

УДК: 519.622, 004.021, 004.942

Процедура вывода явных, неявных и симметричных симплектических схем для численного решения гамильтоновых систем уравнений

Б. Батгэрэл^{1,2,a}, Э. Г. Никонов^{1,b}, И. В. Пузынин^{1,c}

¹Объединенный институт ядерных исследований,
Россия, 141980, Московская область, г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, д. 6

²Монгольский государственный университет науки и технологии,
Монголия, 14191, г. Улан-Батор, ул. Бага тойруу, д. 34

E-mail: ^a b.batgerel@yahoo.com, ^b e.nikonov@jinr.ru, ^c ipuzynin@jinr.ru

Получено 05.04.2016, после доработки — 11.11.2016.

Принято к публикации 16.11.2016.

При моделировании методами классической молекулярной динамики поведения системы частиц используются уравнения движения в ньютонической и гамильтоновой формулировке. При использовании уравнений Ньютона для получения координат и скоростей частиц системы, состоящей из N частиц, требуется на каждом временном шаге в трехмерном случае решить $3N$ обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка. Традиционно для решения уравнений движения молекулярной динамики в ньютонической формулировке используются численные схемы метода Верле. Для сохранения устойчивости численных схем Верле на достаточно больших интервалах времени приходится уменьшать шаг интегрирования. Это приводит к существенному увеличению объема вычислений. В большинстве современных пакетов программ молекулярной динамики для численного интегрирования уравнений движения используют схемы метода Верле с контролем сохранения гамильтониана (энергии системы) по времени. Для уменьшения времени вычислений при молекулярно-динамических расчетах можно использовать два дополняющих друг друга подхода. Первый основан на совершенствовании и программной оптимизации существующих пакетов программ молекулярной динамики с использованием векторизации, распараллеливания, спецпроцессоров. Второй подход основан на разработке эффективных методов численного интегрирования уравнений движения. В работе предложена процедура построения явных, неявных и симметричных симплектических численных схем с заданной точностью аппроксимации относительно шага интегрирования для решения уравнений движения молекулярной динамики в гамильтоновой форме. В основе подхода для построения предложенной в работе процедуры лежат следующие положения: гамильтонова формулировка уравнений движения, использование разложения точного решения в ряд Тейлора, использование для вывода численных схем аппарата производящих функций для сохранения геометрических свойств точного решения. Численные эксперименты показали, что полученная в работе симметричная симплектическая схема третьего порядка точности сохраняет в приближенном решении основные свойства точного решения, является более устойчивой по шагу аппроксимации и более точно сохраняет гамильтониан системы на большом интервале интегрирования, чем численные схемы метода Верле второго порядка.

Ключевые слова: гамильтоновы системы уравнений, симплектические разностные схемы, производящие функции, молекулярная динамика

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 15-01-06055А.

UDC: 519.622, 004.021, 004.942

Procedure for constructing of explicit, implicit and symmetric symplectic schemes for numerical solving of Hamiltonian systems of equations

B. Batgerel^{1,2,a}, E. G. Nikonov^{1,b}, I. V. Puzynin^{1,c}

¹Joint Institute for Nuclear Research,

6 Jolio-Curie st., Dubna, Moscow region, 141980, Russia

²The Mongolian University of Science and Technology,

8th khoroo, Baga toiruu 34, Sukhbaatar district Ulaanbaatar, 14191, Mongolia

E-mail: ^a b.batgerel@yahoo.com, ^b e.nikonov@jinr.ru, ^c ipuzynin@jinr.ru

Received 05.04.2016, after completion – 11.11.2016.

Accepted for publication 16.11.2016.

Equations of motion in Newtonian and Hamiltonian forms are used for classical molecular dynamics simulation of particle system time evolution. When Newton equations of motion are used for finding of particle coordinates and velocities in N -particle system it takes to solve $3N$ ordinary differential equations of second order at every time step. Traditionally numerical schemes of Verlet method are used for solving Newtonian equations of motion of molecular dynamics. A step of integration is necessary to decrease for Verlet numerical schemes steadiness conservation on sufficiently large time intervals. It leads to a significant increase of the volume of calculations. Numerical schemes of Verlet method with Hamiltonian conservation control (the energy of the system) at every time moment are used in the most software packages of molecular dynamics for numerical integration of equations of motion. It can be used two complement each other approaches to decrease of computational time in molecular dynamics calculations. The first of these approaches is based on enhancement and software optimization of existing software packages of molecular dynamics by using of vectorization, parallelization and special processor construction. The second one is based on the elaboration of efficient methods for numerical integration for equations of motion. A procedure for constructing of explicit, implicit and symmetric symplectic numerical schemes with given approximation accuracy in relation to integration step for solving of molecular dynamic equations of motion in Hamiltonian form is proposed in this work. The approach for construction of proposed in this work procedure is based on the following points: Hamiltonian formulation of equations of motion; usage of Taylor expansion of exact solution; usage of generating functions, for geometrical properties of exact solution conservation, in derivation of numerical schemes. Numerical experiments show that obtained in this work symmetric symplectic third-order accuracy scheme conserves basic properties of the exact solution in the approximate solution. It is more stable for approximation step and conserves Hamiltonian of the system with more accuracy at a large integration interval then second order Verlet numerical schemes.

