

УДК 681.324

РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ. 1. СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ УСТОЙЧИВОСТИ, ТОЧНОСТИ И ЭКОНОМИЧНОСТИ

В. Н. Софронов, К. С. Мокина, В. Е. Шемарулин
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Проведено исследование точности наиболее распространенных разностных схем молекулярной динамики. Показано, что наилучшими качествами по соотношению *точность — экономичность* обладают разностные схемы, сохраняющие каноничность фазового потока.

Предложена трехстадийная разностная схема RKN4 четвертого порядка аппроксимации. Использование этой схемы позволяет уменьшить (на 3-4 порядка) амплитудную ошибку и дисбаланс полной энергии по сравнению с самой распространенной в расчетах задач молекулярной динамики схемой Verlet. Таким образом, появляется возможность при сохранении заданной точности существенно уменьшать время расчетов.

Ключевые слова: молекулярная динамика, гамильтоновы системы, фазовая ошибка, метод расщепления, сохранение каноничности фазового потока, разностные схемы молекулярной динамики.

Введение

Метод классической молекулярной динамики (МД) основан на интегрировании уравнений движения Ньютона для ансамбля частиц. Данный метод используется в различных областях исследований (моделирование свойств жидкостей и твердых тел, конформационный анализ белковых молекул, моделирование динамики звездных скоплений и пр.).

В методе МД движение частиц описывается гамильтоновой системой с заданным потенциалом взаимодействия:

$$H = \sum_i \frac{|\vec{p}_i|^2}{2m_i} + \sum_i \sum_{j \neq i} U(\vec{r}_i, \vec{r}_j),$$

где \vec{r}_i , $\vec{p}_i = m_i \vec{u}_i$ — соответственно радиус-вектор и импульс i -й частицы; $U(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$ — потенциал взаимодействия частиц i, j .

Если потенциал $U(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$ зависит только от расстояния между частицами и не зависит от их взаимного расположения, то уравнения движения имеют вид [1]

$$\frac{d\vec{r}_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} = \vec{u}_i, \quad \frac{d\vec{p}_i}{dt} = m_i \frac{d\vec{u}_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} = \sum_{j \neq i} \frac{\vec{r}_i - \vec{r}_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} f(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|), \quad i = 1, 2, \dots, N,$$

где $f(r) = -\frac{dU(r)}{dr}$ — сила взаимодействия между частицами, соответствующая потенциалу $U(r)$. Поскольку каждая пара частиц взаимодействует независимо от других, естественным методом численного решения уравнений движения является метод расщепления. На каждом этапе расщепления решаются уравнения движения для двух частиц и определяются изменения координат и скоростей этих частиц за счет парного взаимодействия.

Пусть известны $(m, \vec{r}, \vec{u})_i^n, (m, \vec{r}, \vec{u})_j^n$ — массы, координаты и скорости частиц i, j в момент времени $t = t^n$. Определим изменение координат и скоростей частиц в результате их парного взаимодействия за время $\Delta t = t^{n+1} - t^n$, т. е. решим систему уравнений

$$\frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{u}_i; \quad m_i \frac{d\vec{u}_i}{dt} = \frac{\vec{r}_i - \vec{r}_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} f(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|); \quad (1)$$

$$\frac{d\vec{r}_j}{dt} = \vec{u}_j; \quad m_j \frac{d\vec{u}_j}{dt} = \frac{\vec{r}_j - \vec{r}_i}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} f(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|). \quad (2)$$

В эквивалентной форме система (1), (2) представлена уравнениями движения центра масс и уравнениями относительного движения частиц:

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{r}_c}{dt} &= \vec{u}_c; & \frac{d\vec{u}_c}{dt} &= 0; \\ \frac{d\vec{r}}{dt} &= \vec{u}; & \frac{d\vec{u}}{dt} &= \vec{\varphi}(\vec{r}) = \frac{\vec{r}}{Mr} f(r), \end{aligned} \quad (3)$$

где $\vec{r}_c = \frac{m_i \vec{r}_i + m_j \vec{r}_j}{m_i + m_j}$; $\vec{u}_c = \frac{m_i \vec{u}_i + m_j \vec{u}_j}{m_i + m_j}$; $M = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j}$; $\vec{r} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$; $r = |\vec{r}|$; $\vec{u} = \vec{u}_i - \vec{u}_j$.

