

Progetto VI-2019140

Leopoldo Villoni

January 2025

1 Introduzione

In questo progetto è stato sviluppato un codice di Dinamica Molecolare (DM) in C++ per la simulazione di un sistema, racchiuso in una scatola cubica di volume V costituito da due tipologie di particelle di Lennard-Jones: N_x particelle di massa m_x e N_y particelle di massa $m_y = \xi m_x$ con $\xi > 1$. Le interazioni sono descritte dal potenziale di Lennard-Jones con gli stessi parametri σ e ϵ per entrambe le specie di particelle; il raggio di cutoff r_c è fissato a 2.5σ .

Sono stati implementati due algoritmi d'integrazione delle equazioni del moto: uno **Standard Velocity-Verlet (SVV)** e un **Multiple Time Step Method (MTS)**. Quest'ultimo usa un passo temporale di integrazione differenziato per le particelle più pesanti ($\Delta t = \sqrt{\xi} \delta t$) consentendo di integrare in maniera più efficiente i gradi di libertà meno rapidi.

L'obiettivo del progetto è confrontare le prestazioni e l'accuratezza del calcolo dell'energia dei due algoritmi per diverse proporzioni tra N_x e N_y .

2 Algoritmi di Integrazione

2.1 Standard Velocity-Verlet

Lo **Standard Velocity Verlet (SVV)** si ottiene separando e approssimando l'evolutore temporale nel seguente modo:

$$\tilde{U}(\Delta t) = e^{iL_p\Delta t/2} e^{iL_q\Delta t} e^{iL_p\Delta t/2}, \quad (1)$$

dove Δt rappresenta lo step temporale di integrazione. L'implementazione nel codice segue i seguenti passaggi:

1. Si calcolano le forze che agiscono sulle particelle all'istante iniziale.
2. Gli impulsi delle particelle vengono evoluti per un intervallo di tempo pari a $\Delta t/2$.
3. Le posizioni delle particelle vengono aggiornate per un intervallo di tempo Δt .
4. Le forze vengono ricalcolate, e gli impulsi vengono nuovamente evoluti per un intervallo di tempo $\Delta t/2$.

È importante notare che lo step temporale Δt è uniforme per tutte le particelle.

2.2 Multiple Time Step

Nel caso in cui un sistema sia composto da due specie di particelle diverse, ci si aspetta che le equazioni del moto per i diversi tipi di particelle presentino tempi caratteristici differenti. In particolare, quando le particelle differiscono solamente per la massa, quelle più massive avranno tempi scala maggiori rispetto a quelle più leggere.

L'idea alla base del metodo **Multiple Time Step (MTS)** è cercare di evolvere il sistema utilizzando due intervalli di tempo distinti, indicati con Δt e δt . Per caratterizzare il rapporto tra i due tempi scala, si introduce il parametro $M = \sqrt{\frac{m_y}{m_x}}$, dove m_x ed m_y rappresentano rispettivamente le masse delle particelle di tipo x ed y .

$$\tilde{U}_{MTS}(\Delta t) = (e^{iL_x \delta t})^{M/2} e^{iL_y \Delta t} (e^{iL_x \delta t})^{M/2}, \quad (2)$$

L'evolutore temporale per le singole particelle viene implementato con un **Velocity Verlet**.

3 Consistenza del codice

Prima di effettuare ulteriori analisi, è stata verificata la validità del codice implementato. Il metodo Velocity Verlet, alla base di entrambi gli algoritmi, è un algoritmo del terzo ordine nella stima degli impulsi e delle posizioni, e del secondo ordine nel calcolo dell'energia.

Per verificare questa proprietà, il codice è stato eseguito per diversi intervalli temporali Δt utilizzando sia il metodo SVV che il metodo MTS. È stata definita la variazione media di energia rispetto all'istante iniziale come: $\sigma_E = \langle E(t) - E_0 \rangle$, dove $\langle \cdot \rangle$ rappresenta una media temporale, calcolata come la media delle variazioni energetiche su tutti gli step temporali. La variazione media σ_E è stata quindi plottata in funzione di Δt . Teoricamente, ci si aspetta che tale variazione mostri un andamento quadratico rispetto a Δt , ossia $\sigma_E = \alpha \Delta t^2$. I dati sono stati linearizzati e sottoposti a un fit lineare della forma $Y = aX + b$. ci si attende che il valore del parametro a risulti compatibile con il valore atteso pari a 2. I risultati sono riportati di seguito.