Keywords: Hamiltonian systems of equations, symplectic difference schemes, generating functions, molecular dynamics

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2016, vol. 8, no. 6, pp. 861–871 (Russian).

This work was supported by RFBR grant No 15-01-06055A.

Введение

В задачах молекулярной динамики для моделирования эволюции системы частиц зачастую используются уравнения движения в ньютоновской формулировке. Для получения координат и скоростей системы, состоящей из N частиц, требуется на каждом временном шаге в трехмерном случае решить $3N$ обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка. Традиционно для решения уравнений движения молекулярной динамики используются численные схемы метода Верле [Hairer et al., 2006]. Для сохранения устойчивости этих схем на достаточно большом интервале по времени, как правило, необходимо уменьшать величину шага интегрирования, что приводит к значительному увеличению объема вычислений. В большинстве современных пакетов программ молекулярной динамики для численного интегрирования уравнений движения используют схемы метода Верле с контролем сохранения гамильтониана (энергии системы) по времени.

Для уменьшения времени вычислений при молекулярно-динамических расчетах можно использовать два дополняющих друг друга подхода. Первый основан на совершенствовании и программной оптимизации существующих пакетов с использованием следующих средств:

- векторизация, как например, в пакете DL-POLY [Холмуродов и др., 2003];
- распараллеливание и ускорение межпроцессорных обменов на многопроцессорных системах [Dushanov et al., 2009];
- Разработка спецпроцессоров [Ohmura et al., 2014].

Второй подход основан на разработке эффективных методов численного интегрирования уравнений движения.

В данной работе предлагается процедура построения численных схем для решения уравнений движения молекулярной динамики. При помощи численного эксперимента показано, что построенные численные схемы сохраняют в приближенном решении основные свойства точного решения и обладают более высоким порядком аппроксимации, чем схемы метода Верле, а также являются устойчивыми по шагу аппроксимации.

Разработка предлагаемой процедуры основана на следующих предпосылках:

- использование гамильтоновой формулировки уравнений движения молекулярной динамики;
- разложение точного решения в ряд Тейлора [Akishin et al., 1997]; при этом возможно применение аппарата компьютерной алгебры для получения аналитических выражений для производных ряда Тейлора;
- использование для вывода численных схем аппарата производящих функций для сохранения геометрических свойств точного решения [Hairer et al., 2006].

Целью данной работы является построение симметричных симплектических численных схем интегрирования гамильтоновых систем уравнений более высокого порядка точности, чем схемы метода Верле. Данные схемы, как показывают численные эксперименты, позволяют значительно увеличить шаг интегрирования без потери устойчивости и, соответственно, уменьшить общий объем вычислений.

Постановка задачи

Движение системы N материальных точек в поле с потенциалом $V(\mathbf{q})$, где $\mathbf{q} = (q_1, \dots, q_d)^T$ — координата частицы, $d = 3N$ — размерность пространства координат, может быть описано с использованием системы гамильтоновых уравнений

$$\dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H(\mathbf{p}, \mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}}, \quad (1)$$

$$\dot{\mathbf{q}} = \frac{\partial H(\mathbf{p}, \mathbf{q})}{\partial \mathbf{p}} \quad (2)$$

с начальными условиями

$$\mathbf{p}(0) = \mathbf{p}^0, \quad \mathbf{q}(0) = \mathbf{q}^0. \quad (3)$$

Здесь $\mathbf{p} = (p_1, \dots, p_d)^T$ — импульс частицы, $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ — гамильтониан системы:

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{2} \mathbf{p}^T M(\mathbf{q}) \mathbf{p} + V(\mathbf{q}), \quad (4)$$

$M(\mathbf{q})$ — симметричная и положительно-определенная матрица масс [Hairer et al., 2006].

