

Реализация улучшенной QTRIE- модели для молекулярной динамики

Новосибирский государственный университет
Факультет информационных технологий
Кафедра общей информатики

Автор: Андрей Васенин

Научный руководитель: к. ф.-м. н. Фомин Э.С.

Введение

Межмолекулярное взаимодействие определяет:

- Существование жидкостей и молекулярных кристаллов
- Отличие реальных газов от идеальных
- Наличие определенных физических свойств

Цель:

Разработать модель для быстрого воспроизведения молекулярного электростатического потенциала с требуемой точностью для молекулярной динамики.

Характеристики методов

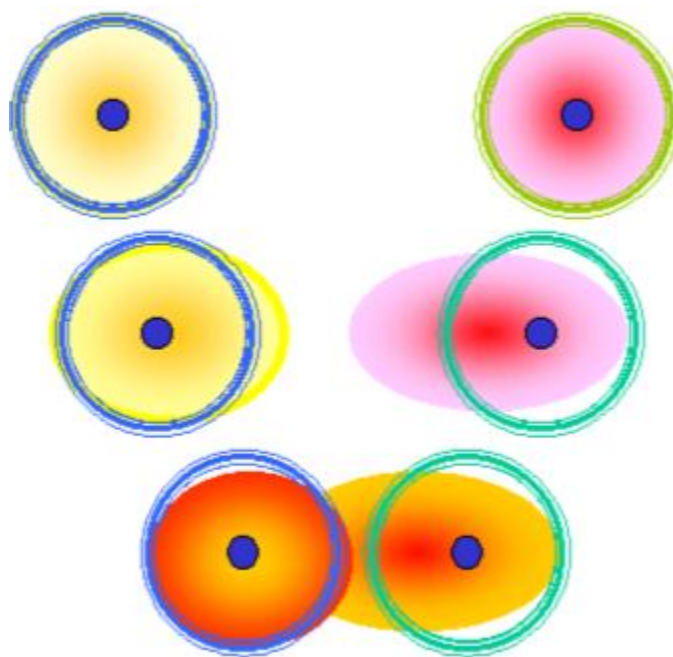
Основные характеристики методов:

- Точность результатов
- Вычислительная сложность

Топологические методы

Основан на принципе
выравнивания
электроотрицательностей
атомов при образовании
молекулы.

Необходима информация о
топологии и молекулярной
связности.



Топологические методы. QEq

Основа – уравнение энергии системы самого общего вида:

$$E(q) = \sum_{i=1}^n \left(\chi_i q_i + \frac{1}{2} \eta_i (q_n)^2 \right) + \sum_{i < j} q_i q_j J_{ij}$$
$$\sum q_i = 0$$

Топологические методы. QTPIE

Корректно обрабатывает взаимодействие атомов на больших расстояниях

$$E(q) = \sum_{i,j} \chi_i f_{ji} p_{ji} + \sum_{i,j,k,l} p_{ki} p_{li} J_{ij}$$

$$\sum_j p_{ij} = q_i$$

$$\sum_i q_i = 0$$

Новый метод

Что мы сделали:

