

Семинар 3: Процесс Орнштейна-Уленбека, интегрирование уравнений движения на ГП

1 Процесс Орнштейна-Уленбека

Чтобы исследовать статистическую и вычислительную производительность алгоритмов генерации случайных чисел можно использовать динамику Ланжевена для N независимых броуновских частиц в гармоническом потенциале, полностью просчитанную на ГП. Каждая из частиц движется в гармоническом потенциале $V(R_i) = \frac{k_{sp}R_i^2}{2}$, где k_{sp} - коэффициент упругости. Использование этой аналитически решаемой модели позволяет сравнить данные моделирования с точными теоретическими результатами.

Уравнения движения Ланжевена в задемпфированном пределе

$$\xi \frac{dR_i}{dt} = -\frac{\partial V(R_1, R_2, \dots, R_N)}{\partial R_i} + G_i(t) \quad (1)$$

будем численно интегрировать с помощью схемы первого порядка

$$R_i(t + \Delta t) = R_i(t) + f(R_i(t))\Delta t/\xi + g_i(t)\sqrt{2k_B T \Delta t/\xi}, \quad (2)$$

где $f(R_i) = -\partial V(R_1, R_2, \dots, R_N)/\partial R_i$ это сила, действующая на i -ю частицу, ξ - коэффициент трения и T - температура. В уравнении 1 случайная сила $G_i(t)$ вычисляется по формуле:

$$G_i(t) = g_i(t)\sqrt{\frac{2k_B T \xi}{\Delta t}}. \quad (3)$$

Величина g_i в уравнениях 2 и 3 - случайная величина, имеющая нормальное распределение с нулевым средним значением и единичной дисперсии, полученная с помощью алгоритмов LCG, Ran2, гибридный Таус и Фибоначчи с запаздыванием.

2 Расчёт температуры

Скорости атомов в системе распределены согласно формуле Максвелла-Больцмана:

$$p(v_{i,\alpha}) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[-\frac{mv_{i,\alpha}^2}{2k_B T} \right], \quad (4)$$

где $v_{i,\alpha}$ - компонента ($\alpha = x, y, z$) вектора скорости для атома i . Это распределение может быть использовано для получения температуры системы при помощи теоремы о равнораспределении:

$$\left\langle \frac{mv_{i,\alpha}^2}{2} \right\rangle = \frac{1}{2} k_B T. \quad (5)$$

3 Интегрирование уравнения движения

Интегрирование уравнений движения на ГП можно производить одновременно для всех частиц в системе. Так как в случае процесса Орнштейна-Уленбека частица только одна, то для эффективной работы на ГП необходимо запускать сразу много траекторий. Это позволяет в короткие сроки получить хорошую статистическую выборку. Рассмотрим реализацию интегратора на примере алгоритма Верле.

4 Результаты

```

i = threadIdx.x;
if(i < N){
    sumv = 0;
    sumv2 = 0;
    rr = 2.0*r[i]-rm[i]+f[i]*delta*delta;
    vi = (rr-rm[i])/(2.0*delta);
    sumv = sumv + vi;
    sumv2 = sumv2 + vi*vi;
    rm[i] = r[i];
    r[i] = rr;
    temp[i] = sum2/N;
    etot[i] = en +sum2/2.0;
}

```

Рис. 1: Программная реализация интегратора Верле на GPU. Масса атомов и постоянная Больцмана взяты равными единице.

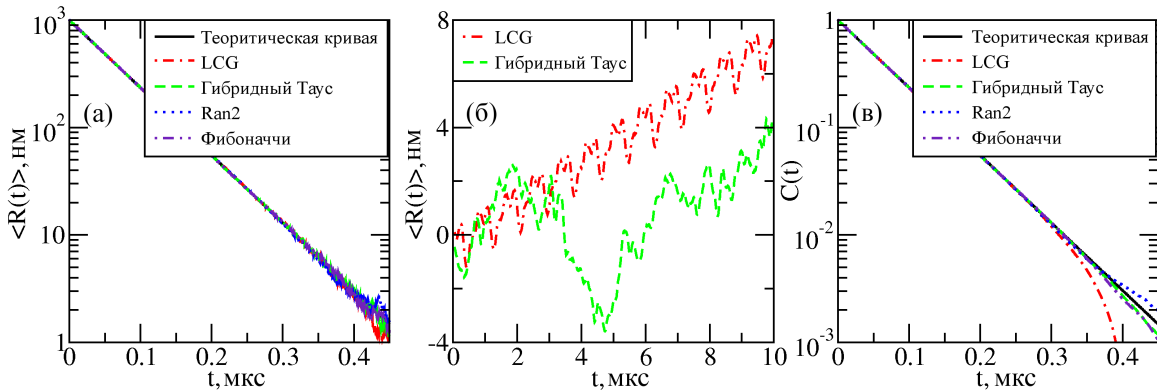


Рис. 2: Графики усреднённого по ансамблю положения частиц $\langle X(t) \rangle$ (а) и (б) и автокорреляционная функция $C(t)=\langle X(t)X(0) \rangle$ (в) для системы из N броуновских частиц в гармоническом потенциале, построенные на полулогарифмической шкале. Теоретические кривые $\langle X(t) \rangle$ и $C(t)$, представляющие точное аналитическое решение, сравниваются с результатами динамики Ланжевена с использованием алгоритмов LCG, Ran2, гибридный Таус и Фибоначчи с задержкой. В равновесных флуктуациях для $\langle X(t) \rangle$ (б) видны повторяющиеся значения на больших временах, полученные при использовании генератора LCG. Эти изменения связаны с корреляциями случайных чисел, полученных в разных потоках, которые отсутствуют в реализациях генераторов гибридный Таус и Фибоначчи с запаздыванием.