Пусть с использованием какой-либо разностной схемы получено решение системы уравнений (3) на момент времени $t = t^{n+1}$. Тогда изменение координат и скоростей частиц i, j в результате их парного взаимодействия за время $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ определяется из соотношений

$$\begin{aligned} \delta \vec{r}_{ij} &= \frac{M}{m_i} \delta \vec{r} = \frac{M}{m_i} (\vec{r}^{n+1} - \vec{r}^n - \Delta t \vec{u}^n); & \delta \vec{u}_{ij} &= \frac{M}{m_i} \delta \vec{u} = \frac{M}{m_i} (\vec{u}^{n+1} - \vec{u}^n); \\ \delta \vec{r}_{ji} &= -\frac{M}{m_j} \delta \vec{r} = -\frac{M}{m_j} (\vec{r}^{n+1} - \vec{r}^n - \Delta t \vec{u}^n); & \delta \vec{u}_{ji} &= -\frac{M}{m_j} \delta \vec{u} = -\frac{M}{m_j} (\vec{u}^{n+1} - \vec{u}^n). \end{aligned}$$

Решение на момент времени $t = t^{n+1}$ вычисляется с учетом вклада всех парных взаимодействий:

$$\vec{r}_i^{n+1} = \vec{r}_i^n + \Delta t \vec{u}_i^n + \sum_{i \neq j} \delta \vec{r}_{ij}; \quad \vec{u}_i^{n+1} = \vec{u}_i^n + \sum_{i \neq j} \delta \vec{u}_{ij}.$$

Рассмотрим методы решения системы уравнений (3). Многочисленные публикации показывают, что во всех практических расчетах МД используется простейшая схема Verlet [2] (либо аналогичные ей, например схема Leap_frog). Выяснилось [3], что формальное увеличение порядка аппроксимации не приводит к существенному увеличению точности.

На рис. 1 приведена зависимость времени вычисления от амплитудной ошибки для задачи о гармоническом осцилляторе, взятая из [3]. В качестве амплитудной ошибки выбрано отклонение в норме L_2 положения частицы от точного значения за время, равное 1000 периодов:

$$\delta_{amp} = \frac{1}{L} \sqrt{\frac{1}{T} \int_{t=0}^{t=T} (r - r_a)^2 dt},$$

$$L = \frac{u_0}{\omega}, \quad T = 1000 \frac{2\pi}{\omega}.$$

Нижняя кривая на этом рисунке соответствует расчету со схемой Verlet. По соотношению *точность — экономичность* эта простейшая схема превосходит схемы с более высоким порядком аппроксимации.

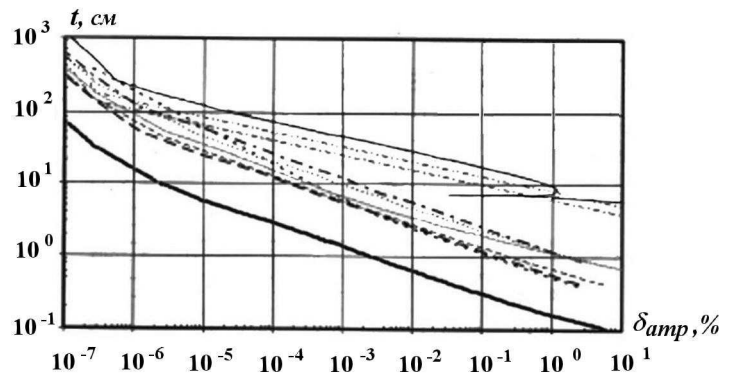


Рис. 1. Зависимость времени вычисления от амплитудной ошибки при расчетах с различными схемами (Pentium (R) 4 CPU, 2 GHz, 256 MB RAM): — — CD, PV; - - - — T-1/6; ··· — D-1/12; ···· — PC-3; - - - - — PC-4; — — — — PC-5; — — — — CHIN; - - - - — OMF30; — — — — OMF32; — — — — FR

Цель работы состояла в поиске алгоритмов, которые позволили бы увеличить точность расчетов и порядок сходимости. Начнем с краткого обзора известных авторам схем МД.

