

0.1. Денисов И.А. Метод дополнительных частиц в задачах многоуровневого моделирования

В задачах расчета надмолекулярной динамики существует проблема аналитического описания многоуровневых систем для построения адекватных уравнений движения. Достижения в этой области связаны с развитием грубозернистого молекулярного моделирования [1, 2] и методов мезомеханики [3].

В работе предложен оригинальный подход к описанию многоуровневой коллективной динамики, а также теоретический каркас для получения уравнений движения многоуровневых систем в том числе — активных структурных преобразований, изменения числа связей объектов, самоорганизации.

Основная особенность заключается в использовании абстракции объекта для описания образования и разрыва связей. Сформулировано многоуровневое уравнение Ланжевена с разрывной правой частью для переменного числа объектов, включающее условия их порождения и уничтожения T :

$$m_j^i \frac{d^2 q_j^i}{dt^2} = \sum_{k \neq i} F_j^L(q_j^i, q_j^k) + \sum_{k \notin D_j^i} F_j^{L+1}(q_j^i, q_{j+1}^k) T_{j+1}^k + \sum_{k \notin P_j^i} F_j^{L-1}(q_j^i, q_{j-1}^k) T_{j-1}^k + \sum_{k \in P_j^i} F_j^P(q_j^i, q_{j-1}^k) T_{j-1}^k + \sum_{k \in D_j^i} F_j^D(q_j^i, q_{j+1}^k) T_{j+1}^k - \gamma_j^i \dot{q}_j^i + \eta_j^i(t),$$

где i — номер частицы; j — номер уровня; D и P — множества дочерних и родительских объектов.

Используя компонентно-ориентированный подход и среду разработки BlackBox Component Builder [4], создано приложение для численного решения таких уравнений, исследован набор его частных случаев. Показана выразительность данного подхода при решении задач многоуровневого моделирования.

Список литературы

- [1] ARKHIPOV A., FREDDOLINO P.L., SCHULTEN K. Stability and Dynamics of Virus Capsids Described by Coarse-Grained Modeling // Structure. — 2006. — Vol. 14, N 12, P. 1767–1777.
- [2] WASSENAAR T.A. ET AL. Going Backward: A Flexible Geometric Approach to Reverse Transformation from Coarse Grained to Atomistic Models // J. Chemical Theory and Computation. — 2014. — Vol. 10, N 2, P. 676-690.
- [3] ПСАХЬЕ С.Г. и ДР. Метод подвижных клеточных автоматов как инструмент физической мезомеханики материалов // Физическая мезомеханика. — 1998. — Т. 1, С. 95–108.

- [4] WARFORD J.S. Computing Fundamentals: The Theory and Practice of Software Design with BlackBox Component Builder / Springer Science & Business Media, 2013.