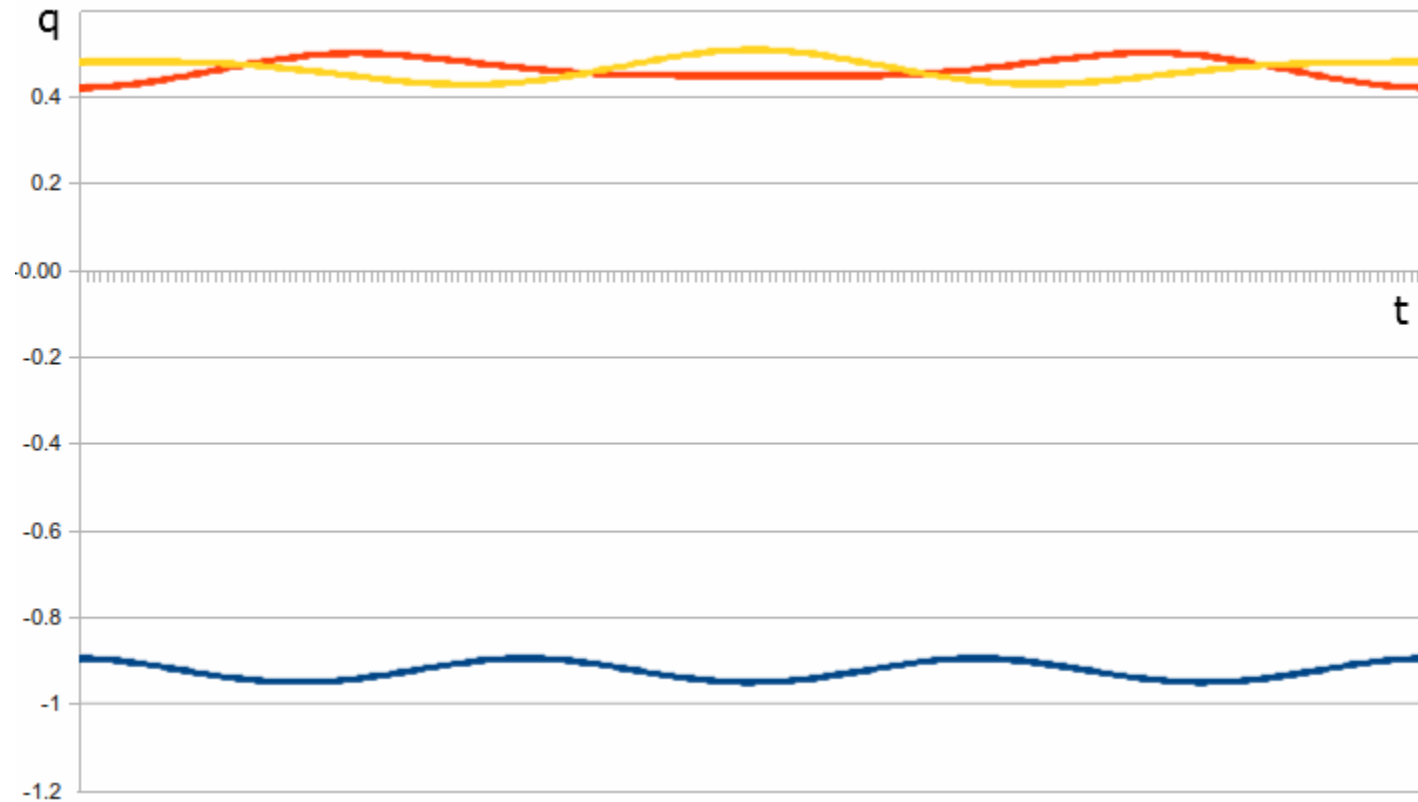
- Включили динамику движения заряда

$$H(q, p) = T(p_{ij}) + V(q_i)$$

p_{ij} — реальные токи

- Ввели ограничения на модель, сравнивали количество переменных q и p
- Построили лагранжиан и нашли канонические переменные
- Построили гамильтониан и вывели уравнение движения

