Skaičiavimo metodų ir molekulinio modeliavimo elementai

Motyvacija

- **Skaičiavimo metodai taikomi fizikoje, chemijoje, kituose moksluose;**
- **„Skaitinis eksperimentas“ leidžia sumažinti kaštus palyginus su realiuoju eksperimentu;**
- **Kartais skaitinis modeliavimas yra „vienintelė išeitis“, nes realusis eksperimentas nėra įmanomas**
- **...**

Skyriai

- **Tiesinių lygčių sistemų sprendimas;**
- **Matricų tikrinių reikšmių ir vektorių radimas;**
- **Netiesinių lygčių ar l. sistemų sprendimas;**
- **Skaitinis integravimas;**
- **Dif. lygčių ir sistemų sprendimas;**
- **Aproksimacijos uždaviniai;**
- **Interpoliacijos uždaviniai;**
- **Optimizavimo užsdaviniai;**
- **...**

Pavyzdys

- **Kaip rasti sqrt(2), jei galima naudoti tik +,-,*,/ ?**
- **Algoritmas (Babilono) :**

```
eps = 0.0000000000001 // :)
x = 2
While ( |  x * x – 2 | > eps )
        x = (x + 2 / x) / 2
```

Pratimas prie lentos

Raskite sqrt(2) su tikslumu 0.01

Bendros sąvokos

- **Diskretizacija: sk. metoduose vietoje tolydžių funkcijų naudojami jų reikšmės tam tikruose taškuose. Toks pavertimas ir vadinasi diskretizavimu;**
- **Apvalinimo klaidos – tai klaidos, kurios atsiranda dėl to, kad realieji skaičiai kompiuteryje turi baigtinį skaičių bitų;**
- **Metodo klaidos – tai klaidos, kurios atsiranda dažniausiai dėl diskretizacijos**

Bendros sąvokos

- **Stabilumas. Tai skaičiavimo metodo savybė „nedidinti“ paklaidos**
- **Ši savybė priklauso nuo konteksto**
- **Pavyzdys:**
  - Herono formulė: trikampio plotą galima skaičiuoti pagal formule sqrt(p*(p-a)*(p-b)*(p-c)), kurioje a,b,c – kraštinės, o p yra (a+b+c)/2
    - Kai trikampyje yra labai mažas kampas, tai šios formulės tikslumas tampa labai prastas (išbandykite tai: parašykite atitinkamą algoritmą).

...tęsinys

Stabili formulė turi atrodyti taip:

$$\frac{1}{4}\sqrt{(a+(b+c))(c-(a-b))(c+(a-b))(a+(b-c))}$$

Skliaustai svarbūs

Pastaba. Svarbu surikiuoti kraštines: $a \geq b \geq c$

Kai kurie skaičiavimo metodų skyreliai

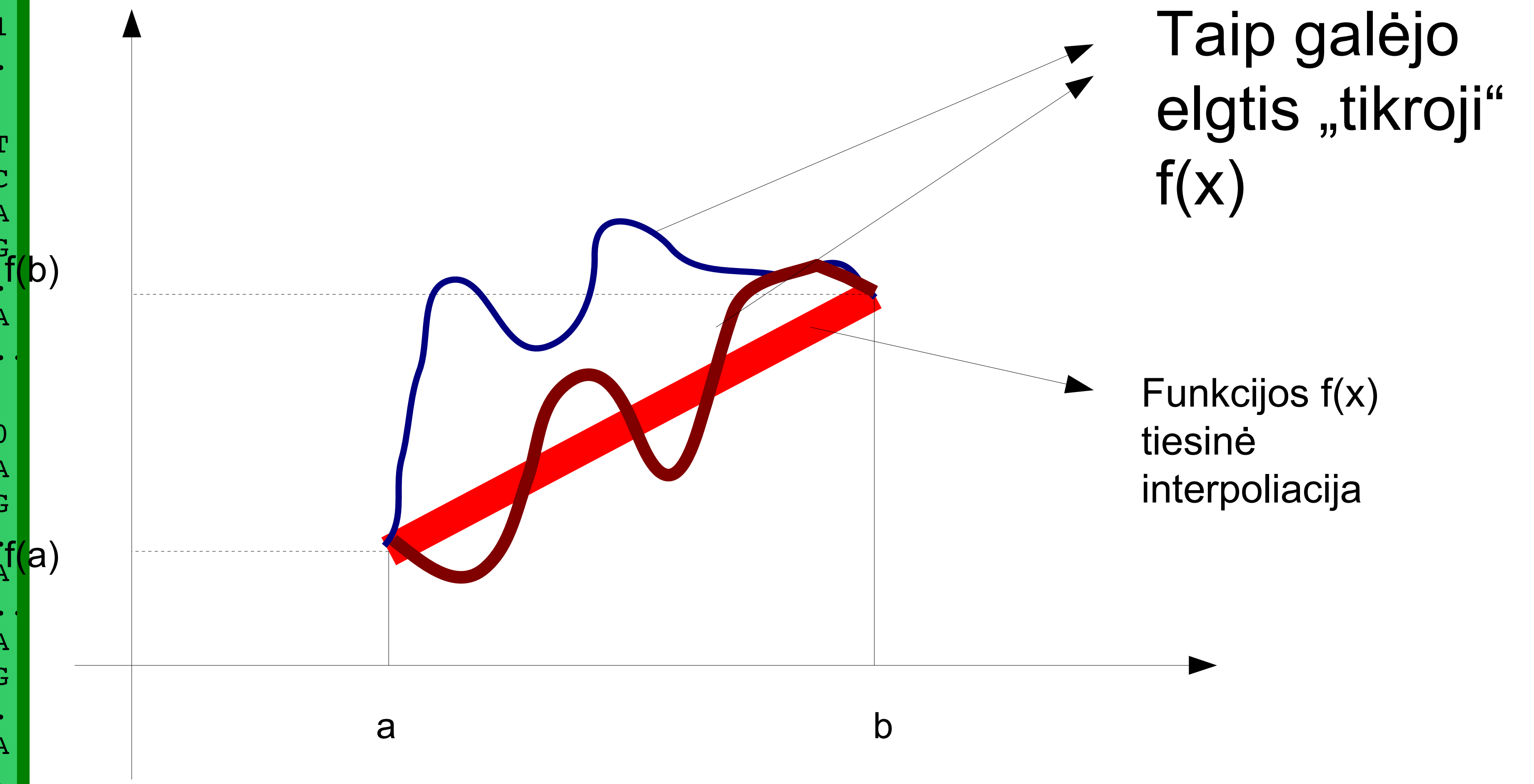
Funkcijų interpoliacija

- **Bendras uždavinys: duotos nežinomos funkcijos f(x) reikšmės iš eilės einančiuose taškuose {x1,x2,...xN}, t.y., turime aibę {f(x1),f(x2),...,f(xN)}. Reikia mokėti apskaičiuoti funkcijos reikšmes „tarpiniuose“ taškuose, pavyzdžiui, taške (x1+x2)/2**

Pavyzdys

- **Tiesinė interpoliacija:**
  - Duotos funkcijos reikšmės taškuose a ir b; reikia „skaičiuoti“ reikšmes visuose [a,b] taškuose.
  - Paprasčiausias būdas: tegul $\Delta = b - a$
    - $f(x) \sim (b - x) * f(a) / \Delta + (x - a) * f(b) / \Delta$;
  - Tai ir yra tiesinė interpoliacija