Гамильтонова система уравнений движения эквивалентна уравнениям, полученным в рамках ньютоновского формализма, если силы, действующие на материальные точки, представить в виде $\mathbf{f}(\mathbf{q}) = \nabla V(\mathbf{q})$ и стандартным образом перейти от дифференциального уравнения Ньютона второго порядка заменой переменных к системе уравнений первого порядка:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{p}} &= -\mathbf{f}(\mathbf{q}), \\ \dot{\mathbf{q}} &= \mathbf{p}. \end{aligned} \quad (5)$$

Процедура построения симплектических разностных схем

В гамильтоновой механике каноническое преобразование — это преобразование канонических переменных и гамильтониана:

$$\varphi : (\mathbf{p}, \mathbf{q}) \mapsto (\mathbf{P}, \mathbf{Q}), \quad (6)$$

не меняющее общий вид уравнений Гамильтона [Гантмахер, 2001].

Каноническое преобразование является симплектическим, если якобиан $\varphi'(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ удовлетворяет тождеству

$$\varphi'(\mathbf{p}, \mathbf{q})^T J \varphi'(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = J, \quad J = \begin{pmatrix} \mathbf{0}_d & \mathbf{I}_d \\ -\mathbf{I}_d & \mathbf{0}_d \end{pmatrix},$$

\mathbf{I}_d — единичная матрица размерности d .

По теореме Пуанкаре [Hairer et al., 2006], каноническое преобразование взаимно однозначно определяется производящей функцией S , которая является решением уравнения Гамильтона–Якоби и может быть выражена через любую пару из четырех переменных $\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{P}, \mathbf{Q}$ и время t . Если в качестве независимых переменных выбрана пара \mathbf{q}, \mathbf{Q} , то полный дифференциал S будет иметь вид

$$dS = \mathbf{P}^T d\mathbf{Q} - \mathbf{p}^T d\mathbf{q}. \quad (7)$$

Для получения процедуры построения симплектических разностных схем использовалась производящая функция $S = S(\mathbf{q}, \mathbf{Q}, t)$, удовлетворяющая (7) и соотношениям

$$\mathbf{p} = -\frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}, \mathbf{Q}), \quad \mathbf{P} = \frac{\partial S}{\partial \mathbf{Q}}(\mathbf{q}, \mathbf{Q}). \quad (8)$$

Здесь \mathbf{p}, \mathbf{q} — значения обобщенных координат и импульсов в начальный момент времени, \mathbf{P}, \mathbf{Q} — в момент времени t . Для получения процедуры построения симплектических разностных схем была выбрана производящая функция первого типа $S = S_1(\mathbf{q}, \mathbf{Q}, t)$. При построении численных схем использованы следующие обозначения:

$$\begin{aligned} t &= t_k, & \mathbf{p} &= \mathbf{p}^k, & \mathbf{q} &= \mathbf{q}^k, \\ t &= t_{k+1} = t_k + h, & \mathbf{P} &= \mathbf{p}^{k+1}, & \mathbf{Q} &= \mathbf{q}^{k+1}. \end{aligned}$$

Для производящей функции используются следующие обозначения: $S_{m,1}$ — в случае разложения в ряд Тейлора «вперед» и $S_{m,2}$ — в случае разложения в ряд Тейлора «назад». Здесь m — порядок аппроксимации точного решения.

Схема с разложением в ряд Тейлора «вперед»

1. Представить \mathbf{q}^{k+1} в виде разложения в ряд Тейлора в точке t_k с точностью до $O(h^{m+1})$.
2. Заменить \mathbf{p}^k в разложении разностной производной от \mathbf{q} , кроме второго члена разложения. Получим уравнение относительно \mathbf{q}^{k+1} .
3. Решить полученное в предыдущем пункте, вообще говоря, нелинейное, для схем выше 3-го порядка аппроксимации, уравнение относительно \mathbf{q}^{k+1} . В случае нелинейного уравнения можно использовать метод Ньютона.
4. Выразить \mathbf{p}^k через \mathbf{q}^k и \mathbf{q}^{k+1} с помощью полученного в первом пункте разложения в ряд Тейлора.
5. Найти производящую функцию $S_{m,1} = S(\mathbf{q}^k, \mathbf{q}^{k+1})$ путем интегрирования полученного в предыдущем пункте выражения по \mathbf{q}^k .
6. Найти \mathbf{p}^{k+1} с помощью равенства

$$\mathbf{p}^{k+1} = \frac{\partial S_{m,1}}{\partial \mathbf{q}^{k+1}} \quad (9)$$

путем дифференцирования.