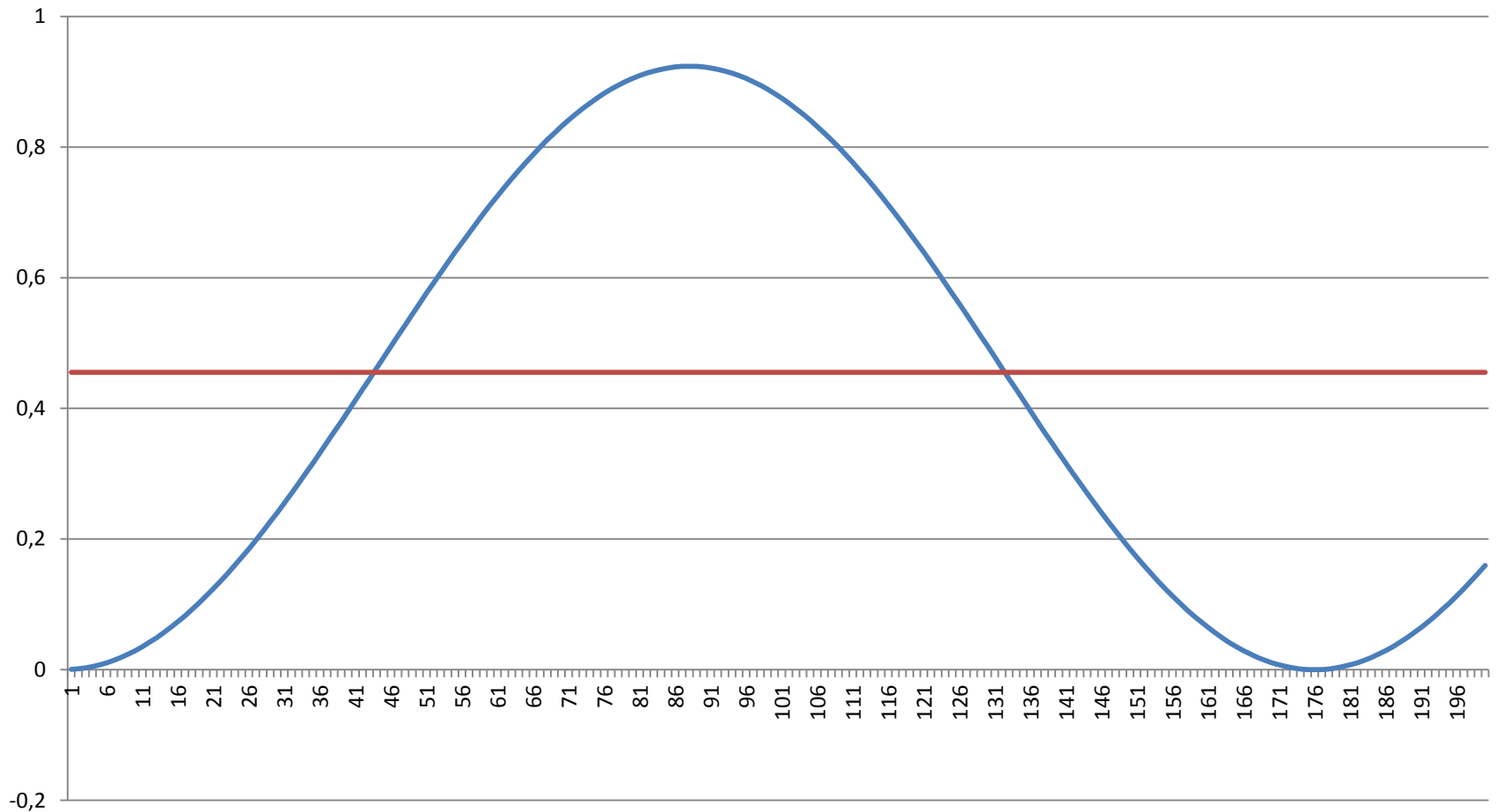
Результаты. H2O



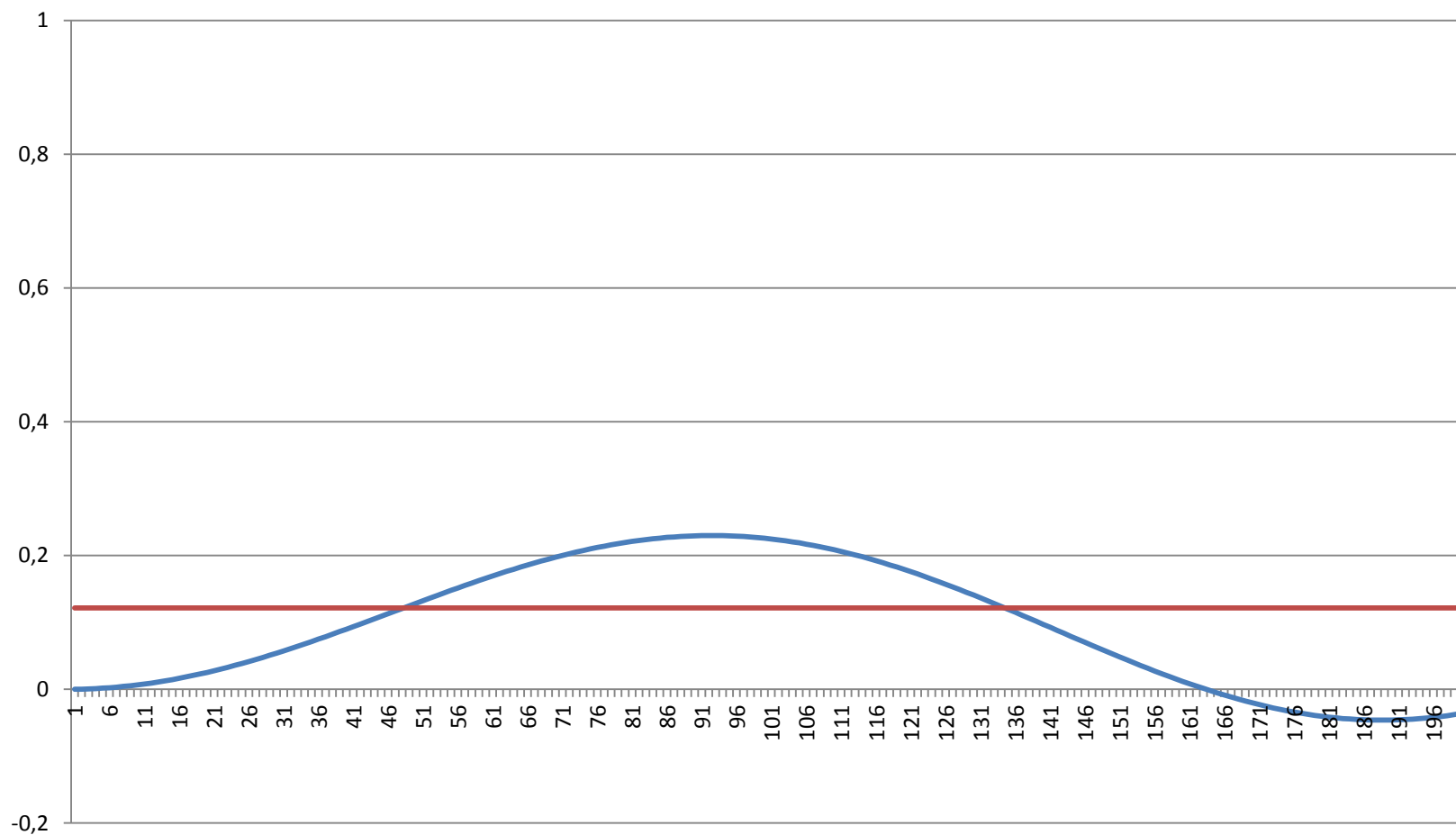
Преимущества нового метода

- Является расширением QTRIE-модели
- Имеет линейную сложность итерации
- Учитывает взаимодействие на больших расстояниях
- Вводит динамику движения заряда по молекулярной системе
- Позволяет получить общий гамильтониан системы, который включает движение атомов