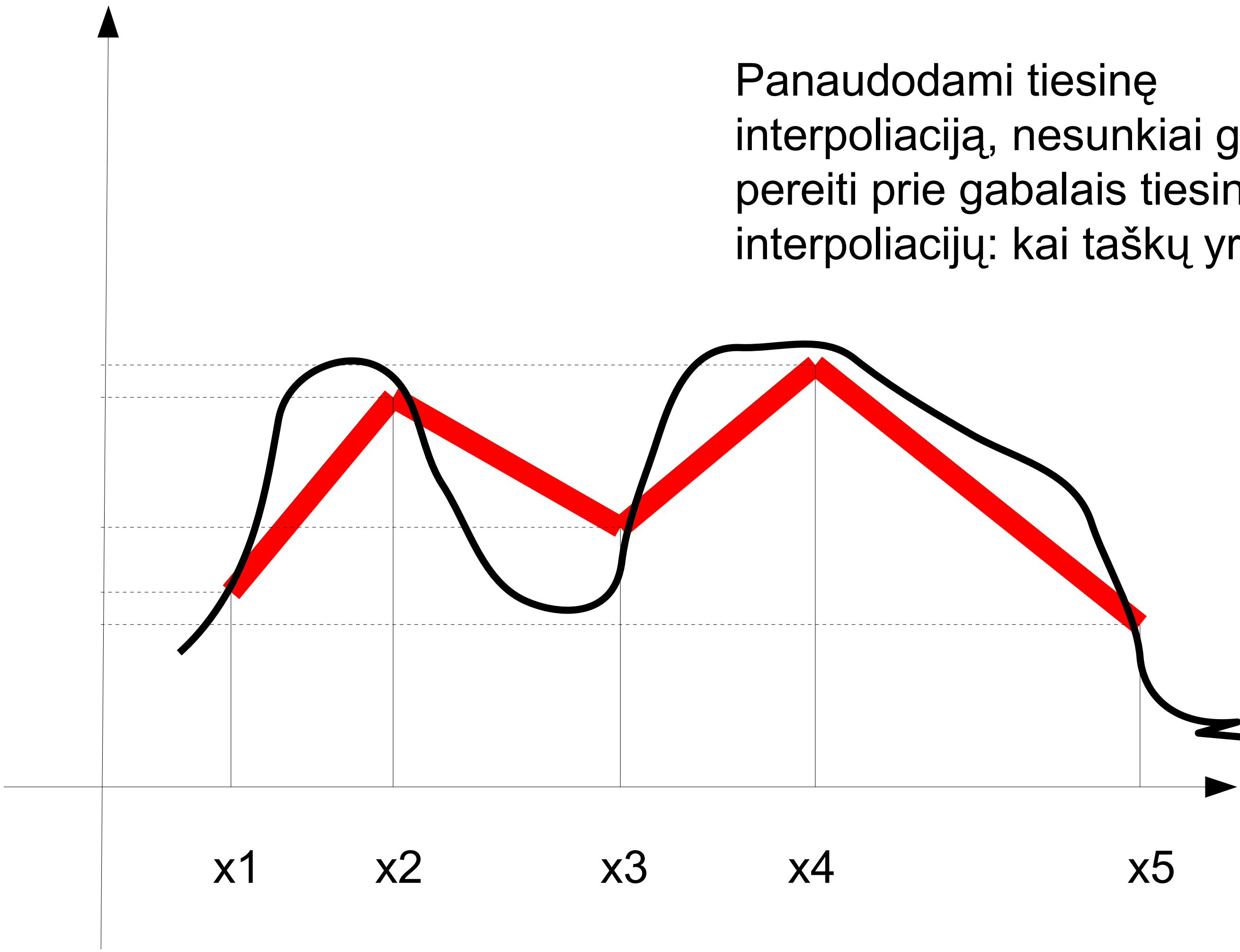
...tęsinys



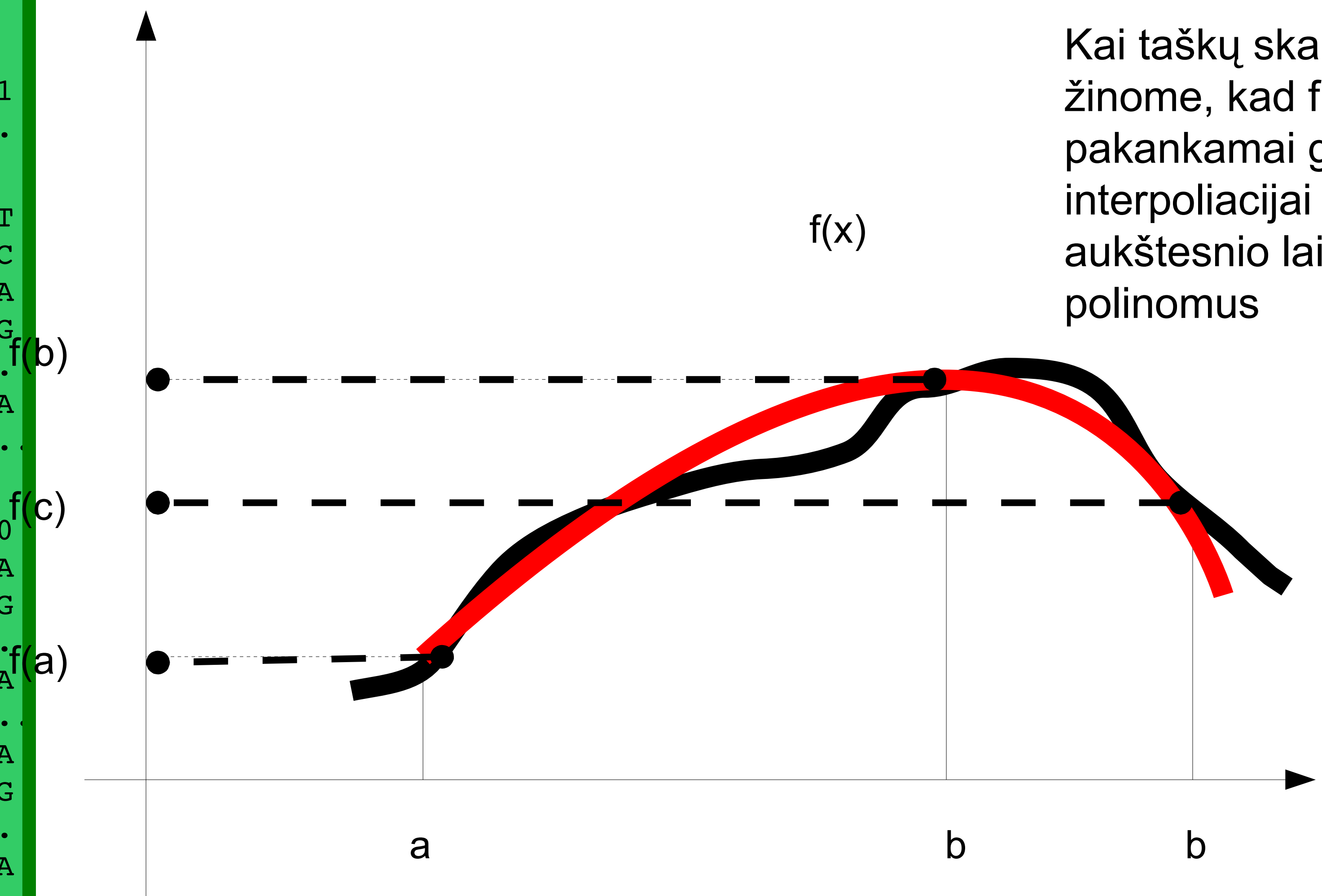
f(b)
f(a)
a
b
Taip galėjo elgtis „tikroji“ f(x)
Funkcijos f(x) tiesinė interpoliacija

Gabalais tiesinė interpoliacija

Panaudodami tiesinę interpoliaciją, nesunkiai galime pereiti prie gabalais tiesinių interpoliacijų: kai taškų yra daug



Jeigu žinotume daugiai reikšmių?



Kai taškų skaičius didelis ir žinome, kad f(x) yra pakankamai glodi, galime interpoliacijai panaudoti ir aukštesnio laipsnio polinomus

...tęsinys

- **Turime 3 taškus: (a,f(a)), (b,f(b)), (c,f(c));**
- **Galime sukurti 2 laipsnio daugianarį:**
  - $f(x) \sim f(a)*La(x) + f(b)*Lb(x) + f(c)*Lc(x)$;
  - $La(x) = (x-b)(x-c)/\{(a-b)(a-c)\}$;
  - $Lb(x)= (x-a)(x-c)/\{(b-a)(b-c)\}$;
  - $Lc(x)= (x-a)(x-b)/\{(c-a)(c-b)\}$

...Pavyzdys

- **Turime 3 taškus: (0,0)), (1,1), (2,0);**
- **Tada:**
  - $f(x) \sim f(0)*L0(x) + f(1)*L1(x) + f(2)*L2(x)$;
  - $L0(x) = (x-1)(x-2)/2$; (galėjome ir neskaičiuoti :))
  - $L1(x) = -x(x-2)$;
  - $L2(x) = x(x-1)/2$; (galėjome ir neskaičiuoti :))
- **Gavome: $f(x) \sim -x(x-2)$**

Bendras atvejis

- **Turime taškus (x0,y0),(x1,y1),...,(xk, yk);**
- **Reikia rasti k-tojo laipsnio polinomą, kuris eina per šiuos taškus;**
- **f(x) ~ L0(x)*y0+L1(x)*y1+...+Lk(x)*yk,**
  - L0(x) = (x-x1)(x-x2)...(x-xk) / {(x0-x1)(x0-x2)...(x0-xk)};
  - L1(x)=(x-x0)(x-x2)...(x-xk) / {(x1-x0)(x1-x2)...(x1-xk)}
  - ...

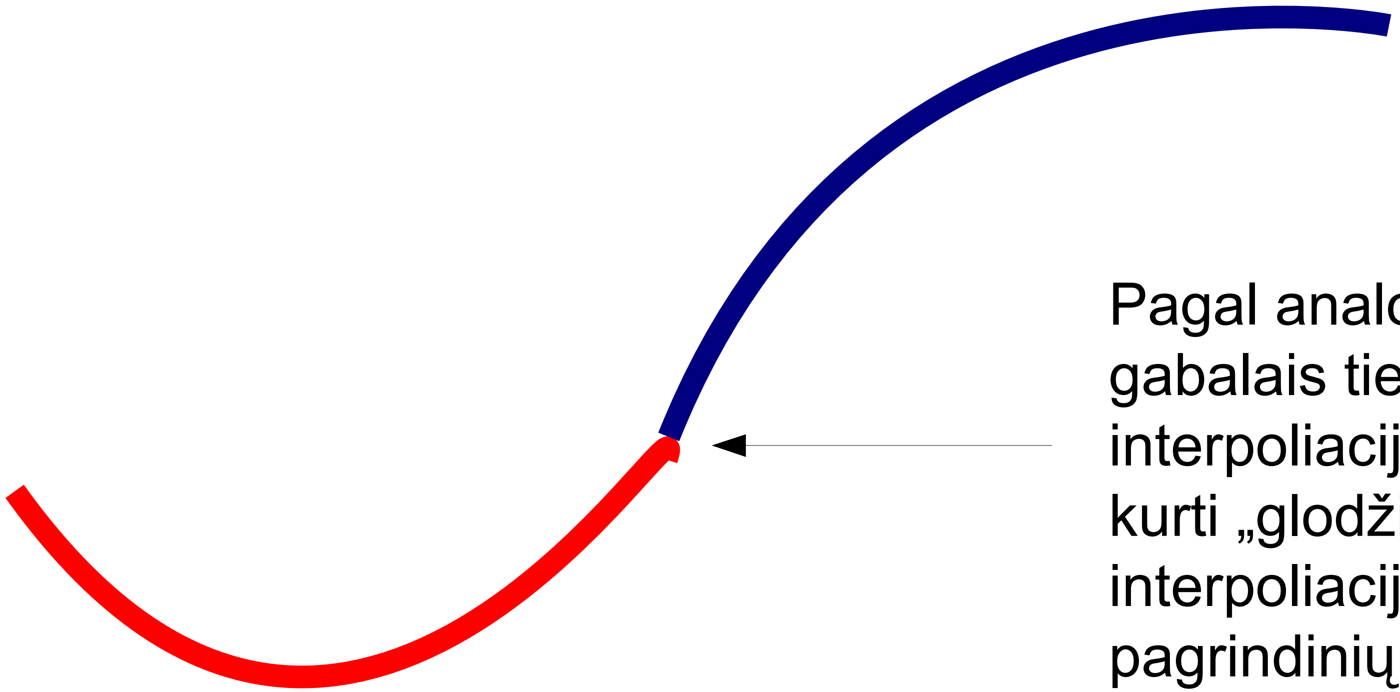
...tęsinys

- **Anksčiau parašytas polinomas vadinamas Lagranžo polinomu**

Pratimas

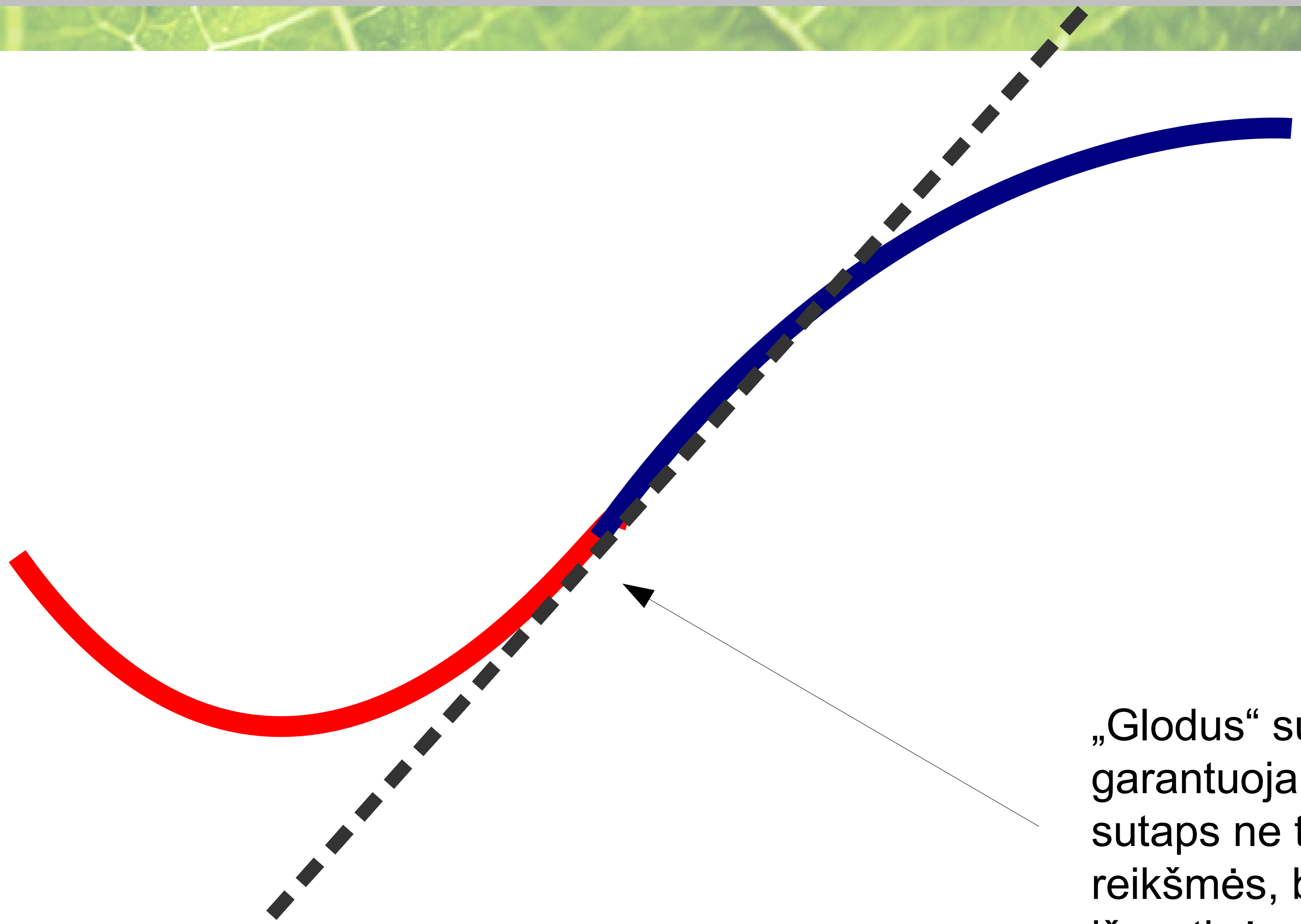
- **Užrašykite 3-o laipsnio Lagranžo polinomą tokiems taškams:**
  - (0,0), (1,2), (2,0), (3,-1)