Схема с разложением в ряд Тейлора «назад»

1. Представить \mathbf{q}^k в виде разложения в ряд Тейлора в точке t_{k+1} с точностью до $O(h^{m+1})$.
2. Заменить \mathbf{p}^{k+1} в разложении разностной производной от \mathbf{q} , кроме второго члена разложения.
3. Выразить \mathbf{p}^{k+1} через \mathbf{q}^k и \mathbf{q}^{k+1} с помощью полученного выше разложения в ряд Тейлора.
4. Найти производящую функцию $S_{m,2} = S(\mathbf{q}^k, \mathbf{q}^{k+1})$ путем интегрирования полученного в предыдущем пункте выражения по \mathbf{q}^{k+1} .
5. Выразить \mathbf{p}^k через \mathbf{q}^k и \mathbf{q}^{k+1} с помощью равенства

$$\mathbf{p}^k = -\frac{\partial S_{m,2}}{\partial \mathbf{q}^k} \quad (10)$$

путем дифференцирования.

6. Решить, вообще говоря, нелинейное относительно \mathbf{q}^{k+1} уравнение (10). Везде в дальнейшем используется метод Ньютона.
7. Получить \mathbf{p}^{k+1} при помощи полученного во втором пункте выражения, используя известное значение \mathbf{q}^k и полученное в предыдущем пункте значение \mathbf{q}^{k+1} .

Явная и неявная симплектические разностные схемы 3-го порядка

Явные и неявные численные схемы второго порядка, полученные при помощи процедур (9)–(10), могут быть приведены к известным схемам Эйлера и Верле. Рассмотрим построение явных и неявных схем третьего порядка с использованием производящей функции $S = S(\mathbf{q}, \mathbf{Q}, t)$. Для нахождения величин \mathbf{p}^k и \mathbf{p}^{k+1} используем разложения точного решения для канонической переменной \mathbf{q} в ряд Тейлора для явной схемы «вперед», для неявной «назад».

Явная схема.

$$\mathbf{q}^{k+1} = \mathbf{q}^k + h\mathbf{p}^k - \frac{h^2}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}^k) - \frac{h^3}{6}\nabla\mathbf{f}(\mathbf{q}^k) \cdot \boxed{\mathbf{p}^k} + O(h^4).$$

Если заменить \mathbf{p}^k в последнем члене ряда разностным отношением

$$\mathbf{p}^k = \frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h} + O(h),$$

то получим явную схему 3-го порядка:

$$\mathbf{p}^k = \frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h} + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}^k) + \frac{h^2}{6}\nabla\mathbf{f}(\mathbf{q}^k) \cdot \frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h}, \quad (11)$$

$$S_{3,1} = \frac{h}{2} \left(\frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h} \right)^2 - \frac{h}{3} [2V(\mathbf{q}^k) + V(\mathbf{q}^{k+1})] - \frac{h^2}{6}\mathbf{f}(\mathbf{q}^k) \cdot \frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h}, \quad (12)$$

$$\mathbf{p}^{k+1} = \frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h} - \frac{h}{6} [\mathbf{f}(\mathbf{q}^k) + 2\mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1})]. \quad (13)$$

Введя обозначение

$$\Theta^k = \left[\mathbf{I} + \frac{h^2}{6}\nabla\mathbf{f}(\mathbf{q}^k) \right]^{-1},$$

получим формулы для вычисления \mathbf{p} и \mathbf{q} на следующем временном шаге:

$$\mathbf{p}^{k+1/2} = \mathbf{p}^k - \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}^k),$$

$$\tilde{\mathbf{p}}^{k+1/2} = \Theta^k \mathbf{p}^{k+1/2},$$

$$\mathbf{q}^{k+1} = \mathbf{q}^k + h\tilde{\mathbf{p}}^{k+1/2},$$

$$\mathbf{p}^{k+1} = \tilde{\mathbf{p}}^{k+1/2} - \frac{h}{6} [\mathbf{f}(\mathbf{q}^k) + 2\mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1})].$$

Неявная схема. Для получения неявной схемы представим значение для переменной \mathbf{q} на k -м шаге в виде разложения в ряд Тейлора «назад»:

$$\mathbf{q}^k = \mathbf{q}^{k+1} - h\mathbf{p}^{k+1} - \frac{h^2}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1}) + \frac{h^3}{6}\nabla\mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1}) \cdot \mathbf{p}^{k+1} + O(h^4).$$

Представим \mathbf{p}^{k+1} в последнем члене разложения в виде разностной производной

$$\mathbf{p}^{k+1} = \frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h} + O(h).$$