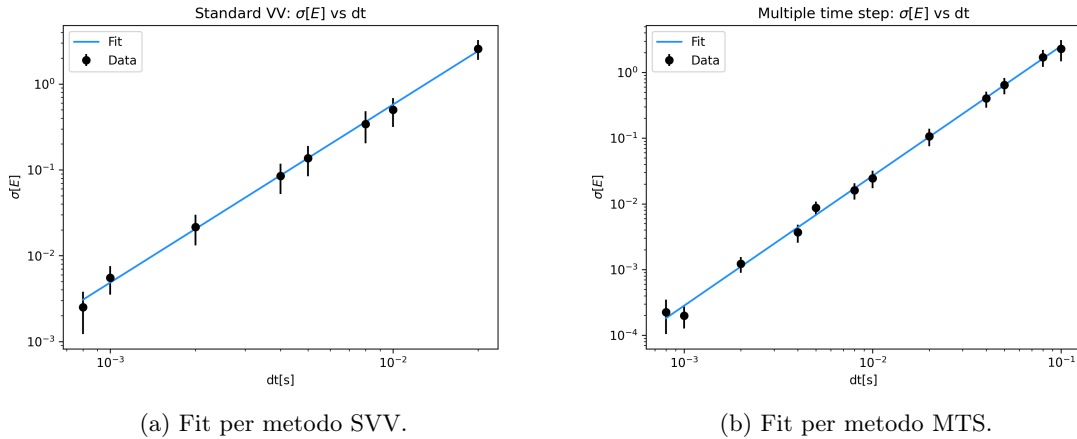


Figura 1: Fit lineari per estrapolare andamento di σ_E vs Δt .

Parametro	Valore
ρ	0.5
T	2
σ	1
ϵ	1
r_c	2.5
ΔT	2
r	0.2
m_x	1
m_y	100

(a) Parametri dei fit.

MD	
a	2.073 ± 0.118
b	3.91 ± 0.28
Chi squared	0.51
Reduced chi squared	0.085
Compatibilità*	0.62
MTS	
a	1.976 ± 0.061
b	2.38 ± 0.12
Chi squared	2.81
Reduced chi squared	0.281
Compatibilità*	0.39

(b) Risultati dei fit con SVV e MTS.

* La compatibilità si riferisce al confronto con il valore atteso del parametro a .

Tabella 1: Parametri e risultati dei fit.

Poiché per entrambi i casi si riscontra un'ottima compatibilità tra il valore del parametro a ottenuto dal fit e il valore aspettato possiamo concludere che il codice funziona correttamente.

4 Speed-up ed Errore sull'Energia

L'obiettivo di questa analisi è confrontare in termini di efficienza computazionale e di accuratezza nel calcolo dell'energia i metodi MTS con step temporale pari a Δt e SVV con step temporale pari a $\delta t = \Delta t/M$. Per fare ciò, possiamo eseguire una stima approssimativa dello **speed-up** η calcolando il numero di operazioni più complesse (ovvero il calcolo delle forze) richiesto dai due metodi. Nel processo di stima, teniamo conto che, per ottimizzare il numero di operazioni, il calcolo delle forze sfrutta il principio di azione e reazione.

Nel metodo SVV, il numero di operazioni eseguite per ogni intervallo temporale Δt è proporzionale a $\frac{M}{2}(N_x + N_y)^2$. Invece per l'algoritmo MTS è proporzionale a $M[N_x N_y + \frac{N_x^2}{2}] + \frac{N_y^2}{2}$.

Definendo il rapporto tra il numero di particelle di tipo y e x come $x \equiv \frac{N_y}{N_x}$, otteniamo

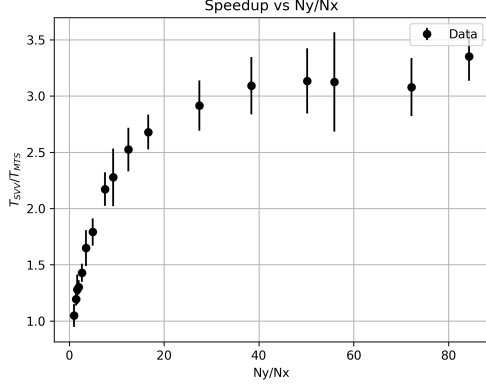
$$\eta(x) = M \frac{(1+x)^2}{M + 2Mx + x^2}. \quad (3)$$

Da questa relazione si osserva che lo speed-up aumenta con il rapporto x tra le particelle di tipo y e di tipo x . In particolare, nella stima ideale considerata (trascurando le operazioni meno complesse), si verifica che: $\eta \rightarrow M$ per $x \gg 1$.