Разностные схемы МД

Полушаговая схема Verlet второго порядка аппроксимации в двух модификациях. Одна из модификаций схемы Verlet — схема CD:

$$\vec{u}^{n+1/2} = \vec{u}^{n-1/2} + \Delta t \vec{\varphi}^n; \quad \vec{r}^{n+1} = \vec{r}^n + \Delta t \vec{u}^{n+1/2}.$$

Вторая модификация — схема PV:

$$\vec{u}^{n+1} = \vec{u}^n + \Delta t \vec{\varphi}^{n+1/2}; \quad \vec{r}^{n+1/2} = \vec{r}^{n-1/2} + \Delta t \vec{u}^n.$$

Для данной схемы (ее модификаций) сеточные функции скорости и координат разнесены по времени, поэтому требуется стартовая процедура для вывода этих функций на нужный временной слой.

Схемы Хакимова [4] третьего порядка аппроксимации. Трехслойная схема T-1/12:

$$\begin{aligned} \vec{r}^{n+1} &= \vec{r}^n + \left(E - \frac{\Delta t^2}{12} \left(\frac{\partial \vec{\varphi}}{\partial \vec{r}} \right)^n \right)^{-1} \left[\Delta t \vec{u}^n + \frac{\Delta t^2}{12} (7\vec{\varphi}^n - \vec{\varphi}^{n-1}) \right]; \\ \vec{u}^{n+1} &= \vec{u}^n + \frac{\Delta t}{12} (8\vec{\varphi}^n + 5\vec{\varphi}^{n+1} - \vec{\varphi}^{n-1}). \end{aligned}$$

Двухслойная схема T-1/6:

$$\begin{aligned} \vec{r}^{n+1} &= \vec{r}^n + \Delta t \vec{u}^n + \frac{\Delta t^2}{2} \vec{\varphi}^n + \frac{\Delta t^3}{6} \left(\frac{\partial \vec{\varphi}}{\partial \vec{r}} \right)^n \vec{u}^n; \\ \vec{u}^{n+1} &= \left(E - \frac{\Delta t^2}{6} \left(\frac{\partial \vec{\varphi}}{\partial \vec{r}} \right)^{n+1} \right)^{-1} \left(\vec{u}^n + \Delta t \vec{\varphi}^n + \frac{\Delta t^2}{3} \left(\frac{\partial \vec{\varphi}}{\partial \vec{r}} \right)^n \vec{\varphi}^n \right). \end{aligned}$$

Трехслойная схема D-1/12:

$$\begin{aligned} \vec{r}^{n+1} &= \vec{r}^{n-1} + \left(E - \frac{\Delta t^2}{12} \left(\frac{\partial \vec{\varphi}}{\partial \vec{r}} \right)^n \right)^{-1} \left(\vec{r}^n - \vec{r}^{n-1} + \Delta t \vec{u}^n + \frac{\Delta t^2}{2} \vec{\varphi}^n \right); \\ \vec{u}^{n+1} &= \vec{u}^n + \frac{\Delta t}{12} (8\vec{\varphi}^n + 5\vec{\varphi}^{n+1} - \vec{\varphi}^{n-1}). \end{aligned}$$

Для трехслойных схем существует проблема согласования начальных данных, так как в начальный момент времени требуется каким-либо образом определить сеточные функции на двух временных слоях. По этой причине авторы ограничились рассмотрением двухслойной схемы T-1/6.

Многослойные схемы Гира. К данному классу относятся схемы *предиктор-корректор* третьего, четвертого и пятого порядков аппроксимации — РС3, РС4, РС5. Для схем этого класса на этапе *предиктор* вычисляются сеточные функции $\vec{r}^{(\nu)}$, $\nu = 0, 1, \dots, p$, являющиеся первыми p -производными координат (p — порядок схемы) [3]:

$$\left(\vec{r}^{(\nu)} \right)_{pred}^{n+1} = \left(\vec{r}^{(\nu)} \right)^n + \sum_{l=1}^{p-\nu} \frac{\Delta t^l \left(\vec{r}^{(\nu+l)} \right)^n}{l!}, \quad \nu = 0, 1, 2, \dots, p.$$

Далее величины, полученные на этапе *предиктор*, корректируются согласно формулам (α_ν — коэффициент разностной схемы)

$$\left(\vec{r}^{(\nu)} \right)^{n+1} \frac{\Delta t^\nu}{\nu!} = \left(\vec{r}^{(\nu)} \right)_{pred}^{n+1} \frac{\Delta t^\nu}{\nu!} + \alpha_\nu \frac{\Delta t^2}{2!} \left[\vec{\varphi} \left(\left(\vec{r}^{(0)} \right)_{pred}^{n+1} \right) - \left(\vec{r}^{(2)} \right)_{pred}^{n+1} \right], \quad \nu = 0, 1, 2, \dots, p.$$

Авторы исключили из рассмотрения эти схемы из-за проблемы согласования начальных данных.

