

СРАВНЕНИЕ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ ПОИСКА ПУТИ С МИНИМАЛЬНЫМ ПЕРЕПАДОМ ЭНЕРГИИ

Елизаров Андрей Андреевич

Студент

Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия

E-mail: eaa.20@uni-dubna.ru

Научный руководитель — Полуян Сергей Владимирович

При изучении химических и физических процессов, которые включают переход моделируемой системы из одного состояния в другое, возникает задача поиска пути с минимальным перепадом энергии (англ. *minimum energy path*). В простейшем случае переход между состояниями представляется в виде пути из одного энергетического минимума в другой, который включает в себя потенциальный барьер. Если рассматривать переход при непрерывной поверхности потенциальной энергии, то искомый путь возможно определить в виде кривой [1]. Ниже приведено определение пути, который возможно аппроксимировать численным методом.

Пусть \mathbb{R}^d – вещественное пространство размерности d . Пусть функция $V : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ определяет поверхность, которая будет называться поверхностью потенциальной энергией. Пусть $m, m' \in \mathbb{R}^d$ точки, определяющие два локальных минимума V . Тогда путь с минимальным перепадом энергии, соединяющий m и m' – это путь $\varphi : [a, b] \in \mathbb{R}^d$, такой что $\varphi(a) = m, \varphi(b) = m'$ и

$$\nabla V(\varphi(\alpha)) - \left\langle V(\varphi(\alpha)), \frac{\varphi'(\alpha)}{\|\varphi'(\alpha)\|} \right\rangle \frac{\varphi'(\alpha)}{\|\varphi'(\alpha)\|} = 0 \quad (1)$$

для всех $\alpha \in [a, b]$ кроме тех α , для которых $\varphi(\alpha)$ – критическая точка.

Далее под путем с минимальным перепадом энергии будет пониматься кривая $\gamma([a, b])$, которая параметризована с использованием непрерывного пути $\gamma : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^d$.

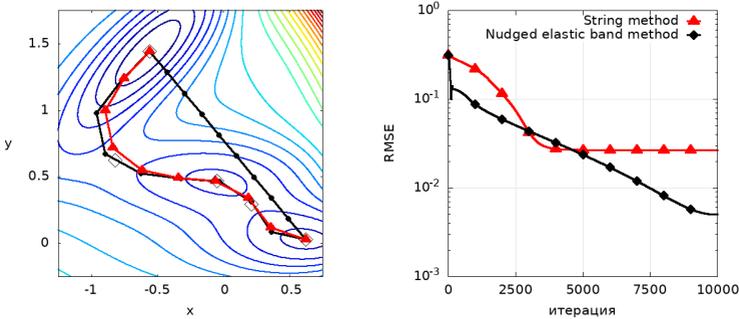
Существует множество методов численного приближения к пути с минимальным перепадом энергии. Многие исследователи [2] выделяют два наиболее успешных – метод эластичной ленты [3] (англ. *nudged elastic band method*) и метод струны [4] (англ. *string method*).

Рассматриваемые численные методы используют дискретное представление пути, которое состоит из множества точек в \mathbb{R}^d . Таким образом, точки аппроксимируют искомую кривую, соответствующую искомому пути. Хотя методы были разработаны для решения

одной задачи, принципы нахождения пути и количество входных параметров различаются.

Целью настоящего исследования является сравнение методов. Для этого осуществлена реализация методов и проведен ряд численных экспериментов. В докладе представляются результаты сравнения методов по различным критериям. В качестве объектов исследования выступали модельные потенциалы различной размерности. На рисунке представлены результаты применения методов поиска пути для классического тестового потенциала *Muller-Browns*.

Иллюстрации



Слева: начальный и найденные пути на контурном графике потенциала.

Справа: отклонение при сходимости методов к искомому пути.

Литература

1. Van Koten, B., Luskin, M. Stability and convergence of the string method for computing minimum energy paths, 2018, arXiv:1807.06094.
2. Vanden-Eijnden, E., Heymann, M. The geometric minimum action method for computing minimum energy paths // The Journal of Chemical Physics, 2008, doi: 10.1063/1.2833040.
3. Jónsson, H., Mills, G., Jacobsen, K.W. Nudged elastic band method for finding minimum energy paths of transitions // Classical and Quantum Dynamics in Condensed Phase Simulations, 1997, doi: 10.1142/9789812839664_0016.
4. Weinan, E. Simplified and improved string method for computing the minimum energy paths in barrier-crossing events // J. Chem. Phys., 2007, doi: 10.1063/1.2720838.