

Использование метода справочников для расчета дальнедействующих потенциалов

В.Н. Агиевич, В.А. Яворский

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Одной из актуальных задач молекулярной динамики является ускорение расчета дальнедействующих потенциалов в больших физических системах. Помимо алгоритмов «частица-частица» с квадратичной сложностью вычислений, которые являются эталоном по точности, в настоящее время существует ряд алгоритмов, ускоряющих расчеты за счет различных приближений – метод Эвальда [1], метод частица-частица/частица-сетка (PPPM) [2], иерархические модели [3], мультипольный метод и другие.

В данной работе предлагается новый алгоритм расчета дальнедействующего потенциала на примере электростатического потенциала Кулона. Он основан на методе частица-сетка и мультипольном подходе. При переходе частицы между областями в них за конечное число операций (не зависящее от числа частиц) рассчитываем новые значения среднего заряда, центра системы и дисперсии для каждой из координат, соответствующих заданным осям (отдельно для положительных и отрицательных зарядов). Пересчитываем коэффициенты среднеквадратичного отклонения для новых осей координат, где ось абсцисс направлена на искомую частицу. Рассчитываем значение силы взаимодействия между частицей и центром области, где возможная неточность по сравнению с эталонным методом «частица-частица» компенсируется справочным коэффициентом для данного диапазона значений расстояния от частицы и дисперсий распределения зарядов в области. Все коэффициенты определяются статистически при моделировании аналогичных систем.

Алгоритм находится на этапе программной реализации.

Литература

1. *Ewald P.* Die berechnung und elektrostatischer gitterpotentiale // *Ann. Phys.* 1921. V. 64. P. 253-287.
2. *Хокни Р., Иствуд Дж.* Численное моделирование методом частиц. – М.: Мир, 1987. – 640 с.
3. *Jernigan J.C., Porter D.H.* A tree code with logarithmic reduction of force terms, hierarchical regularization of all variables, and explicit accuracy controls. – *ApJ*, 1989, v. 71, p. 871-893.