Симплектические алгоритмы разложения. Так как система уравнений (3) может быть записана в виде

$$\frac{d\vec{X}}{dt} = \vec{F}(\vec{X}) = L\vec{X}, \quad \vec{X} = \begin{pmatrix} \vec{r} \\ \vec{u} \end{pmatrix}$$

($L = A + B = \vec{u} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + \vec{\varphi} \frac{\partial}{\partial \vec{u}}$ — оператор Лиувилля), то формальное представление решения имеет вид $\vec{X}^{n+1} = \exp(L\Delta t)\vec{X}^n$.

Симплектические алгоритмы разложения [5–7] основаны на представлении $\exp(L\Delta t)$ в виде произведения операторов, каждый из которых может быть проинтегрирован в явном виде.

Метод расщепления второго порядка аппроксимации (схема OMF [5]):

$$\exp(L\Delta t) = \exp(B\alpha_{OMF}\Delta t)\exp\left(\frac{A\Delta t}{2}\right)\exp(B(1-2\alpha_{OMF})\Delta t)\exp\left(\frac{A\Delta t}{2}\right)\exp(B\alpha_{OMF}\Delta t) + CO(\Delta t^3),$$

$$\text{где } \alpha_{OMF} = \frac{1}{2} - \frac{\sqrt[3]{36 + 2\sqrt{326}}}{12} + \frac{1}{6\sqrt[3]{36 + 2\sqrt{326}}}.$$

Метод расщепления четвертого порядка аппроксимации (схема FR [7]):

$$\exp(L\Delta t) = \exp(Bc_4\Delta t)\exp(Ad_3\Delta t)\exp(Bc_3\Delta t)\exp(Ad_2\Delta t) \times \\ \times \exp(Bc_2\Delta t)\exp(Ad_1\Delta t)\exp(Bc_1\Delta t) + CO(\Delta t^5),$$

где коэффициенты разложения принимают следующие значения:

$$c_1 = \alpha_{FR} + \frac{1}{2}; \quad c_2 = -\alpha_{FR}; \quad c_3 = -\alpha_{FR}; \quad c_4 = \alpha_{FR} + \frac{1}{2}; \\ d_1 = 2\alpha_{FR} + 1; \quad d_2 = -4\alpha_{FR} - 1; \quad d_3 = 2\alpha_{FR} + 1; \quad \alpha_{FR} = \frac{1}{6} \left(\sqrt[3]{2} + \frac{1}{\sqrt[3]{2}} \right).$$

Схема Розенброка. Данная схема (CROS) [8, 9] используется для численного решения жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений и имеет вид

$$\vec{X}^{n+1} = \vec{X}^n + \Delta t \operatorname{Re} \left((G^n)^{-1} \vec{F}^n \right) = \vec{X}^n + \Delta t \operatorname{Re} \left(\left(E - \alpha \Delta t \left(\frac{\partial \vec{F}}{\partial \vec{X}} \right)^n \right)^{-1} \vec{F}^n \right), \quad (4)$$

$$\text{где матрица Якоби } \frac{\partial \vec{F}}{\partial \vec{X}} = \begin{pmatrix} 0 & E \\ \frac{\partial \vec{\varphi}}{\partial \vec{r}} & 0 \end{pmatrix}.$$

Оптимальным значением параметра α является число $\alpha = (1+i)/2$. Для данной схемы требуется обращение матрицы G^n и вычисление реальной части вектора $(G^n)^{-1} \vec{F}^n$.