Gabalais glodi interpoliacija (idėja)



Pagal analogiją su gabalais tiesine interpoliacija galime kurti „glodžias“ interpoliacijas. Viena pagrindinių problemų šioje teorijoje: kaip turi atrodyti „sujungimai“

Gabalais glodi interpoliacija (idėja)



„Glodus“ sujungimas: garantuojama, kad sutaps ne tik funkcijų reikšmės, bet ir išvestinės

Bezier kreivės (splainai)

- **Tiesiniai Bezier splainai.**

Atkarpą P_0P_1 galime įsivaizduoti kaip taškų aibę

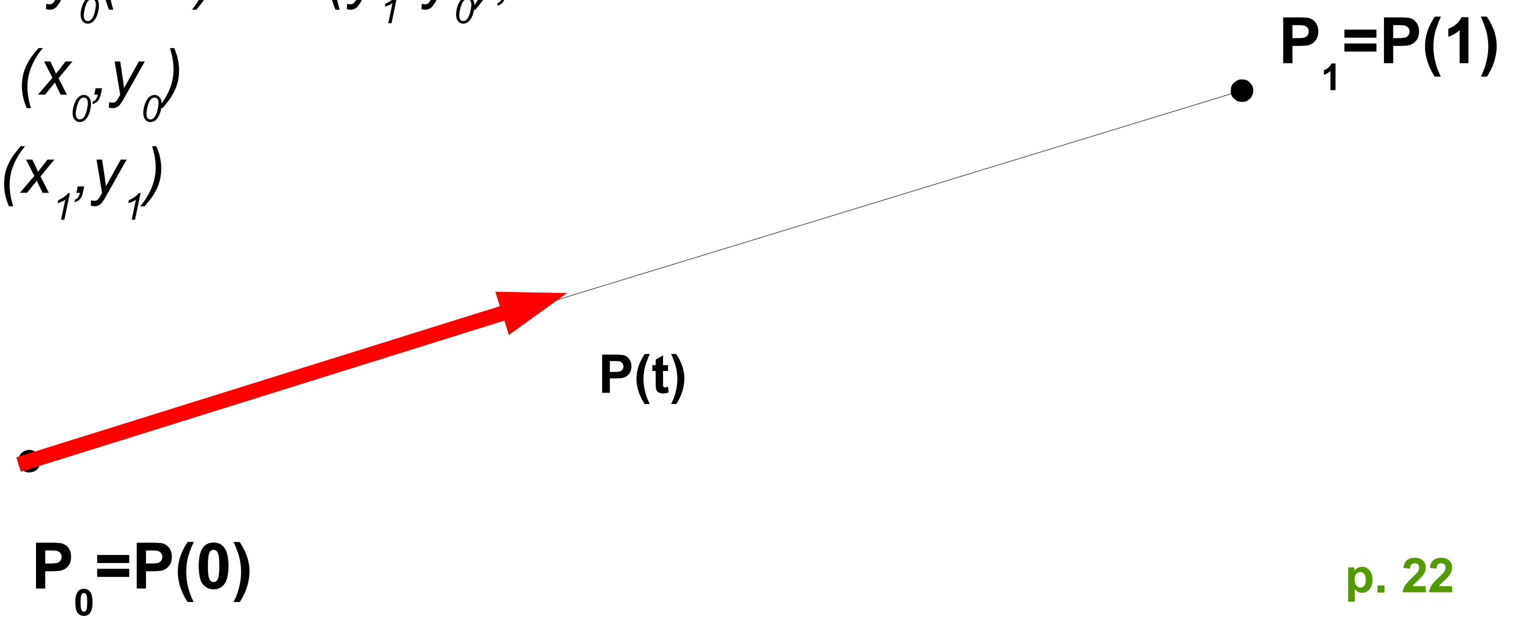
$\{x(t),y(t)\}$, kur

$x(t) = x_0(1-t) + t\ (x_1-x_0)$

$y(t) = y_0(1-t) + t\ (y_1-y_0)$, t keičiasi nuo 0 iki 1

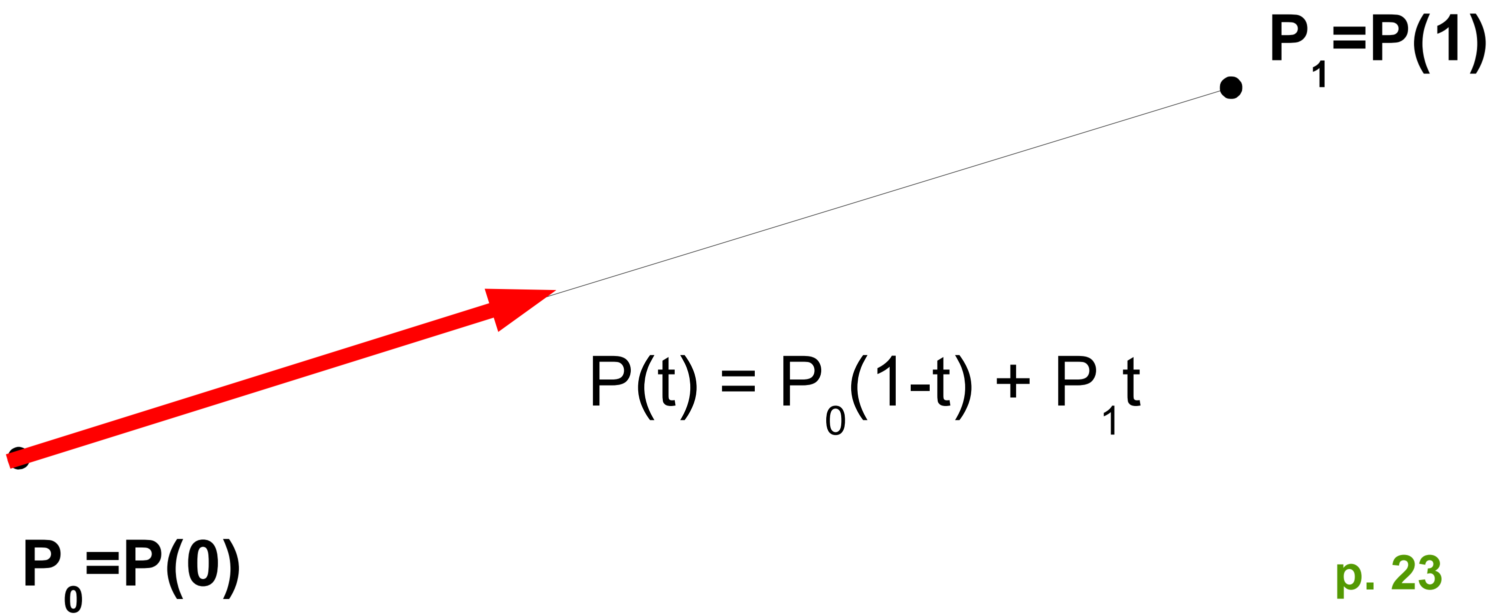
$P_0 = (x_0,y_0)$

$P_1 =(x_1,y_1)$

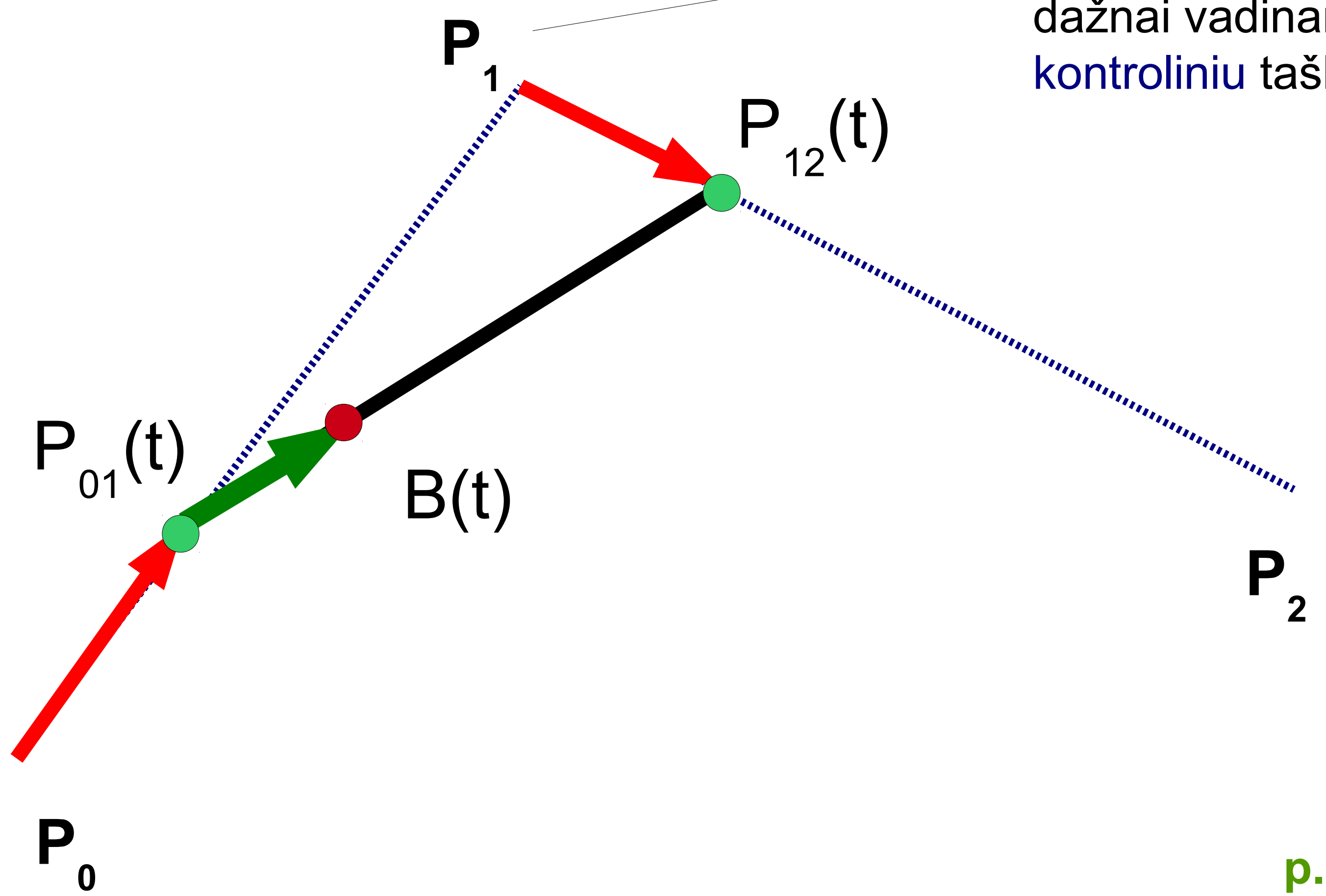


Bezier kreivės (splainai)