В результате получим следующее выражение для \mathbf{p}^{k+1} :

$$\mathbf{p}^{k+1} = \frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h} - \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1}) + \frac{h^2}{6}\nabla\mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1}) \cdot \frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h}. \quad (14)$$

После интегрирования по \mathbf{q}^{k+1} получаем производящую функцию $S_{3,2}$:

$$S_{3,2} = \frac{h}{2} \left(\frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h} \right)^2 - \frac{h}{3} [V(\mathbf{q}^k) + 2V(\mathbf{q}^{k+1})] + \frac{h^2}{6}\mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1}) \cdot \frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h}; \quad (15)$$

дифференцированием по \mathbf{q}^k с учетом знака находим выражение для \mathbf{p}^k :

$$\mathbf{p}^k = \frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h} + \frac{h}{6} [2\mathbf{f}(\mathbf{q}^k) + \mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1})]. \quad (16)$$

Далее аналогично явной схеме получаем формулы для неявной схемы третьего порядка:

$$\begin{aligned} \mathbf{p}^{k+1/2} &= \mathbf{p}^k - \frac{h}{2} \mathbf{f}(\mathbf{q}^k), \\ \tilde{\mathbf{q}}^{k+1} &= \mathbf{q}^k + h \mathbf{p}^{k+1/2}, \\ \mathbf{F}(\mathbf{q}^{k+1}) &= \tilde{\mathbf{q}}^{k+1}, \\ \mu^{k+1} &= \frac{h}{6} [\mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1}) - \mathbf{f}(\mathbf{q}^k)], \\ \theta^{k+1} &= \mathbf{I} + \frac{h^2}{6} \nabla \mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1}), \\ \tilde{\mathbf{p}}^{k+1/2} &= \theta^{k+1} (\mathbf{p}^{k+1/2} - \mu^{k+1}), \\ \mathbf{p}^{k+1} &= \tilde{\mathbf{p}}^{k+1/2} - \frac{h}{2} \mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1}), \end{aligned}$$

где функция $\mathbf{F}(\mathbf{q}^{k+1})$ определяется по формуле

$$\mathbf{F}(\mathbf{q}^{k+1}) = \mathbf{q}^{k+1} + \frac{h^2}{6} [\mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1}) - \mathbf{f}(\mathbf{q}^k)].$$

Симметричные симплектические разностные схемы

Для построения симметричных симплектических разностных схем рассмотрим однопараметрическое семейство производящих функций следующего вида:

$$S_m(\alpha) = \alpha S_{m,1} + (1 - \alpha) S_{m,2}. \quad (17)$$

Здесь $\alpha : 0 \leq \alpha \leq 1$, $S_{m,1}$ и $S_{m,2}$ — производящие функции, полученные при помощи процедур (9) и (10) соответственно. Каждая из этих производящих функций $S_m(\alpha)$ порождает симплектическую разностную схему m -го порядка. Если $\alpha = 1/2$, то мы получаем процедуры построения симметричных симплектических разностных схем.

Симметричная симплектическая схема для $m = 3$

$$\begin{aligned} S_{3,3} &= \frac{h}{2} \left(\frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h} \right)^2 - \frac{h}{2} [V(\mathbf{q}^k) + V(\mathbf{q}^{k+1})] + \frac{h^2}{12} [\mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1}) - \mathbf{f}(\mathbf{q}^k)] \cdot \frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h}, \\ \mathbf{p}^k &= \frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h} + \frac{h}{12} [5\mathbf{f}(\mathbf{q}^k) + \mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1})] + \frac{h^2}{12} \nabla \mathbf{f}(\mathbf{q}^k) \cdot \frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h}, \\ \mathbf{p}^{k+1} &= \frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h} - \frac{h}{12} [\mathbf{f}(\mathbf{q}^k) + 5\mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1})] + \frac{h^2}{12} \nabla \mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1}) \cdot \frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h}. \end{aligned} \quad (18)$$

Численные эксперименты

Численные эксперименты выполнены для сравнительного анализа схемы метода Верле и симметричной симплектической схемы третьего порядка аппроксимации (18) на примере задачи Кеплера [Hairer et al., 2006]. В ней движение двух материальных точек описывается гамильтонианом следующего вида

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{2} (p_1^2 + p_2^2) - \frac{1}{\sqrt{q_1^2 + q_2^2}}.$$

