

РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Семенова Дарья Евгеньевна

Студент

Факультет ВМК МГУ имени М. В. Ломоносова, Москва, Россия

E-mail: blackwolvessagalasthope@gmail.com

Для моделирования молекулярных систем требуется разработка эффективных алгоритмов, позволяющих работать на параллельных компьютерах [1]. Необходимо исследовать многомерные задачи и получать результат в приемлемое время [2–3]. Одними из наиболее востребованных алгоритмов является семейство методов Монте-Карло, в частности параллельный метод РТМС (Parallel Tempering) и диффузионный метод Монте-Карло, с помощью которого разрешается уравнение Шредингера и выполняется поиск основного состояния энергии квантовой системы. Эти методы являются единственным способом получения решения для большого количества квантовомеханических задач.

РТМС представляет собой метод поиска пространственной структуры частицы с минимальной потенциальной энергией. Часто метод применяется для поиска решения в задачах по молекулярной биологии, так как минимум потенциальной энергии играет огромную роль в процессах, происходящих в наносистемах, например, при сворачивании белков.

Диффузионный метод Монте-Карло используют для решения уравнения Шредингера, решение которого найти аналитически можно только в малом количестве «идеальных» случаев. Для более реалистичных систем необходимы другие численные методы, упрощающие процесс нахождения решения, и на данный момент для многомерных случаев диффузионный метод - практически единственный. С помощью данного метода определяется процедура нахождения верного основного состояния энергии [4].

Соответственно, исследование обоих методов и изучение их особенностей, а также применение выбранных методов к конкретным поставленным задачам и определяет содержание данной работы.

Автор выражает благодарность за помощь в подборке материалов и их изучении научному руководителю Попову Александру Михайловичу.

Литература

1. Fan Bai. Parallel Monte Carlo Methods. // Department of Computer Science, Georgia State University.
2. Попов А. М. Вычислительные нанотехнологии. М.: Издательский отдел факультета ВМИК МГУ им. М.В. Ломоносова, 2009.
3. К.Биндер, Д.В. Хеерман. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике. М.: Наука.Физматлит, 1995.
4. Tanaka S. Diffusion Monte Carlo study on temporal evolution of entropy and free energy in nonequilibrium processes // The Journal of Chemical Physics № 144, 094103, 2016.
5. Frenkel D. Smit B., Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications // Academic Press, 2002.