- **Tiesiniai Bezier splainai.**



Kvadratiniai Bezier splainai: idėja

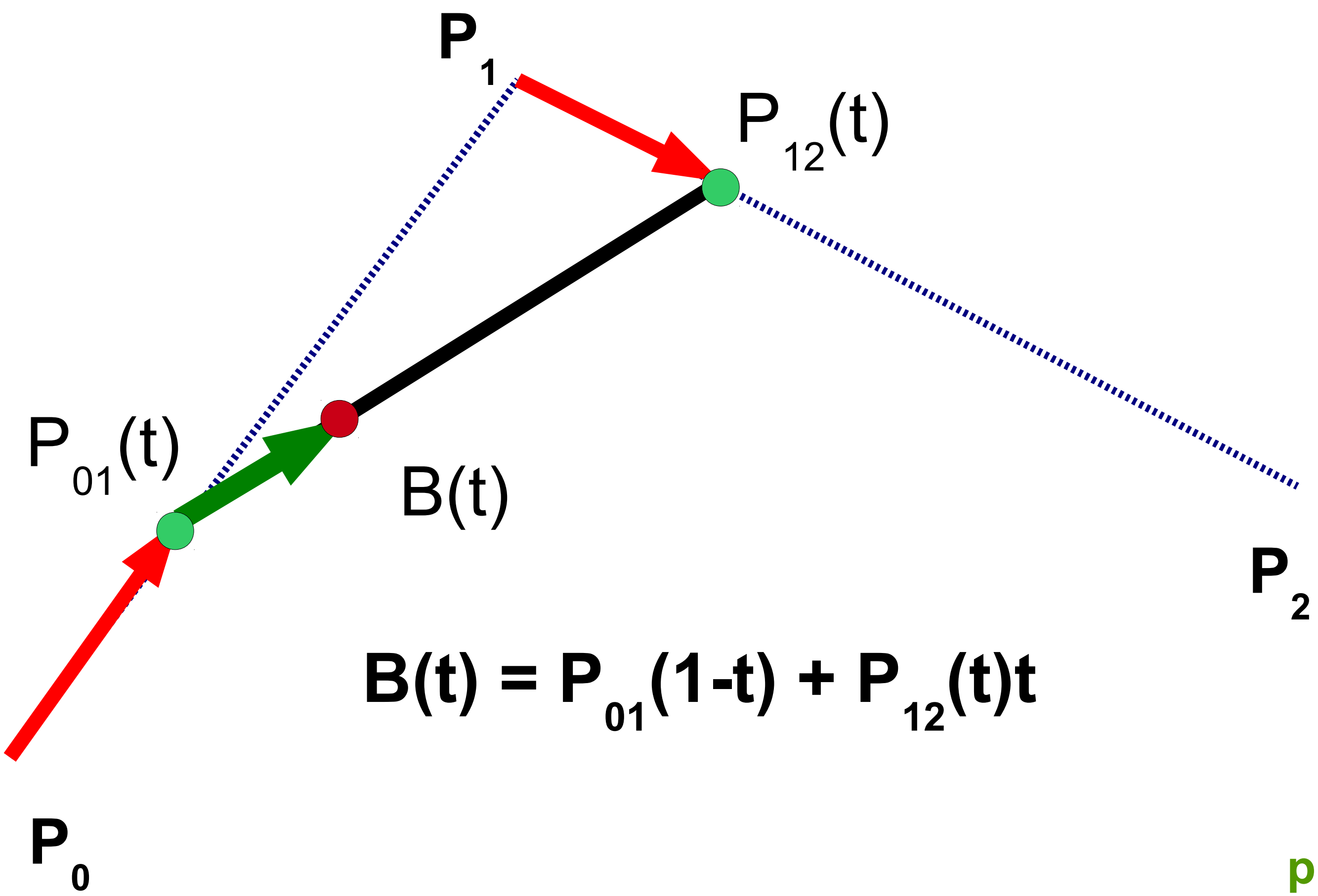


Tarpinis taškas, kuris dažnai vadinamas kontroliniu tašku

Kvadratiniai Bezier splainai: idėja

$$P_{01}(t) = P_0(1-t) + P_1 t$$

$$P_{12}(t) = P_1(1-t) + P_2 t$$



$$B(t) = P_{01}(1-t) + P_{12}(t)t$$

Kvadratiniai Bezier splainai: idėja

$$\mathbf{P_{01}(t) = P_0(1\text{-}t) + P_1 t}$$

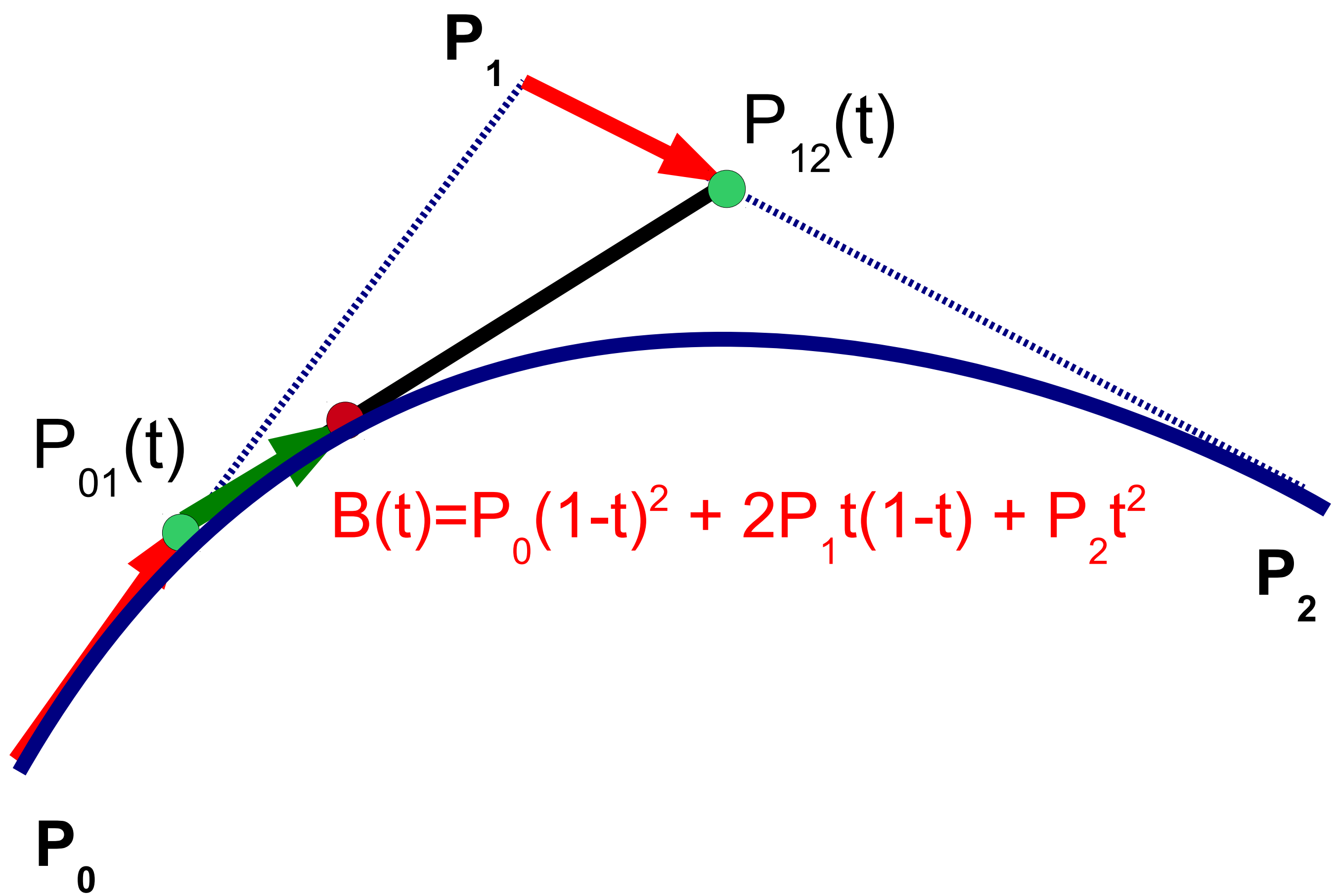
$$\mathbf{P_{12}(t) = P_1(1\text{-}t) + P_2 t}$$

$$B(t) = P_{01}(t)(1-t) + P_{12}(t)t =$$

$$[P_0(1-t) + P_1 t](1-t)+[P_1(1-t) + P_2 t]t =$$

$$P_0(1-t)^2 + 2P_1 t(1-t) + P_2 t^2$$

Kvadratiniai B. splainai



$$B(t)=P_0(1-t)^2 + 2P_1t(1-t) + P_2t^2$$

Pavyzdys

- **Tarkime turime tokius taškus:**

  $P_0(1,0)$, $P_1(0,0)$, $P_2(0,1)$.

