стохастической и их взаимодействия — также стохастические. В этом смысле процессы стохастической микродинамики являются новым объектом научного исследования. Для эффективной реализации научного исследования предлагается сформировать технологическую платформу «Стохастическая микродинамика», которая представляет собой совокупность математических моделей, специализированных методов последовательных и параллельных вычислений, процедур эффективного статистического эксперимента, моделей формирования макропоказателей, средств визуализации, погруженных в проблемно-ориентированную информационно-программную среду.

Литература

1. Boltzmann L. On the link between the second beginning of mechanical calory theory and probability theory in theorems of thermal equilibrium, 1877 (русский перевод: *Больцман Л.* Избранные труды. Сер. «Классики науки». М.: Наука, 1984. С. 190–236).
2. Ландау Л. Д., Лившиц Е. М. Статистическая физика. М.: Наука, 1964.
3. Meerkov S. M. Mathematical Theory of Behavior — Individual and Collective Behavior of Retardable Elements // *Mathematical Biosciences*. 1979. Vol. 43. P. 41–106.
4. Haken H. Synergetics. Heidelberg: Springer-Verlag, 1974.
5. Prigogine I., Stengers I. Order out of Chaos. London: Heinemann, 1984.
6. Weidlich W., Haag G. Interregional Migration: Dynamic Theory and Comparative Analysis. Berlin: Springer-Verlag, 1988.
7. Вайдлих В. Социодинамика. Системный подход к моделированию в социальных науках. М.: URSS, 2004.
8. Попков Ю. С. Теория макросистем. М.: URSS, 1999.
9. Verlet L. Computer «experiments» on classical fluids. Thermodynamical properties of Lennard—Jones molecules // *Physical Review*. 1967. Vol. 159. № 1. P. 98–103.
10. Board J., Nakura Z., Elliot W., Rankin W. Scalable Variants of Multipole-based Algorithms for Molecular Dynamics Applications // *Proc. of 7th SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing*. 1995. P. 1–6.
11. Liu P., Bhat S. N. Experience with Parallel N-body Simulation // *IEEE Trans. on Parallel and Distributed Systems*. 2000. Vol. 11. № 11. P. 1–17.
12. Janezic D., Trobec R. Parallelization of an Implicit Runge—Kutta Method for Molecular Dynamics Integration // *Journal Chemical Information Computing*. 1994. Vol. 34. P. 641–646.
13. Humphreys D. D., Friesner R. A., Berne B. J. A Multiple-time-step Molecular Dynamics Algorithm for Macromolecules // *Journal on Physical Chem*. 1994. Vol. 9. P. 6885–6892.
14. Figueirido F., Levy R. M., Zhou R., Berne B. J. Large Scale Simulation of macromolecules in solution: combining the periodic fast multipole method with multiple time step integrators // *Journal on Chem. Phys*. 1997. Vol. 106. № 23. P. 9835–9849.
15. Шноль Э. Э. и др. Метод молекулярной динамики в физической химии. М.: Наука, 1996.
16. Dabbene F., Shcherbakov P., Polyak B. T. A randomized cutting plane method with probabilistic geometric convergence // *In Proc. of the 47th CDC*. Mexico: Cancun. 2008. P. 3044–3049.
17. Polyak B. T., Gryazina E. N. Randomized methods based on new Monte Carlo schemes for control and optimization // *Ann. Oper. Res. Online firstTM*, 15 July. 2009.
18. Комолкин А. В., Эльц Е. Э. Молекулярная динамика: от модели к визуализации // *Компьютерные инструменты в образовании*. 2004. № 3. С. 5–14.
19. Мирный В., Фрэнер М. Об одной программе моделирования молекулярной динамики газа с элементами распараллеливания // *Вычислительные технологии*. 2001. Т. 6. № 3. С. 32–50.
20. Подрыга В. О. Моделирование процесса установления термодинамического равновесия методом молекулярной динамики // *Математическое моделирование*. 2010. Т. 22. № 11. С. 39–48.
21. Allen M. P., Tildesley D. J. Computer Simulation of Liquids. Oxford: Calderon Press, 2002.
22. Шайтан К. В., Терешкина К. Б. Молекулярная динамика белков и пептидов: Методическое пособие. [Электронный ресурс:] <http://www.moldyn.ru/library/manual>
23. Замалин В. М., Норман Г. Э., Филинов В. С. Метод Монте-Карло в статистической термодинамике. М., Наука, 1977.
24. Metropolis N., Rosenbluth M., Rosenbluth A. Equation of State Calculations by fast Computing Mashines // *J. Chem. Physics*. 1953. Vol. 21. № 6. P. 1087–1092.
25. Rapaport D. C. The Art of Molecular Dynamics Simulation. Cambridge University Press, 2009.
26. Schlick T. Molecular Modeling and Simulation. Springer, 2006.
27. Haile I. J. Molecular Dynamics Simulation. Wiley, 1992.
28. Холмуродов Х. Т., Алтайский М. В., Пузынин И. В., Дардин Т., Филатов Ф. П. Методы молекулярной динамики для моделирования физических и биологических процессов // *Физика элементарных частиц и атомного ядра*. 2003. Т. 34. Вып. 2. С. 474–515.
29. Соболев И. М. Численные методы Монте-Карло. М.: Наука, 1973.

Двуреченская Марина Александровна. М. н. с. ИСА РАН. Окончила Московский физико-технический институт в 2010 г. Кол-во печатных работ: 3. Область научных интересов: системные исследования, математическое моделирование стохастических, демографических и экономических процессов, высокопроизводительные вычисления. E-mail: bukokk@gmail.com

Попков Алексей Юрьевич. С. н. с. ИСА РАН. Окончил МГУ в 2002 г. Кол-во печатных работ: 7. Область научных интересов: математическое моделирование, высокопроизводительные вычисления, параллельные алгоритмы, распределенные вычислительные системы. E-mail: apopkov@isa.ru

Попков Юрий Соломонович. Директор ИСА РАН. Член-корр. РАН, д. т. н., профессор. Окончил Московский энергетический институт в 1960 г. Кол-во печатных работ: 146. Область научных интересов: системный анализ, математическое моделирование. E-mail: popkov@isa.ru

Шкловский Евгений Юрьевич. Техник 1 категории ИСА РАН. Окончил Московский физико-технический институт в 2009 г. Область научных интересов: математическое моделирование стохастических систем, интеллектуальный анализ данных, финансовая математика, математическая экономика и эконометрика. E-mail: evgeniy.shklovskiy@gmail.com