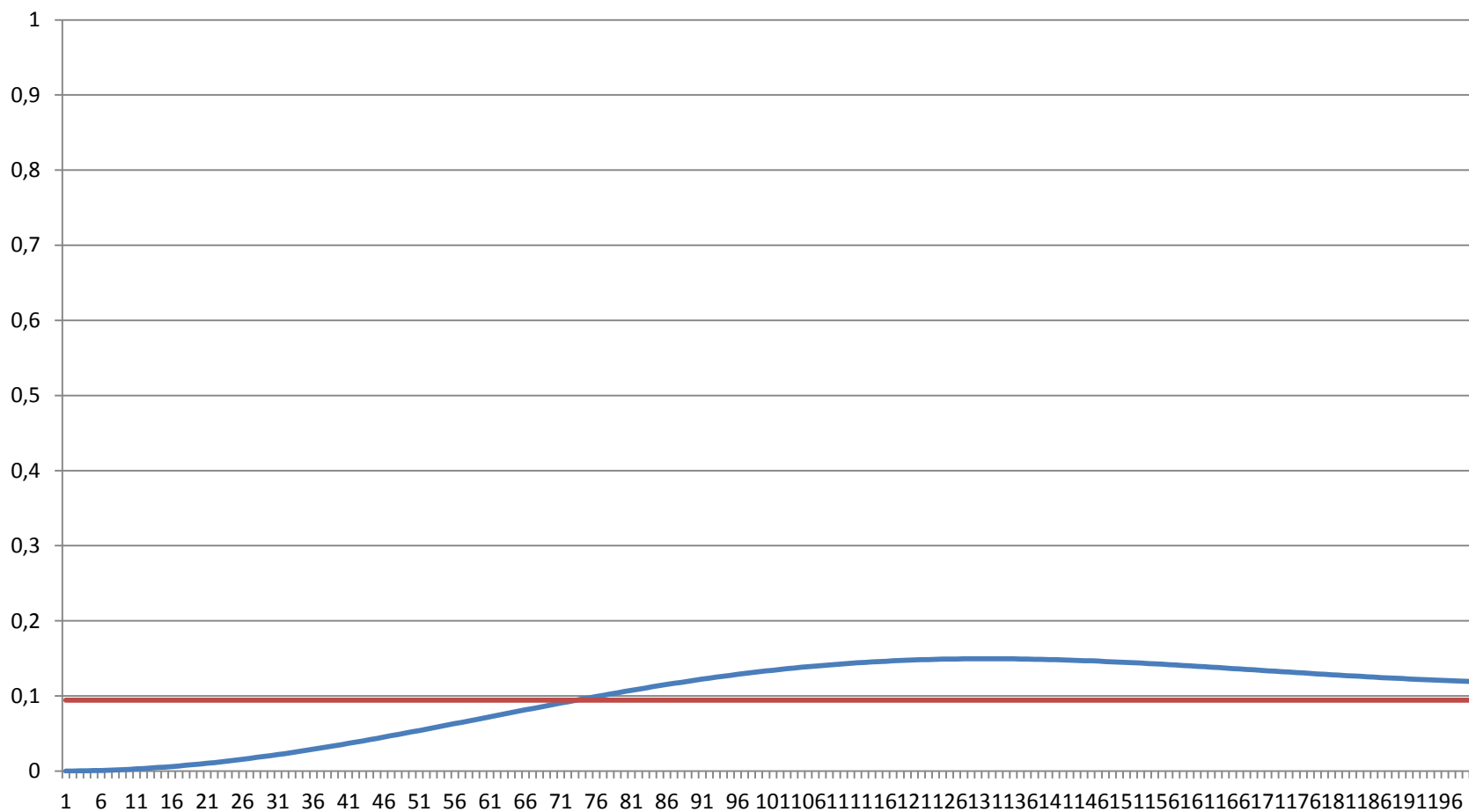
Результаты. 1,83А



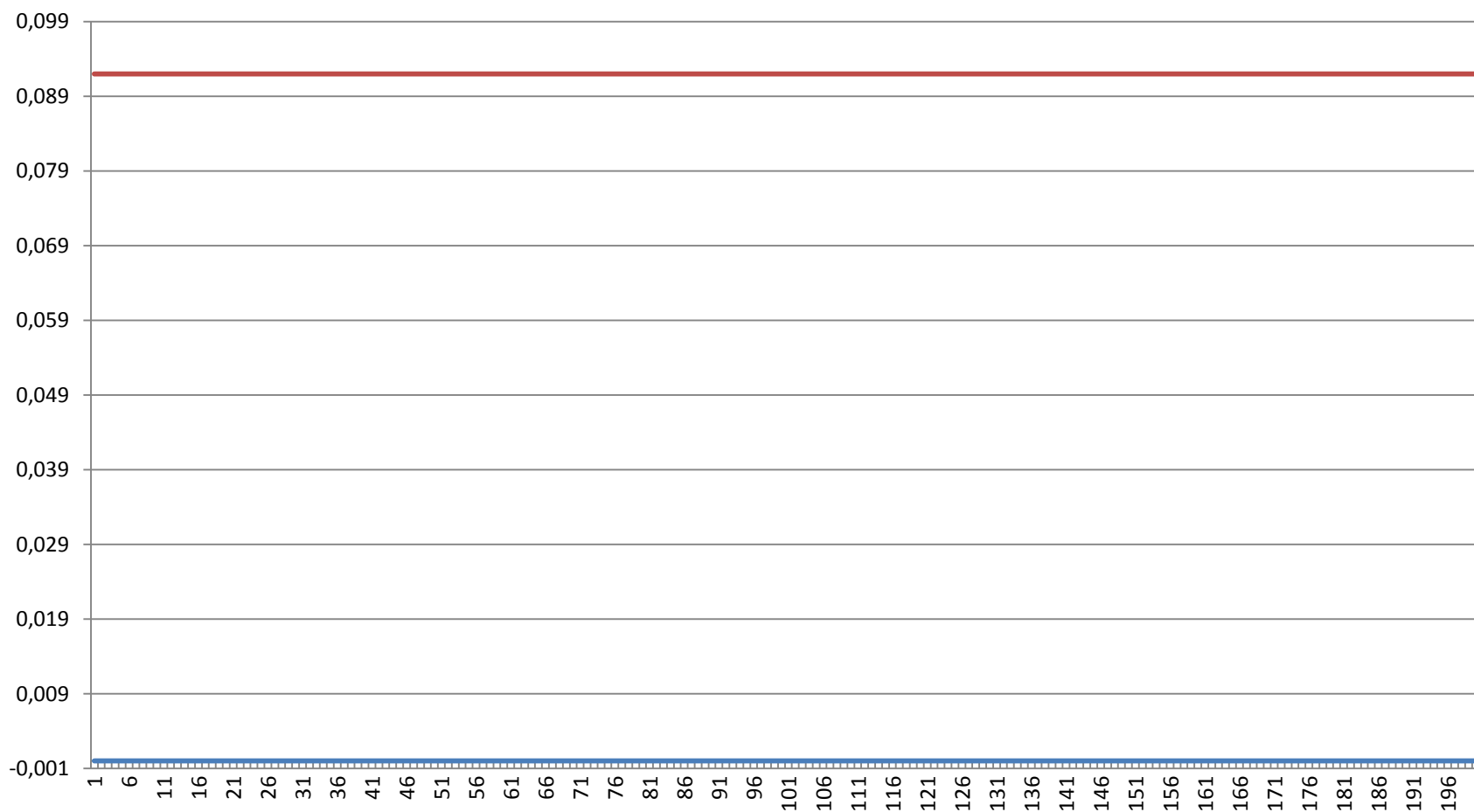
Результаты. 16А



Результаты. 30А



Результаты. 100А



Вопросы?