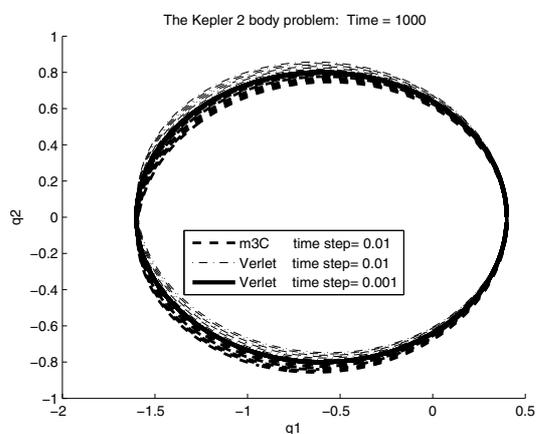
Численные расчеты проводились при следующих параметрах:

- 1) $h = 0.01$, $T = 1000$;
- 2) $h = 0.05$, $T = 1000$;
- 3) $h = 0.10$, $T = 1000$;
- 4) $h = 0.20$, $T = 5000$.

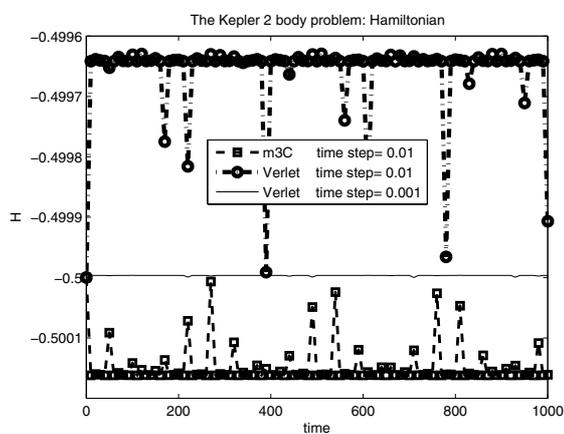
Здесь h — шаг по времени, T — граница интервала времени $[0, T]$ эволюции системы.

Для каждого фиксированного шага по времени h сравнивались результаты расчетов, полученные с использованием метода Верле, и результаты, полученные с использованием построенной в работе симметричной симплектической численной схемы 3-го порядка. В качестве «точного» решения использовались результаты расчетов по методу Верле с шагом по времени, равным $h/10$.

Результаты моделирования представлены на рис. 1–5.

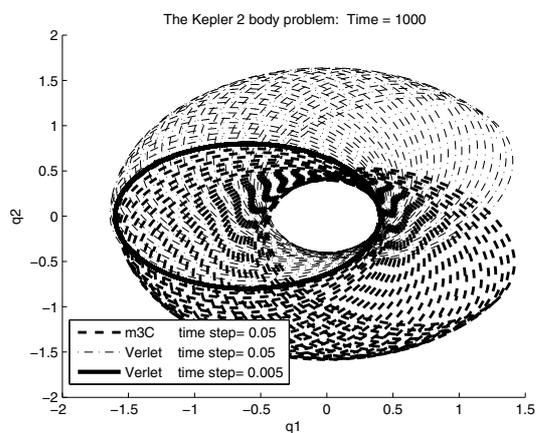


(а) Фазовые траектории

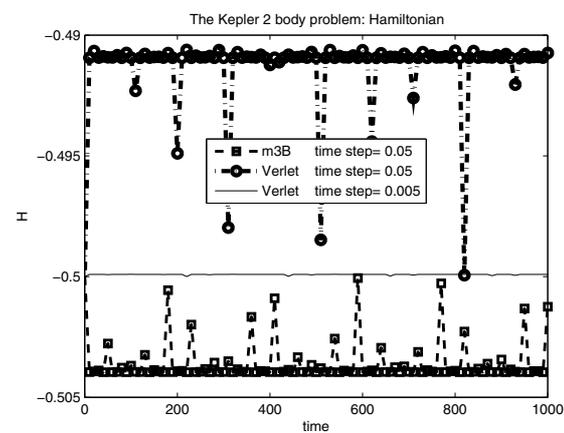


(б) Зависимость гамильтониана от времени

Рис. 1. Симметричная схема, схема Верле при $h = 0.01$ и схема Верле при $h = 0.001$