Матрицу G^n в правой части уравнения (4) представим в виде прямого (кронекерова) произведения [10]:

$$G^n = E - \alpha \Delta t \left(\frac{\partial \vec{F}}{\partial \vec{X}} \right)^n = E \otimes \begin{pmatrix} 1 & -\alpha \Delta t \\ -\frac{\alpha \Delta t}{M} f'_r & 1 \end{pmatrix}.$$

Опуская промежуточные выкладки, выпишем разностную схему в окончательном виде:

$$\vec{r}^{n+1} = \vec{r}^n + \Delta t \vec{u}^n - \frac{\Delta t}{1 + \left(\frac{\Delta t^2 (f'_r)^n}{2M} \right)^2} \left[\vec{u}^n \left(\Delta t^2 \frac{(f'_r)^n}{2M} \right)^2 - \frac{\vec{r}^n f^n \Delta t}{2M r^n} \left(1 - \frac{\Delta t^2 (f'_r)^n}{2M} \right) \right]; \\ \vec{u}^{n+1} = \vec{u}^n + \frac{\Delta t}{1 + \left(\frac{\Delta t^2 (f'_r)^n}{2M} \right)^2} \left[\frac{\vec{r}^n f^n}{M r^n} + \vec{u}^n \frac{\Delta t (f'_r)^n}{2M} \left(1 - \frac{\Delta t^2 (f'_r)^n}{2M} \right) \right]. \quad (5)$$

Из (5) следует, что схема CROS имеет второй порядок аппроксимации.

Разностные схемы, сохраняющие каноничность фазового потока. Ограничим класс рассматриваемых дифференциальных уравнений гамильтоновыми системами (3). Пусть преобразование (фазовый поток) $\vec{r} = \vec{r}(t, \vec{r}_0, \vec{p}_0)$, $\vec{p} = \vec{p}(t, \vec{r}_0, \vec{u}_0)$, $\vec{r}, \vec{p} \in R^s$, является решением уравнений Гамильтона с начальными данными $\vec{r}|_{t=0} = \vec{r}_0$, $\vec{p}|_{t=0} = \vec{p}_0$. Отличительной особенностью систем (3) является каноничность фазового потока. Это означает инвариантность относительно потока интегралов по заданным $2l$ ($1 \leq l \leq s$) многообразиям [1]. В частности, инвариантом движения является фазовый объем. Пусть $G = \frac{\partial(\vec{r}, \vec{p})}{\partial(\vec{r}_0, \vec{p}_0)}$ — матрица Якоби. Необходимое и достаточное условие каноничности — выполнение тождества (I_s — единичная матрица размером $s \times s$)

$$(G)^T JG = J, \quad J = \begin{pmatrix} 0 & -I_s \\ I_s & 0 \end{pmatrix}.$$

Естественно потребовать, чтобы и для разностного решения соответствующая матрица Якоби удовлетворяла условию

$$(G^{n+1})^T JG^{n+1} = J, \quad G^{n+1} = \frac{\partial(\vec{r}^{n+1}, \vec{p}^{n+1})}{\partial(\vec{r}^n, \vec{p}^n)}. \quad (6)$$

Разностные схемы с выполнением условия (6) получены в работах Ю. Б. Суриса [11, 12]. Вслед за [12] будем называть такие схемы *гамильтоновыми*. Рассмотрим системы с распадающимся гамильтонианом вида $H(\vec{r}, \vec{p}) = K(\vec{p}) + U(\vec{r})$ и воспользуемся результатом работы [11]. Класс m -стадийных разностных схем Рунге—Кутты—Нистрема (RKN)

$$\begin{aligned} \vec{\xi}^i &= \vec{r}^n + \Delta t \alpha_1 \vec{u}^n + \Delta t^2 \sum_{j=1}^m a_{ij} \vec{\varphi}(\vec{\xi}^i), \quad i = 1, 2, \dots, m; \\ \vec{r}^{n+1} &= \vec{r}^n + \Delta t \vec{u}^n + \Delta t^2 \sum_{j=1}^m \beta_j \vec{\varphi}(\vec{\xi}^j); \quad \vec{u}^{n+1} = \vec{u}^n + \Delta t \sum_{j=1}^m \gamma_j \vec{\varphi}(\vec{\xi}^j) \end{aligned}$$

порождает канонические отображения фазового пространства тогда и только тогда, когда

$$\begin{aligned} \beta_i &= \gamma_i (1 - \alpha_i), \quad i = 1, 2, \dots, m; \\ \gamma_i a_{ij} - \gamma_j a_{ji} + \gamma_i \gamma_j (\alpha_j - \alpha_i) &= 0, \quad i, j = 1, 2, \dots, m. \end{aligned} \quad (7)$$