- **Tada antros eilės Bezier kreivė**

  B(t) yra aibė taškų (x(t),y(t)), t iš [0,1], tokių, kad

  $$x(t)= 1*(1-t)^2 + 2*0*t*(1-t) + 0*t^2 = (1-t)^2$$

  $$y(t)= 0*(1-t)^2 + 2*0*t*(1-t) + 1*t^2 = t^2$$

...tęsinys

- **Kadangi**

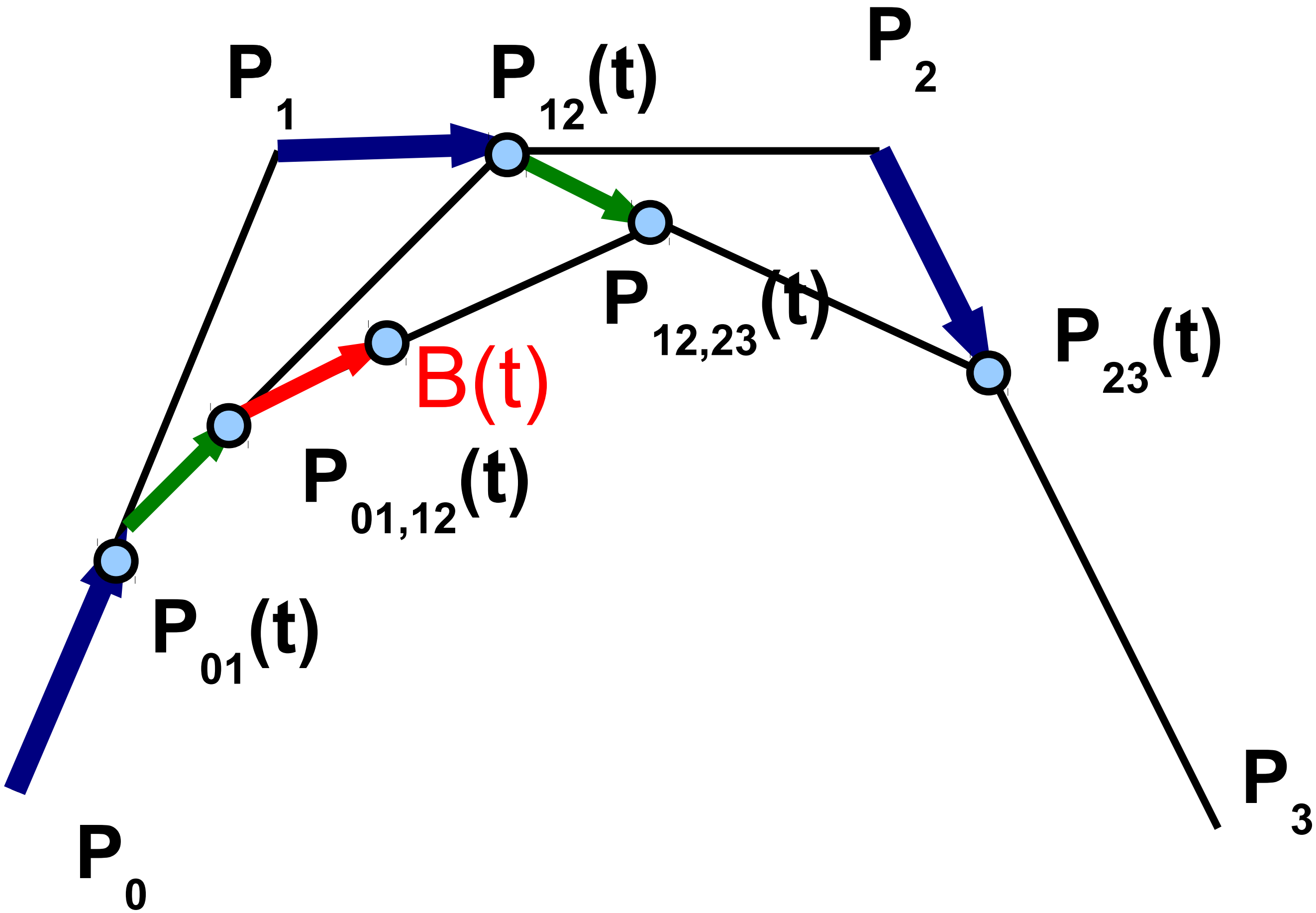
  $x(t) = (1-t)^2$

  $y(t) = t^2$,

  tai galima gauti kreivės analizinę išraišką:

$$\sqrt{x} + \sqrt{y} = 1$$

... kaip sudaromas kubinis B. splainas?



Kubinio Bezier splaino formulė

- **Analaogiškai galime gauti kubinio Bezier splaino išraišką:**
  - $B(t)=P_0(1-t)^3+3P_1(1-t)^2t+3P_2(1-t)t^2+P_3t^3$

Pratimas

- **Duoti taškai (0,0), (1,1), (2,-1), (3,0)**
  - Raskite atitinkamą kubinį Bezier splainą

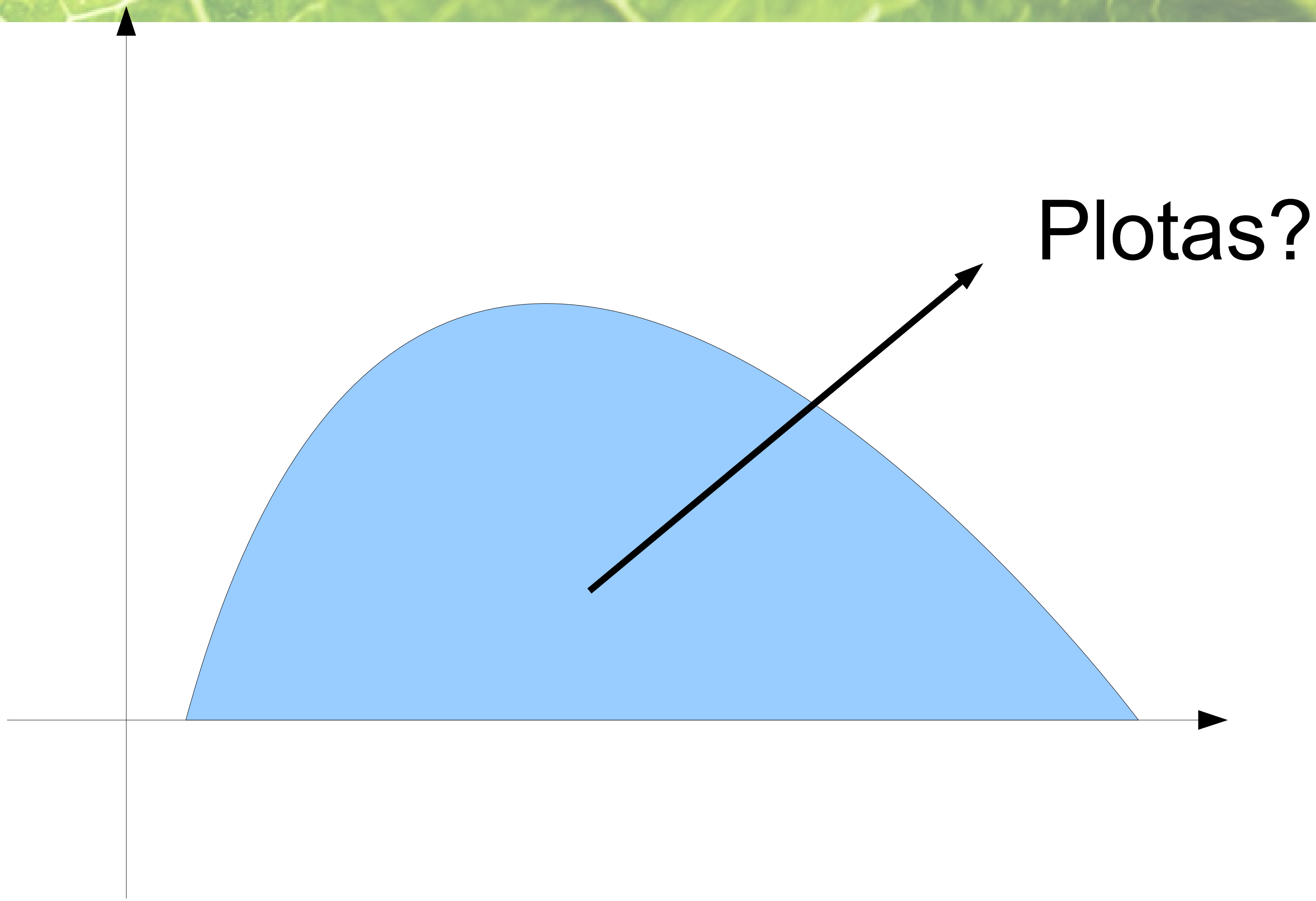
n-tojo laipsnio B. splainai

$$\mathbf{B}(t) = \sum_{i=0}^{n} \binom{n}{i} (1-t)^{n-i} t^i \mathbf{P}_i$$

Pratimas

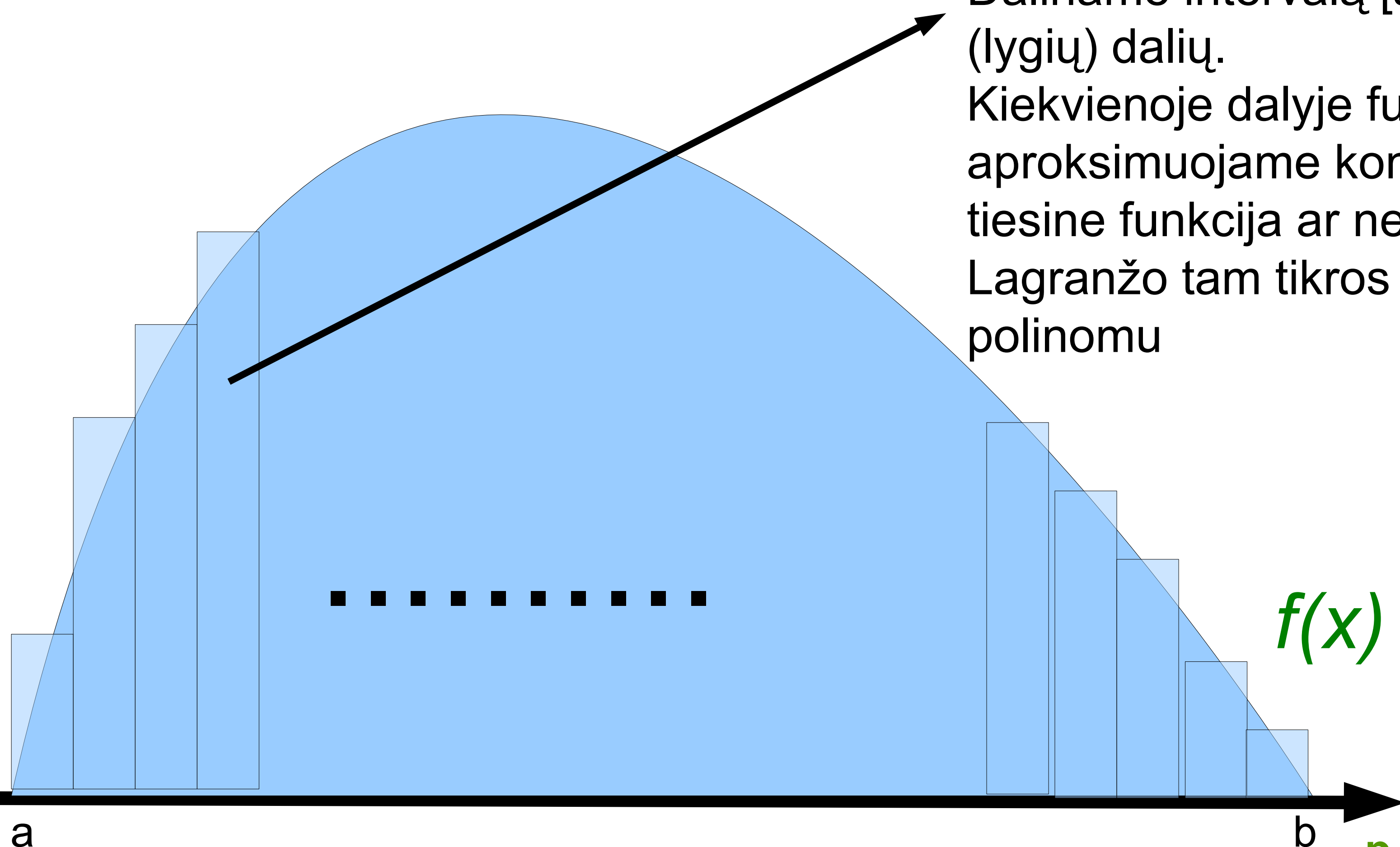
- **Užrašykite 5-jo laipsnio B. splaino formulę**