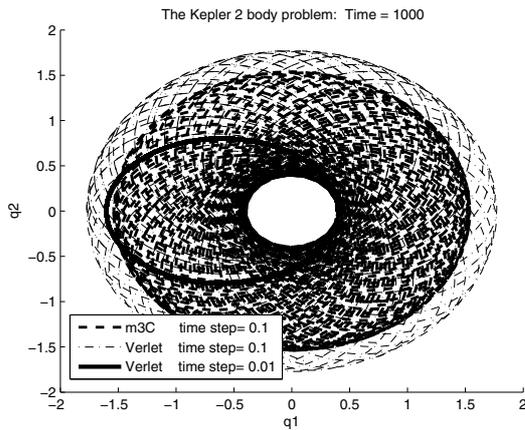


(а) Фазовые траектории

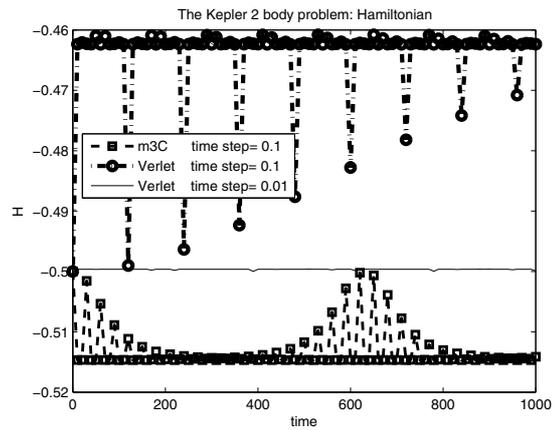


(б) Зависимость гамильтониана от времени

Рис. 2. Симметричная схема, схема Верле при $h = 0.05$ и схема Верле при $h = 0.005$

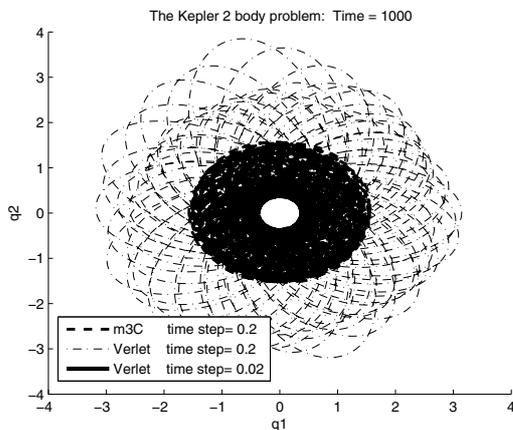


(а) Фазовые траектории

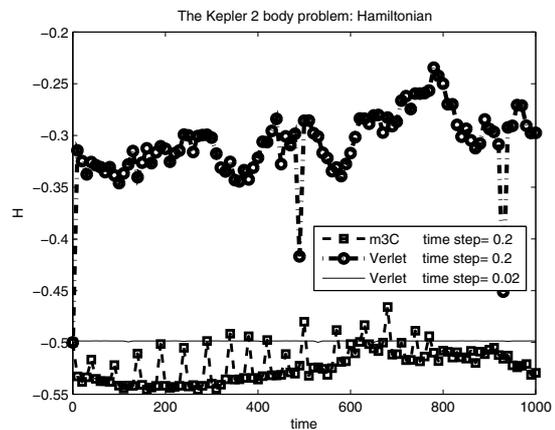


(б) Зависимость гамильтониана от времени

Рис. 3. Симметричная схема, схема Верле при $h = 0.1$ и схема Верле при $h = 0.01$



(а) Фазовые траектории



(б) Зависимость гамильтониана от времени

Рис. 4. Симметричная схема, схема Верле при $h = 0.2$ и схема Верле при $h = 0.02$

Задача Кеплера. Симметричная схема

Сравнение результатов расчетов с использованием симметричной симплектической численной схемы третьего порядка показало следующее. Вплоть до величины шага численного интегрирования по времени $h = 0.2$ включительно симметричная симплектическая схема третьего порядка существенно более точна по расчетным фазовым траекториям и по отклонениям значений гамильтониана от начального значения на всем интервале интегрирования, чем схема Верле второго порядка (рис. 1–4).

Задача Кеплера. Симметричная схема. $T = 5000$

В численных расчетах, которые проводились на интервале эволюции системы $T = 5000$, симметричная симплектическая численная схема третьего порядка продемонстрировала существенно большую точность и устойчивость при максимальной, используемой в численных экспериментах, величине шага $h = 0.2$. При этом схема Верле при данной величине шага становится неустойчивой уже начиная с интервалов порядка $T = 4000$ (рис. 5). Вычислительные затраты