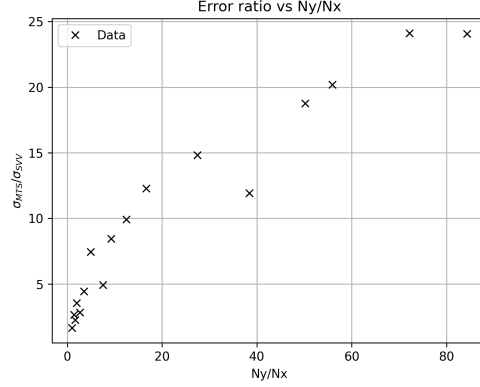
Per verificare queste previsioni, sono state eseguite simulazioni ripetute variando il rapporto tra le particelle, utilizzando sia il metodo SVV che MTS. L'efficienza computazionale è stata calcolata come il rapporto tra i tempi di esecuzione dei due codici. Le simulazioni ripetute sono state necessarie per ridurre l'incertezza dovuta alla variabilità nei tempi di esecuzione, che possono essere influenzati da processi non controllabili eseguiti in contemporanea dal computer.

Per entrambi i metodi, è stata calcolata la variazione dell'energia, seguendo la stessa metodologia descritta nel paragrafo precedente (3). Successivamente, è stato plottato il rapporto tra le va-

riazioni energetiche per analizzare come l'errore sul calcolo dell'energia si modifica al variare del rapporto $x = N_y/N_x$.



(a) Rapporto tra la durata di esecuzione dei due metodi.



(b) Rapporto degli errori sull'energia $\frac{\sigma_{MTS}}{\sigma_{SVV}}$.

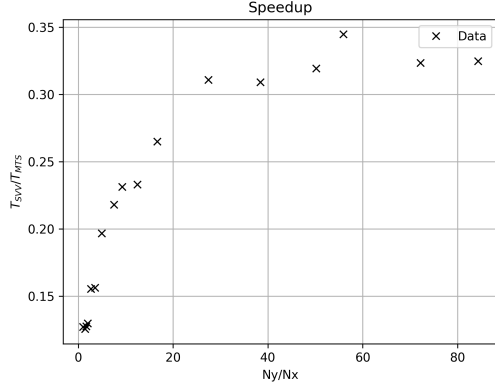
Figura 2: Speed-up e errore sull'energia.

Dal grafico 2a si osserva che, come previsto, lo speed-up cresce con l'aumentare del rapporto tra N_y ed N_x . Tuttavia, il valore limite raggiunto risulta inferiore rispetto a quello teoricamente atteso (ossia M). Questo scostamento è dovuto al fatto che la stima effettuata è ideale e non tiene conto dei calcoli di complessità inferiore, che influenzano comunque il tempo di esecuzione complessivo.

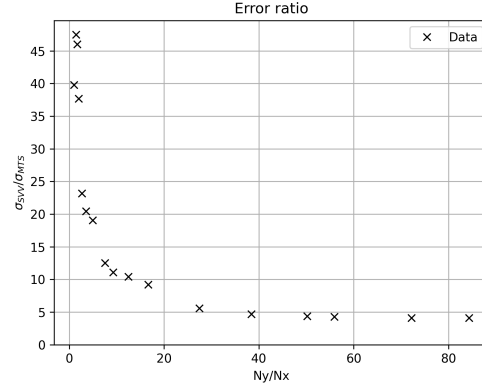
Nonostante ciò, il metodo MTS offre un notevole incremento nella velocità di esecuzione del codice. Questo vantaggio si rivela particolarmente significativo nei sistemi in cui il numero di particelle massive è molto maggiore rispetto a quello delle particelle leggere. Tuttavia, il prezzo da pagare per questo aumento di efficienza è un incremento dell'errore nel calcolo dell'energia. Questo aspetto è evidenziato nel grafico 2b, dove è riportato il rapporto tra l'errore sull'energia ottenuto con il metodo MTS (σ_{MTS}) e quello calcolato con il metodo SVV (σ_{SVV}).

In seguito è stato eseguito il confronto tra il metodo SVV e MTS, entrambi con uno step temporale pari a Δt .

Dai grafici 3 si osserva che, per $N_y \gg N_x$, a fronte di un incremento di circa tre volte nel tempo di esecuzione del codice, si ottiene un'accuratezza computazionale migliorata di circa cinque volte. Questo risultato evidenzia come il metodo MTS offra un buon compromesso tra efficienza computazionale e accuratezza nel calcolo dell'energia, specialmente in sistemi caratterizzati da un rapporto elevato tra il numero di particelle massive e leggere ($N_y \gg N_x$).



(a) Rapporto tra la durata di esecuzione dei due metodi.



(b) Rapporto degli errori sull'energia $\frac{\sigma_{SVV}}{\sigma_{MTS}}$.

Figura 3: Speed-up e errore sull'energia.