Skaitinis integravimas

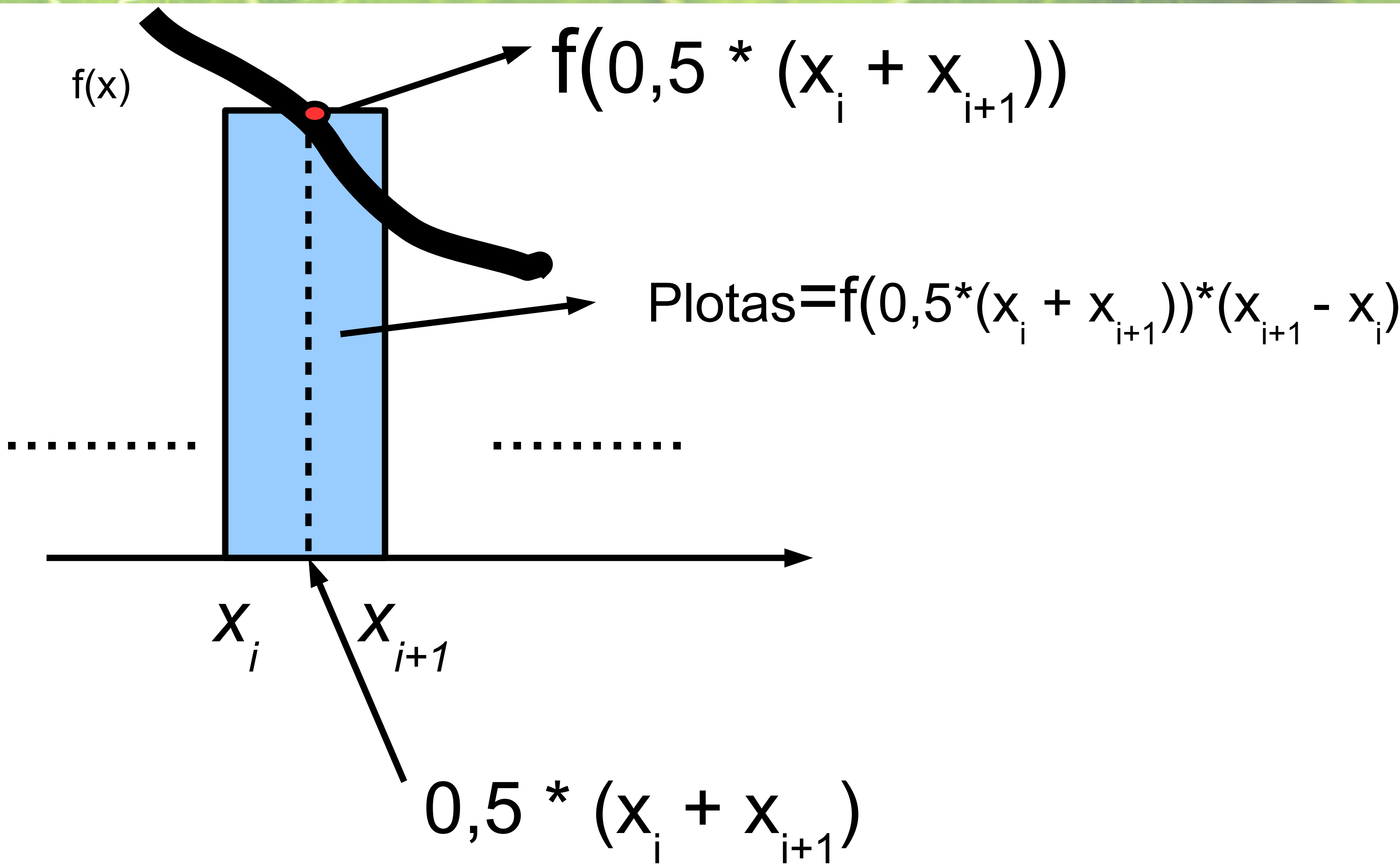


Idėja

Daliname intervalą [a,b] į N (lygių) dalių.
Kiekvienoje dalyje funkciją aproksimuojame konstanta, tiesine funkcija ar net Lagranžo tam tikros eilės polinomu



Viduriniųjų stačiakampių metodas



Vidurinių̨jų stačiakampių formulė visam intervalui

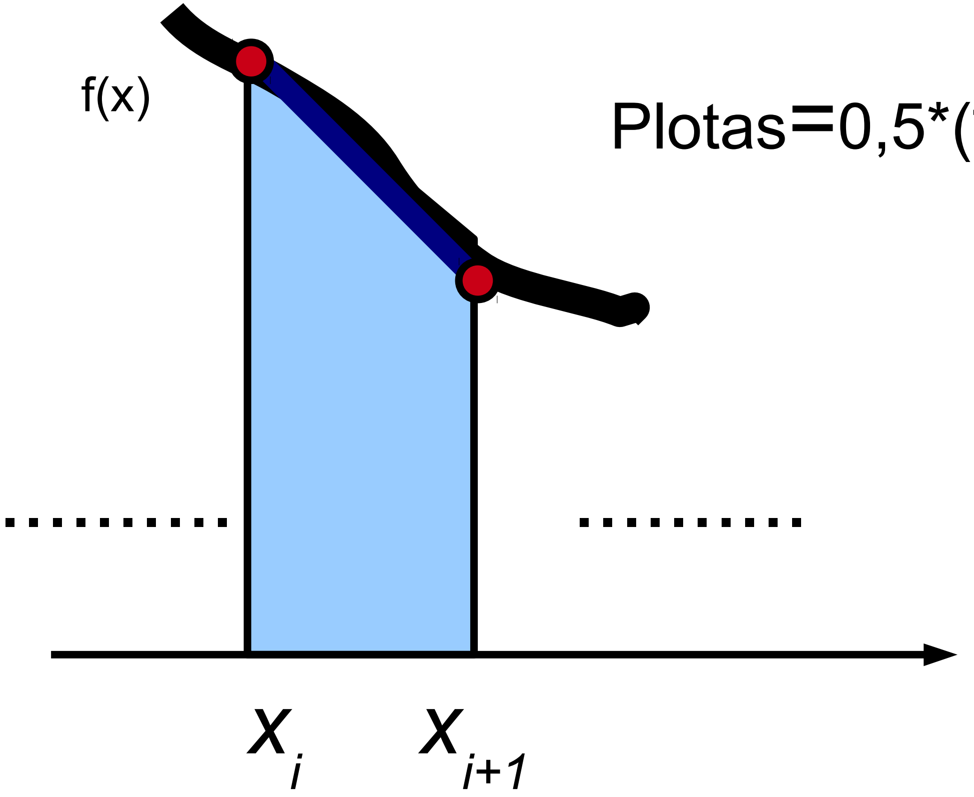
- **Tarkime, kad intervalą [a,b] padalinome į N lygių dalių. Tada turime N taškų:**

  { a+0,5h, a+1,5h,..., a+(N-0,5)h},

  kur h yra (b-a)/N. Tada:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{N-1} f(a+(i+\frac{1}{2})h)\cdot h$$

Trapecijų metodas



Plotas $=0{,}5*(f(x_i)+f(x_{i+1}))*(x_{i+1} - x_i)$

Trapecijų formulė visam intervalui

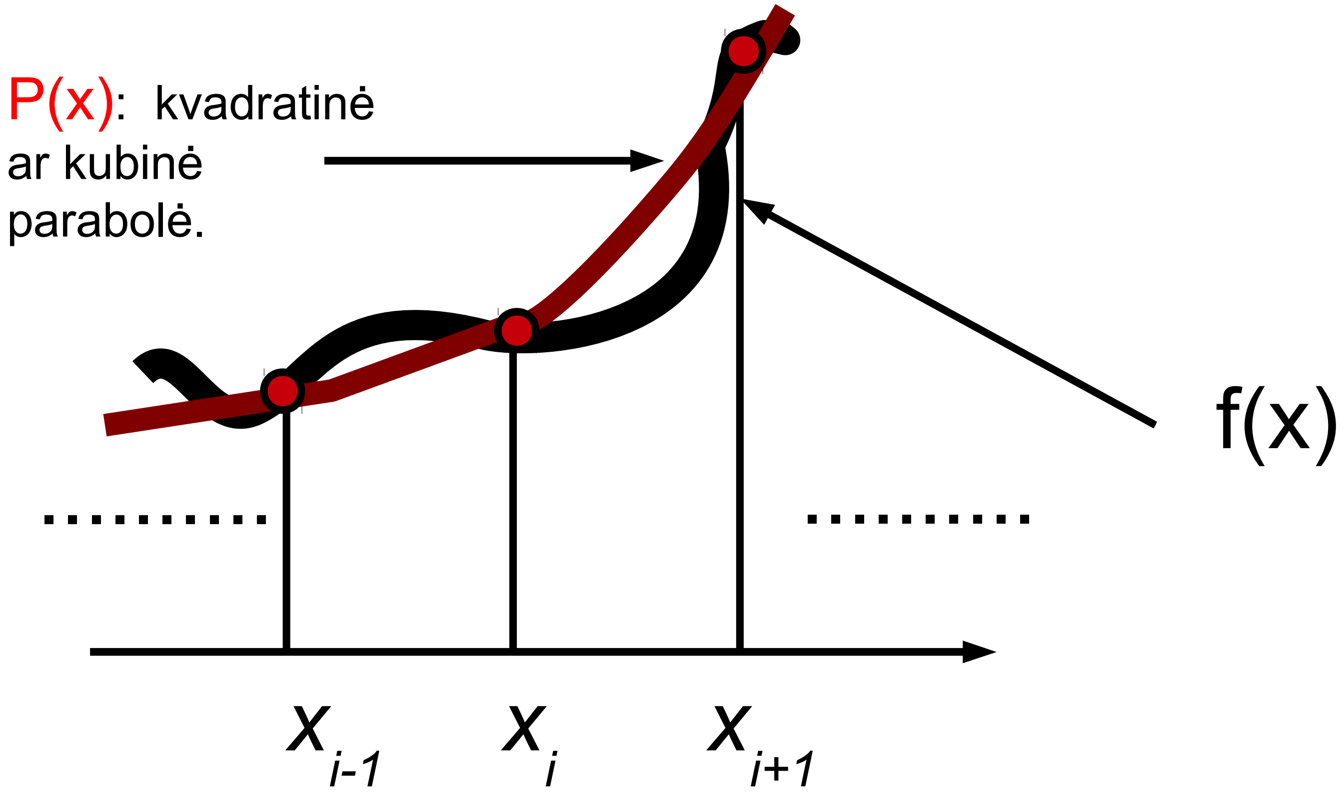
- **Tarkime, kad intervalą [a,b] padalinome į N lygių dalių. Tada turime N+1 tašką:**