Для систем с распадающимся гамильтонианом существуют явные схемы RKN, т. е. схемы, для которых матрица $\{a_{ij}\}$ — нижняя треугольная. Так, решением системы уравнений (7) является матрица со следующей структурой [11]:

$$a_{ij} = \begin{cases} 0, & 1 \leq i \leq j \leq m; \\ \gamma_j (\alpha_i - \alpha_j), & 1 \leq i < j \leq m. \end{cases}$$

Таким образом, параметрами m -стадийной разностной схемы RKN являются два вектора α_i , γ_i длиной m . Этими свободными параметрами можно распорядиться так, чтобы получить схему с максимально возможным порядком аппроксимации.

Для $m = 1$ существует однопараметрическое семейство схем ($\gamma_1 = 1$; α_1 — произвольный параметр). Если положить $\alpha_1 = 1$, то получим схему Verlet. Таким образом, данная схема принадлежит к классу схем, сохраняющих фазовый объем. Схеме RKN2 соответствует значение параметра $\alpha_1 = 1/2$.

Среди двухстадийных схем ($m = 2$) нет схем третьего порядка.

Рассмотрим класс трехстадийных схем ($m = 3$). В этом классе уже существует множество схем третьего порядка с однопараметрическим произволом [11]:

$$\alpha_2 = \frac{3\alpha_1 - 2}{3(2\alpha_1 - 1)}; \quad \alpha_3 = \alpha_1;$$

$$\gamma_2 = \frac{1 - 2\alpha_1}{2(\alpha_2 - \alpha_1)}; \quad \gamma_1 + \gamma_3 = \frac{2\alpha_2 - 1}{2(\alpha_2 - \alpha_1)}; \quad \gamma_1 - \gamma_3 = \frac{1}{3(1 - 2\alpha_1)},$$

где параметр α_1 — произвольный.

Попытаемся увеличить порядок аппроксимации, оставаясь в рамках трехстадийной схемы. Приступим к вычислению коэффициентов разностной схемы. Соответствующие уравнения могут быть получены с использованием степенных разложений точного и численного решений вплоть до нужного порядка. Коэффициенты разностной схемы четвертого порядка аппроксимации удовлетворяют следующей переопределенной системе:

$$\begin{aligned} \gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3 &= 1; \\ \alpha_1\gamma_1 + \alpha_2\gamma_2 + \alpha_3\gamma_3 &= \frac{1}{2}; \\ \alpha_1^2\gamma_1 + \alpha_2^2\gamma_2 + \alpha_3^2\gamma_3 &= \frac{1}{3}; \\ \gamma_1\gamma_2(\alpha_2 - \alpha_1) + \gamma_1\gamma_3(\alpha_3 - \alpha_1) + \gamma_2\gamma_3(\alpha_3 - \alpha_2) &= \frac{1}{6}; \\ \alpha_1^3\gamma_1 + \alpha_2^3\gamma_2 + \alpha_3^3\gamma_3 &= \frac{1}{4}; \\ \alpha_1\gamma_1\gamma_2(\alpha_2 - \alpha_1) + \alpha_1\gamma_1\gamma_3(\alpha_3 - \alpha_1) + \alpha_2\gamma_2\gamma_3(\alpha_3 - \alpha_2) &= \frac{1}{24}; \\ \alpha_2\gamma_1\gamma_2(\alpha_2 - \alpha_1) + \alpha_3\gamma_1\gamma_3(\alpha_3 - \alpha_1) + \alpha_3\gamma_2\gamma_3(\alpha_3 - \alpha_2) &= \frac{1}{8}. \end{aligned}$$

Казалось бы, вопрос о существовании трехстадийной схемы RKN четвертого порядка аппроксимации не может быть решен положительно. Однако анализ этой системы уравнений показывает, что имеет место случайное вырождение и переопределенная система имеет решение. Опуская промежуточные выкладки, запишем это решение:

$$\alpha_1 = \frac{3 - \sqrt{3}}{6}; \quad \alpha_2 = \frac{3 + \sqrt{3}}{6}; \quad \alpha_3 = \frac{3 - \sqrt{3}}{6};$$

$$\gamma_1 = \frac{3 + 2\sqrt{3}}{12}, \quad \gamma_2 = \frac{1}{2}; \quad \gamma_3 = \frac{3 - 2\sqrt{3}}{12}.$$