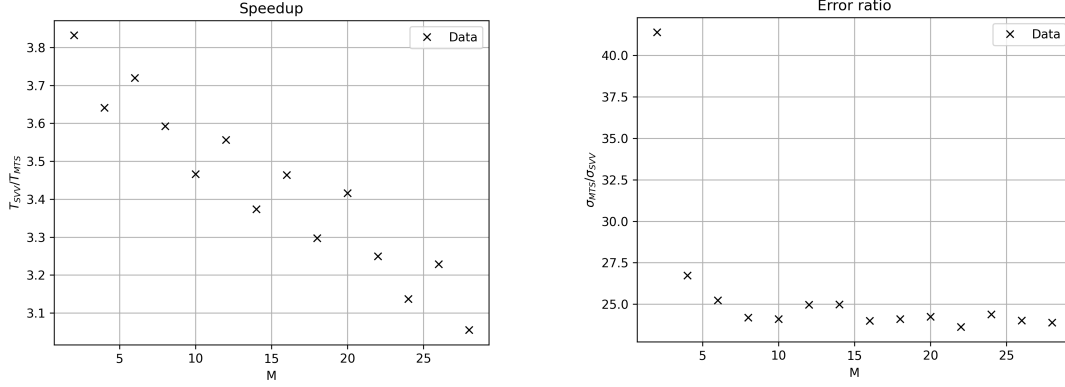
Parametro	Valore
ρ	0.5
T	2
σ	1
ϵ	1
r_c	2.5
m_x	1
m_y	100
M	10
ΔT	2
Δt	0.01

Tabella 2: Parametri utilizzati nelle simulazioni in questo paragrafo.

5 Calcolo M ottimale

Il valore di M , calcolato come rapporto tra le masse delle particelle, è stato introdotto nell'equazione (2) in quanto, in questo caso, il rapporto tra i tempi caratteristici delle equazioni del moto delle particelle dipende esclusivamente dalla loro massa. Questa scelta appare quindi una stima ragionevole. Tuttavia, non vi è alcuna garanzia che tale valore sia ottimale per ottenere sia un buon speed-up sia una conservazione accurata dell'energia. L'obiettivo di questo paragrafo è quindi verificare se il valore di M , determinato come rapporto tra le masse, sia effettivamente adeguato, o in alternativa, identificare un valore ottimale di M che bilanci al meglio efficienza e conservazione dell'energia.

Quindi è stato ridefinito $M = \sqrt{\frac{m_y}{m_x}} \epsilon$ e, fissato il valore di δt_{SVV} e Δt_{MTS} , è stato calcolato lo speed-up e l'error ratio $\frac{\sigma_{MTS}}{\sigma_{SVV}}$ al variare di ϵ .



(a) Speed-up al variare di M .

(b) Error ratio $\frac{\sigma_{MTS}}{\sigma_{SVV}}$ al variare di M .

Figura 4: Speed-up e errore sull'energia al variare di M .

Dal grafico 4a si osserva che, all'aumentare di M , lo speed-up diminuisce. Questo accade perché un valore maggiore di M implica un incremento del numero di operazioni eseguite. Invece, come mostrato nel grafico 4b, l'accuratezza nel calcolo dell'energia migliora con l'aumento di M . Tuttavia, mentre lo speed-up continua a decrescere, l'accuratezza si stabilizza oltre un valore di $M \simeq 10 \equiv M^*$, corrispondente proprio al valore stimato inizialmente sulla base del rapporto tra le masse delle particelle. Questo risultato conferma la correttezza dell'intuizione iniziale per la stima di M . Infatti, un ulteriore incremento di M oltre M^* è controproducente: l'efficienza del metodo peggiora senza apportare alcun miglioramento nell'accuratezza del calcolo dell'energia.

Parametro	Valore
ρ	0.5
T	2
σ	1
ϵ	1
r_c	2.5
m_x	1
m_y	100
r	0.013
ΔT	2
Δt	0.01

Tabella 3: Parametri utilizzati nelle simulazioni in questo paragrafo.

6 Conclusioni

Alla luce dei risultati ottenuti, il metodo Multiple Time Step (MTS) si dimostra particolarmente efficiente per simulare sistemi in cui il numero di particelle massive è significativamente maggiore rispetto al numero di particelle leggere. Questo vantaggio deriva dalla capacità del metodo di utilizzare due scale temporali differenti, riducendo il numero di calcoli complessi per le particelle massive, senza compromettere eccessivamente l'accuratezza del risultato complessivo. Un aspetto cruciale emerso dall'analisi riguarda il parametro M , che regola il rapporto tra le scale temporali utilizzate per le due specie di particelle. I risultati mostrano che il valore ottimale di M corrisponde alla radice del rapporto tra le masse delle due specie di particelle. Questo valore bilancia in modo efficace l'efficienza computazionale con la conservazione dell'energia.

In conclusione, il metodo MTS rappresenta una soluzione potente ed efficace per simulazioni di sistemi complessi con rapporti di massa significativamente diversi, fornendo un buon compromesso tra efficienza e accuratezza.