  {a, a+h, a+2h,..., a+(N-1)h, b},

  kur h yra (b-a)/N. Tada:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \left[f(a) + 2 \cdot \sum_{i=1}^{N-1} f(a+ih) + f(b) \right] h$$

Simpsono formulė



$$Plotas = 0,5*(f(x_i)+f(x_{i+1}))*(x_{i+1} - x_i)$$

Simpsono formulė

$$P(x) = f(x_{i-1})L_{i-1}(x) + f(x_i)L_i(x) + f(x_{i+1})L_{i+1}(x)$$

$$L_{i-1}(x) = \frac{(x - x_i)(x - x_{i+1})}{(x_{i-1} - x_i)(x_{i-1} - x_{i+1})}$$

$$L_i(x) = \frac{(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})}{(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})}$$

$$L_{i+1}(x) = \frac{(x - x_{i-1})(x - x_i)}{(x_{i+1} - x_{i-1})(x_{i+1} - x_i)}$$

Naudojame Lagranžo polinomą

Praeita skaidrė, naudosime kvadratinę parabolę

Simpsono formulė

$$\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x)dx \approx \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} P(x)dx$$

$$x_i = x_{i-1} + h$$

$$x_{i+1} = x_{i-1} + 2h$$

Tariame, kad intervalas padalintas į lygias dalis

$$\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} P(x)dx = \frac{h}{3} \cdot [f(x_{i-1}) + 4f(x_i) + f(x_{i+1})]$$

Tai tiksli formulė, nes kvadratinė funkcija lengvai integruojama

Simpsono formulė

- **Paprastai, taikant Simpsono formulę, ima lyginį (lygių) dalių skaičių. Tada**

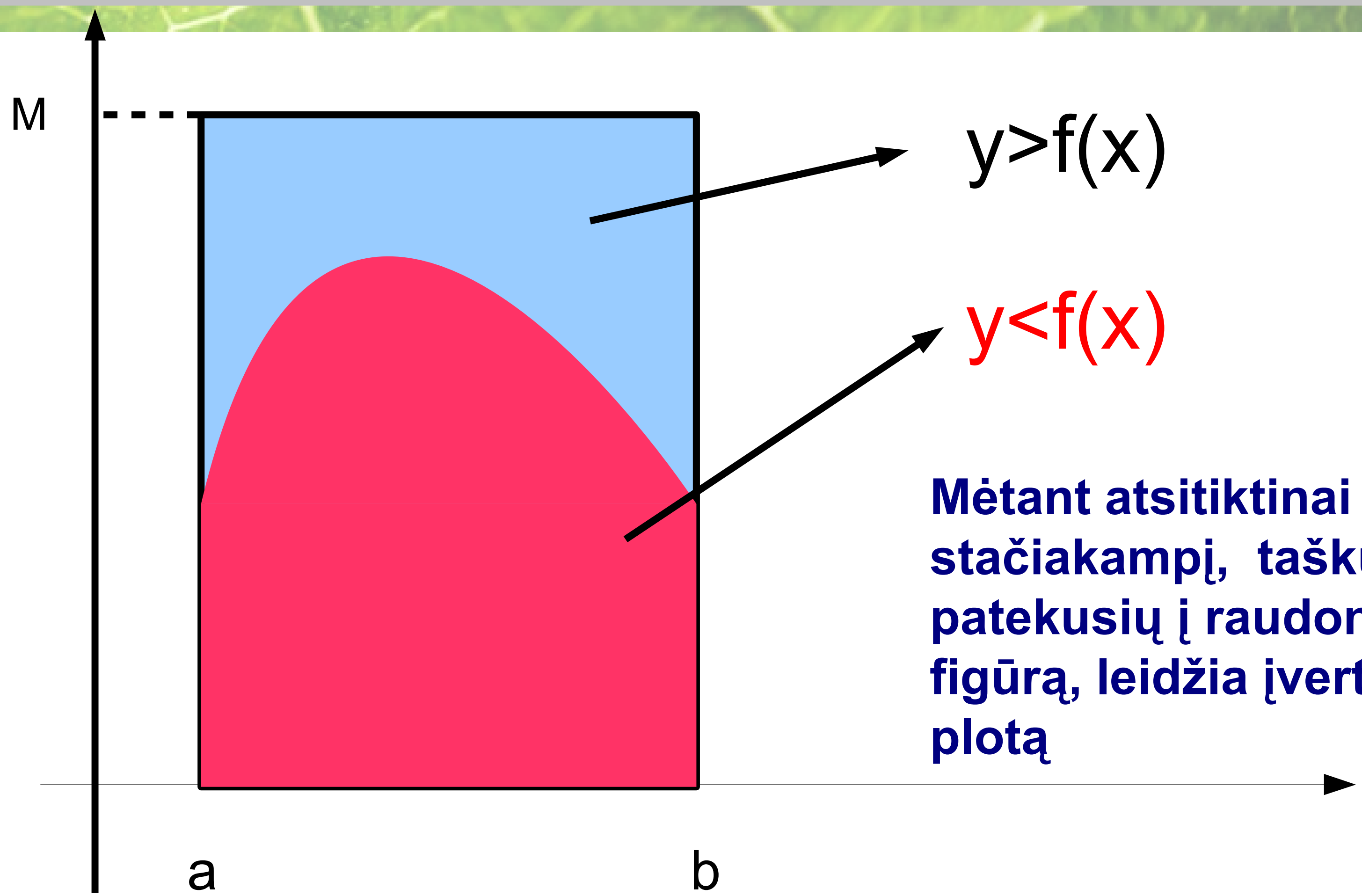
$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}\Big[f(x_0)+4f(x_1)+2f(x_2)+4f(x_3)+2f(x_4)+\cdots+4f(x_{n-1})+f(x_n)\Big]$$

Monte-Karlo metodas

- Tarkime M > f(x) > 0 intervale [a,b]. Paimkime N - „pakankamai“ didelį skaičių. Tada galima naudoti tokį algoritmą integralui nuo f(x) intervale [a,b] rasti:

```
I := 1
Pataikėme := 0
while (I < N) do
    x:= atsitiktinis skaičius iš [a,b]
    y:= atsitiktinis skaičius iš [0,M]
    If y<f(x) then Pataikėme :=  Pataikėme + 1
    I := I + 1
End while
Integralas := (b-a) * M * Pataikėme / N
```

Kodėl Monte-Karlo metodas veikia?



Mėtant atsitiktinai taškus į stačiakampį, taškų dalis patekusių į raudoną figūrą, leidžia įvertinti jos plotą

Laboratorinio darbo Nr. 1 užduotis 2

- **Parašykite programą, kuri skaičiuoja Jums duotąjį integralą, priklausantį nuo parametro duotajame intervale ir duotajame parametrų reikšmių intervale pagal trapecijų ir Simpsono formules. Kokio nors įrankio pagalba nupieškite integralo priklausomybių grafikus nuo parametrų.**

Paprastų dif. lygčių ir sistemų skaitiniai sprendimo metodai

Problema

- **Koši uždavinys: $y'=f(x,y)$, $y(x_0)=y_0$**
- **Minėtą problemą galima panašiai užrašyti ir tuo atveju, kai y – vektorius;**
- **Pavyzdys (pratimas):**
  - $y'=2y$, $y(0)=1$;

Kaip spręsti skaitiškai? Įvadas

- **Užrašykime (artutiniškai) išvestinė :**
  - $y'(x) \sim (y(x+\Delta x) - y(x)) / \Delta x$
- **Paskaičiuokit su skaičiuokle y'(x) kai**
  - y(x) = x^2 + x
  - y(x) = sin(x)
  - y(x) = exp(x)

taškuose x=0, 0.1, 0.2, 0.3, ..., 1.0, kai Δx=0.001, palyginkite su tiksliosiomis išvestinių reikšmėmis

... minėtą schemą panaudokime d.l.

- **Vietoje y'=f(x,y) bandome rašyti:**
  - $(y(x+\Delta x)-y(x)) / \Delta x = f(x,y)$
  - $y(x+\Delta x) = y(x) + \Delta x * f(x,y)$
- **Tai leidžia sukurti vadinamąjį Eulerio metodą:**
  - Pradedam: $y(x_0)=y_0$ – iš pradinės sąlygos;
  - ... tada tegul $x_1 = x_0 + h$ (h – pasirenkamas pagal norimą tikslumą), o $y_1= y(x_1) \sim y_0 + f(x_0,y_0)*h$;
  - Toliau - analogiškai ...

Pavyzdys (skaičiuoklėje)

h	0,1	
x0	0	
y0	1	
Lygtis	y'=-2y	y=exp(-2x)

x	y	y tikslus
0,0	1,00000	1,00000
0,1	0,80000	0,81873
0,2	0,64000	0,67032
0,3	0,51200	0,54881
0,4	0,40960	0,44933
0,5	0,32768	0,36788
0,6	0,26214	0,30119
0,7	0,20972	0,24660
0,8	0,16777	0,20190
0,9	0,13422	0,16530
1,0	0,10737	0,13534

y reikšmės, paskaičiuotos pagal Eulerio metodą

Tikslus sprendinys

Apibendrinimas sistemai

- **Nesunkiai galima apibendrinti Eulerio metodą sistemai:**
  - Pratimas.Užrašykite Eulerio metodą sistemai
    - $y' = u(x,y,z)$;
    - $z' = v(x,y,z)$;
- **Jeigu turime lygtį $y'' = f(x,y,y')$, tai ją galime paversti į sistemą. Kaip?**

Runge – Kutos metodai

- **Jų yra daug :), nes tai metodų šeima**
- **Mes panagrinėsime RK4 – klasikinį metodą**
- **Tarkime, kad mes žinome reikšmes y_N ir x_N. (Pradžioje, aišku, N=0 – ir mes juos žinome iš pradinių sąlygų).**
- **Tada y_{N+1} skaičiavimui turime apskaičiuoti vadinamuosius Runge koeficientus k_1,k_2,k_3,k_4**

Koeficientų skaičiavimas

- $k_1 = h * f(x_N, y_N);$
- $k_2 = h * f(x_N + 0.5 * h, y_N + 0.5 * k_1)$
- $k_3 = h * f(x_N + 0.5 * h, y_N + 0.5 * k_2)$
- $k_4 = h * f(x_N + h, y_N + k_3)$

y_{N+1} skaičiavimas

- $x_{N+1} = x_N + h$;
- $y_{N+1} = 1/6*(k_1+2*k_2+2*k_3+k_4)$
- **Klausimas: jeigu f(x,y) nepriklauso nuo y, t.y., f(x,y)=g(x), tai ką primena tada RK4?**

Pratimas

- **Bake yra 100 l vandens su *B* bakterijų viename mililitre koncentracija. Į baką pilamas distiliuotas vanduo su greičiu 5 l/min. Vanduo susimaišo ir išteka iš bako su tokiu pat greičiu. Kaip keisis laukui bėgant bakterijų koncentracija?**

Pratimas (tęsinys)

Užduotis:

– sukurti dif. lygtį;

– išspręsti ją;

– Išspręsti skaitmeniškai, kai *B* – konktretus skaičius;

– nubraižyti koncentracijos kitimo grafiką

Pratimas (du bakai)

- **Bake yra 100 l vandens su *B* bakterijų viename mililitre koncentracija. Į baką pilamas distiliuotas vanduo su greičiu 5 l/min. Vanduo susimaišo ir išteka iš bako su tokiu pat greičiu į kitą baką, kuriame pradžioje vanduo buvo distiliuotas ir bakas buvo pilnas. Kaip keisis laukui bėgant bakterijų koncentracija abiejuose bakuose?**

Pratimas (du bakai-tęsinys)

- **Užduotis:**
  - – sukurti dif. lygtis;
  - – išspręsti jas;
  - – Išspręsti skaitmeniškai su tam tikromis *B* reikšmėmis;
  - – nubraižyti koncentracijų kitimo grafikus viename brėžinyje

Laboratorinio darbo Nr. 1 užduotis 3

- **Išspręskite Jums nurodytą d. lygtį analižiškai ir skaitiškai. Pradines sąlygas sukurkite patys. Dif. lygtys individualiosioms užduotims:**
  1) $xy'+y=y^2$;
  2) $y'=\cos(y-x)$;
  3) $(x+2y)y'=1$;
  4) $y'-xy^2=2xy$;
  5) $2x^3y'=y(2x^2-y^2)$;
  6) $y^2+x^2y'=xyy'$

Molekulinės dinamikos (MD) metodai. Įvadas

Įžanga

- **Šiame kurse mes tik apžvelgsime molekulinės dinamikos – molekulinio modeliavimo srities - taikymus molekulinėje biologijoje ir bazinius jos metodus**

Molekulinė dinamika: kam jos reikia?