Ограничения на максимальный порядок точности p при фиксированном числе стадий m называют *порогами Бутчера* [13]. Известно, что для классических схем Рунге—Кутты, примененных к произвольной системе дифференциальных уравнений, существуют три порога Бутчера [14]. p -й порядок точности могут обеспечить схемы с числом стадий $m = m^*$, где

$$m^* = \begin{cases} p, & p \leq 4; \\ p + 1, & 4 < p \leq 6; \\ p + 2, & 6 < p. \end{cases}$$

Как видим, для гамильтоновых систем первый порог Бутчера может быть преодолен.

Будем учитывать вклад всех парных взаимодействий на каждом этапе трехстадийной разностной схемы. Запишем разностные уравнения в виде, удобном для программирования:

$$\vec{r}_i^1 = \vec{r}_i^n + \Delta t \alpha_1 \vec{u}_i^n, \quad \vec{u}_i^1 = \vec{u}_i^n + \frac{\Delta t \gamma_1}{m_i} \sum_{j \neq i} \frac{\vec{r}_i^1 - \vec{r}_j^1}{|\vec{r}_i^1 - \vec{r}_j^1|} f(|\vec{r}_i^1 - \vec{r}_j^1|);$$

$$\begin{aligned} \vec{r}_i^2 &= \vec{r}_i^1 + \Delta t (\alpha_2 - \alpha_1) \vec{u}_i^1, & \vec{u}_i^2 &= \vec{u}_i^1 + \frac{\Delta t \gamma_2}{m_i} \sum_{j \neq i} \frac{\vec{r}_i^2 - \vec{r}_j^2}{|\vec{r}_i^2 - \vec{r}_j^2|} f(|\vec{r}_i^2 - \vec{r}_j^2|); \\ \vec{r}_i^3 &= \vec{r}_i^2 + \Delta t (\alpha_3 - \alpha_2) \vec{u}_i^2; \\ \vec{u}_i^{n+1} &= \vec{u}_i^2 + \frac{\Delta t \gamma_3}{m_i} \sum_{j \neq i} \frac{\vec{r}_i^3 - \vec{r}_j^3}{|\vec{r}_i^3 - \vec{r}_j^3|} f(|\vec{r}_i^3 - \vec{r}_j^3|), & \vec{r}_i^{n+1} &= \vec{r}_i^3 + \Delta t (1 - \alpha_3) \vec{u}_i^{n+1}. \end{aligned}$$

Для каждого из этапов организуется цикл по всем частицам задачи. При такой форме записи не требуется хранение массивов, содержащих промежуточные значения сеточных функций.

Сравнение схем с точки зрения устойчивости

Проведем исследование устойчивости малых возмущений относительно положения равновесия для системы уравнений (3). Для такого исследования требуется линеаризация уравнений.

Для потенциала Морзе

$$U(r) = D \left[\exp(-2\beta(r - r_0)) - 2\exp(-\beta(r - r_0)) \right]$$

главные члены разложения в окрестности точки равновесия имеют вид

$$U(r) = -D + D\beta^2(r - r_0)^2 + O((r - r_0)^3) = -D + \frac{\omega^2 M}{2}(r - r_0)^2 + O((r - r_0)^3),$$

где $\omega^2 = 2D\beta^2/M$, ω — частота малых колебаний.

В линейном приближении сила взаимодействия частиц может быть записана следующим образом:

$$f(r) = -U_r' = -\omega^2(r - r_0) + O((r - r_0)^2).$$

Ограничимся рассмотрением условий устойчивости разностных уравнений, аппроксимирующих систему (3). Запишем характеристическое уравнение:

$$|E - \lambda G| = 0, \tag{8}$$

где G — соответствующая матрица перехода.

Следует отметить, что все схемы, сохраняющие фазовый объем, являются ω -устойчивыми [11], так как для таких схем корни характеристического уравнения (8) лежат на единичной окружности в комплексной плоскости.

В работе [3] приведены критерии устойчивости наиболее распространенных схем для задач МД. По этой причине ограничимся исследованием схем CROS и RKN, не рассмотренных в [3].