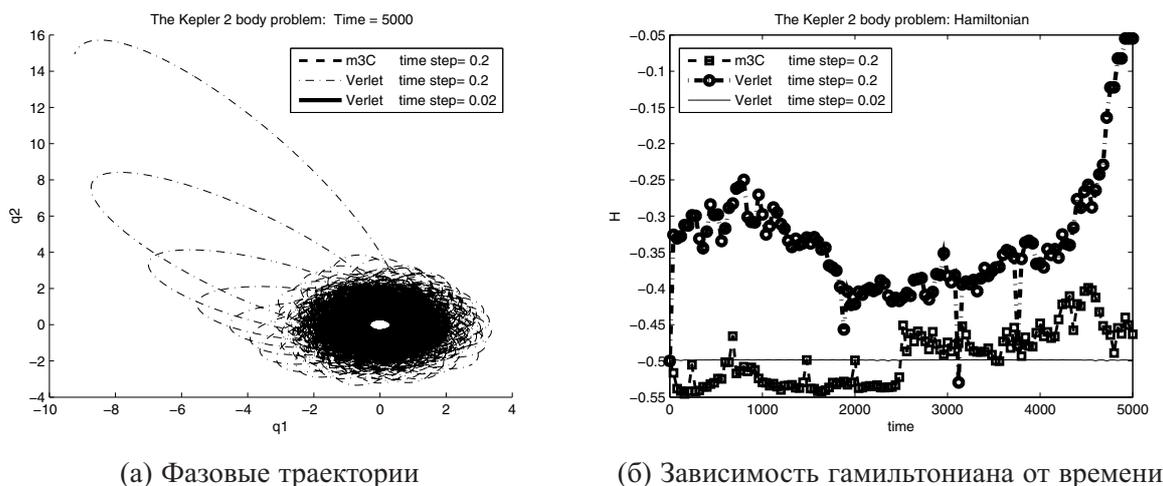


Рис. 5. Симметричная схема, схема Верле при $h = 0.2$ и схема Верле при $h = 0.02$

в методе Ньютона при вычислениях для неявной части симметричной схемы не превышали 3 итераций при точности вычислений $\epsilon = 10^{-10}$.

Заключение

1. Предложен подход к построению симметричных симплектических численных схем интегрирования уравнений движения метода молекулярной динамики в гамильтоновой формулировке.
2. Описан алгоритм получения симметричных симплектических разностных схем заданного порядка аппроксимации с использованием аппарата производящих функций.
3. Приведены симметричные симплектические разностные схемы 3-го порядка аппроксимации. Схемы более высокого порядка аппроксимации требуют более сложного вывода и в дальнейшем могут быть получены с использованием аппарата компьютерной алгебры.
4. Проведены численные эксперименты, показавшие, что полученные на основе разработанного подхода симметричные симплектические разностные схемы третьего порядка аппроксимации сохраняют устойчивость для достаточно больших значений шага ($h = 0.2$) и интервала интегрирования ($T = 5000$) в отличие от метода Верле. Они с более высокой точностью сохраняют гамильтониан системы на всем интервале интегрирования.

Список литературы (References)

- Гантмахер Ф. Р. Лекции по аналитической механике. — М.: Физматлит, 2001. — 264 с.
Gantmakher F. R. Lectii po analiticheskoy mekhanike. — M.: Fizmatlit, 2001. — 264 s. (in Russian).
- Холмуродов Х. Т. и др. Методы молекулярной динамики для моделирования физических и биологических процессов // Физика элементарных частиц и атомного ядра. — Дубна, 2003. — Т. 34, № 2021. — С. 1–16.
Kholmurodov Kh. T. et al. Metody molekuliarnoy dinamiki dlia modelirovaniya fizicheskikh i biologicheskikh processov // Fizika elementarnykh chastic i atomnogo yadra. — 2003. — Vol. 34, No. 2021. — S. 1–16 (in Russian).

-
- Akishin P. G., Puzynin I. V., Vinitsky S. I.* A hybrid numerical method for analysis of dynamics of the classical Hamiltonian systems // *Comp. Math. Applic.* — 1997. — Vol. 34, No. 2–4. — P. 45–73.
- Dushanov E. et al.* JINR CICC computational chemistry and nanotechnology problems: DL-POLY performance for different communication architectures // *PEPAN Lett.* — Vol. 6, No. 3(152). — Dubna, 2009. — P. 407–417.
- Hairer E., Lubich C., Wanner G.* *Geometric Numerical Integration*. Second edition. — Berlin: Springer, 2006. — 644 p.
- Ohmura I., Morimoto G., Ohno Y., Hasegawa A., Taiji M.* MDGRAPE-4: a special-purpose computer system for molecular dynamics simulations // *Philos Trans A Math Phys Eng Sci.* — 2014. — Vol. 372, No. 2. — P. 472–515.