- **Pagrindinis MD tikslas molekulinėje biologijoje: baltymų ir kitų molekulių judėjimo ir konformacijų pasikeitimų laike modeliavimas**

Biomolekulių judėjimas

- **Lokaliosios(vietinės) fluktuacijos:**
  - Čia eina kalba apie nuo 0,001 iki 50 nanometrų ir nuo vienos femtosekundės iki 0,1 sekundės dydžių erdvėje ir laike atitinkamai:
    - Tai gali būti atskirų atomų virpesiai, ciklų judėsiai ir pan.
- **Molekulės kaip kieto kūno judėsiai:**
  - Dydžiai: Nuo 0,1 to 1 nanometro, 10^{-9} to 1s
    - Spiralių, domenų, subvienetų judėsiai ir kt.
- **Didelio masto judėjimas:**
  - Nuo 50 nanometrų, 0,1 mikrosekundės iki valandos:
    - Spiralių ričių judėjimas, disociacija ar asociacija, foldos sudarymas

Motyvacija

Molekulinės dinamikos metodai gali būti taikomi tokiose srityse:

– Baltymų stabilumas

– Konformacijų(formų) pasikeitimai

– Jonų transportas

– Baltymų susilankstymas (angl. folding)

– Molekulinis atpažinimas

– Vaistų gamyba

Kaip MD rezultatai naudojami?

- **MD modeliavimas leidžia gauti atskirų molekulių, atomų pozicijas ir greičius kiekvienu laiko momentu tam tikrame laiko intervale. Ši informacija *transformuojama* toliau į mums įprastus dydžius: temperatūrą, slėgį, koncentraciją, specifinę šilumą ir pan.**

Statistinė mechanika – fizikos skyrius – padeda atlikti minėtą interpretaciją

Kas yra statistinė mechanika?

- **Bazinės šios disciplinos sąvokos:**
  - termodinaminė būsena
    - Temperatūra T, slėgis P, dalelių (atomų, jonų ar pan.) skaičius N. Šitų parametrų skaičius yra visada nedidelis
  - mechaninė būsena
    - dalelių koordinatės **q**, momentai **p**.

Detaliau apie mechaninę būseną

- **Dalelių koordinatės yra 3D vektoriai: jeigu turime *N* dalelių, tai turime *3N* skaičių, apibūdinančių koordinates**
- **Dalelių impulsai irgi yra 3D vektoriai: atskiros dalelės impulsas yra vektorius** (mv_x, mv_y, mv_z), **kur** m – **dalelės masė, o kiti dydžiai – greičio vektoriaus komponentės**
- **Išvada. Viso turime 6N dydžių, kurie apibūdina mechaninę būseną**

Fazinė erdvė

- **Kadangi turime 6N dydžių (skaičių), kurie pilnai apibrėžia būseną, galime juos visus laikyti kaip abstrakčios 6N-matės erdvės taškus. Ši erdvė vadinama *fazine* erdve.**
- **Laikui bėgant dalelės keičia savo koordinates ir greičius: mes galime tai interpretuoti taip, kad sistema pereina į kitą tašką fazinėje ervėje.**

Ansamblis

- **Tai taškų aibė iš fazinės erdvės,kurie turi tą pačią termodinaminę būseną**
- **Statistinėje mechanikoje nagrinėja keletą ansamblių rūšių:**
  - **Mikrokanoninis** ansamblis (NVE). Jį apibūdina fiksuotas dalelių skaičius N, fiksuota energija E ir fiksuotas tūris V. Tai *izoliuotos* sistemos atvejis
  - **Kanoninis** ansamblis (NVT). Fiksuoti dydžiai: temperatūra T, tūris V, dalelių skaičius N
  - **Izobarinis-izoterminis** ansamblis (NPT). Fiksuoti: temperatūra T, slėgis P, dalelių skaičius N
  - **Didysis kanoninis** ansamblis (μVT). Fiksuoti: cheminis potencialas μ, tūris V, temperatūra T.

Ansamblių vidurkiai – MD pagrindas

- **Dydžius, kuriuos mes stebime natūraliajame eksperimente (pavyzdžiui, kolboje), galima apibūdinti kaip atitinkamų mikrodaleles apibūdinančių dydžių vidurkius. Statistinėje mechanikoje dirbama su ansamblių vidurkiais**

„Pagrindinė statistinės mechanikos formulė“

$$\langle A\rangle_{ansamblio} = \iint \underbrace{A(p^N, q^N)}\,\underbrace{\rho(p^N, q^N)}\,dp^N\,dq^N$$

Stebimas dydis kaip dalelių pozicijų ir impulsų funkcija

Ansamblį charakterizuojantis dalelių **skirstinys** pagal pozicijas ir impulsus

Ergodinė hipotezė

- **Praeitoje skaidrėje pateiktas integralas yra labai sudėtingas ir jo praktiškai nenaudoja realiuose skaičiavimuose.**
- **Vietoje minėto integralo galima imti „vidurkinimą“ pagal laiką, nes postuluojama, kad laikui bėgant nagrinėjama sistema ateis į pusiasvyros būseną**

Ergodinė hipotezė

- **Praeitoje skaidrėje pateiktas integralas yra labai sudėtingas ir jo praktiškai nenaudoja realiuose skaičiavimuose.**
- **Vietoje minėto integralo galima imti „vidurkinimą“ pagal laiką, nes postuluojama, kad laikui bėgant nagrinėjama sistema ateis į pusiasvyros būseną**

Ergodinė hipotezė: integravimas pagal laiką

$$\langle A\rangle_{laiko} = \lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_{t=0}^{T}\underbrace{A(p^N(t), q^N(t))}dt$$

Stebimas dydis kaip dalelių pozicijų ir impulsų funkcija: imame konkrečią reikšmę „taške“ (p(t),q(t))

Ergodinė hipotezė: formulavimas matematiškai

$$\langle A \rangle_{laiko} = \langle A \rangle_{ansamblio}$$

Artutinis vidurkio pagal laiką skaičiavimas

$$\langle A \rangle_{laiko} = \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \int_{t=0}^{T} A(p^N(t), q^N(t))dt$$

$$\approx \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} A(p_i^N, q_i^N)$$

Artutinis vidurkio pagal laiką skaičiavimas

$$\frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M} A(p_i^N, q_i^N)$$

Iteracijų pagal laiką skaičius

A reikšmė *i*-tosios iteracijos laiku

Kaip atlikinėti iteracijas?

- **Pasirenkame visoms dalelėms pradines pozicijas ir pradinius greičius**
  - Kaip tai padaryti – atskiras klausimas
- **Dalelių pozicijos ir greičiai keičiasi pagal Niutono mechanikos dėsnius: juos galime išrašyti kiekvienai dalelei. Kaip rezultatas gausis diferencialinių lygčių sistema, kuriai spręsti reikia taikyti RK metodus arba kitus - specializuotus**

Leap-frog (varlės šuolių) metodas

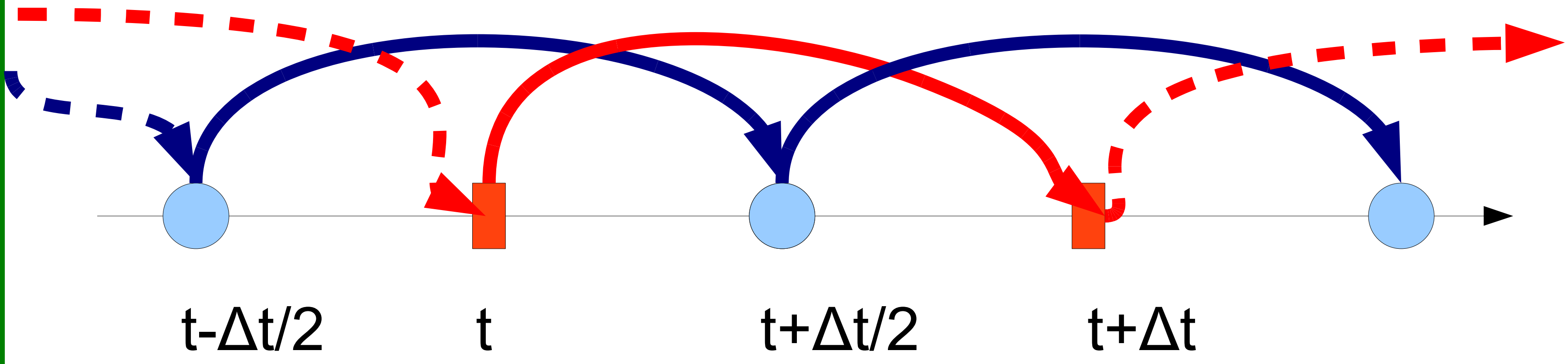
- **Tegul *r(t)* – tam tikros dalelės pozicijos vektorius, o *v(t)* ir *a(t)* – jos greitis pagreitis atitinkamai laiko momentu *t*.**
- **Pasirinkime laiko žingsnį *Δt*. Tada pozicijos ir greičio pasikeitimus galima aproksimuoti tokiomis lygtimis (kitoje skaidrėje)**

Leap-frog (varlės šuolių) metodas

$$r(t+\Delta t) = r(t) + v\left(t+\frac{\Delta t}{2}\right)\Delta t$$

$$v\left(t+\frac{\Delta t}{2}\right) = v\left(t-\frac{\Delta t}{2}\right) + a(t)\Delta t$$

Leap-frog (varlės šuolių) metodas



Metodo skaičiavimo schema: greičio ir pozicijos skaičiavimas skiriasi per pusę žingsnio

Pastaba

- **Pagreitį paprastai randa iš potencinės energijos reikšmių: panašiai kaip pakeltas per aukštį *h* virš žemės daiktas turi potencinę energiją *mgh* ir Žemė jį veikia su jėga *mg*. Tik mūsų nagrinėjamu atveju jėgos turi elektromagnetinę prigimtį.**


Pabaiga