Схема CROS имеет второй порядок точности и удовлетворяет повышенным требованиям к устойчивости, так как является L_2 -устойчивой ($|\lambda| = O(K^{-2})$, $K = \omega\Delta t \rightarrow \infty$) и соответственно безусловно устойчивой. Данная схема продемонстрировала отличные результаты при решении жестких систем дифференциальных уравнений [9]. Однако для схемы CROS не выполнено условие ω -устойчивости, и она оказалась не вполне пригодной для решения задач МД на асимптотически больших интервалах времени.

Матрица перехода для схемы RKN4 четвертого порядка аппроксимации может быть получена исключением промежуточных значений $\vec{r}^1, \vec{r}^2, \vec{r}^3$ из системы конечно-разностных уравнений:

$$G = \begin{pmatrix} 1 - \frac{K^2}{2} + \frac{K^4}{24} - \frac{K^6(3 + \sqrt{3})}{12^3} & \Delta t \left(1 - \frac{K^2}{6} + \frac{K^4}{72} - \frac{K^6}{12^3} \right) \\ -\frac{K^2}{\Delta t} \left(1 - \frac{K^2}{6} + \frac{K^4}{2 \cdot 12^2} - \frac{K^6(3 + \sqrt{3})}{12^3} \right) & 1 - \frac{K^2}{2} + \frac{K^4}{24} - \frac{K^6(3 - \sqrt{3})}{12^3} \end{pmatrix}.$$

Таким образом, характеристическое уравнение имеет вид

$$\lambda^2 - 2\lambda \left(1 - \frac{K^2}{2} + \frac{K^4}{2 \cdot 12} - \frac{K^6}{4 \cdot 12^2} \right) + 1 = 0.$$

Необходимым и достаточным условием устойчивости является отрицательность дискриминанта

$$D = \left(1 - \frac{K^2}{2} + \frac{K^4}{2 \cdot 12} - \frac{K^6}{4 \cdot 12^2} \right)^2 - 1 = \left\{ 1 - \frac{K^2}{4} \left[1 + \left(1 - \frac{K^2}{12} \right)^2 \right] \right\}^2 - 1.$$

Поэтому схема RKN4 устойчива при выполнении условия

$$K < K_{cr} = 2\sqrt{2 - \sqrt[3]{4} + \sqrt[3]{2}} = 2,5865,$$

где K_{cr} — корень бикубического уравнения

$$\frac{K_{cr}^2}{4} \left[1 + \left(1 - \frac{K_{cr}^2}{12} \right)^2 \right] = 2.$$

В табл. 1 приведены сравнительные данные по устойчивости наиболее распространенных схем, взятые из работы [3]. Следует отметить, что с точки зрения устойчивости все схемы (за исключением CROS) не сильно отличаются друг от друга.

Определим, как соотносится шаг, определяемый устойчивостью, с периодом малых колебаний. Пусть ω — частота колебаний, тогда период равен $T = 2\pi/\omega$, а временной шаг, определяемый устойчивостью, $\Delta t = K_{cr}/\omega$. Поэтому $\Delta t/T = 2\pi/K_{cr}$. Так как $K_{cr} \approx 2$, то при выполнении условий устойчивости весь период колебаний будет пройден приблизительно за 3 шага, что находится в противоречии с требованиями точности. Таким образом, стандартной является ситуация, когда счет осуществляется с шагом, существенно меньшим, чем это требуется для обеспечения устойчивости.

Таблица 1

Сводные данные по устойчивости разностных схем

Схема	K_{cr}	Схема	K_{cr}	Схема	K_{cr}
Verlet	2	D-1/12	2,45	CROS	∞
T-1/12	2,45	OMF	2,5	RKN2	2
T-1/6	2,28	FR	1,572	RKN4	2,586

Сравнение схем с точки зрения точности

Дисбаланс в законах сохранения. Исследуем выполнение интегральных законов сохранения в разностных схемах МД. Структура разностных уравнений такова, что закон сохранения импульса выполнен автоматически. Остановимся на выполнении законов сохранения энергии и момента импульса.

На каждом этапе расщепления решаются уравнения движения (1), (2) для двух частиц. Если обеспечить выполнение закона сохранения момента импульса на каждом этапе расщепления, то он будет выполнен и на всем временном интервале.

Обратимся к разностным схемам, аппроксимирующим систему уравнений (3). Запишем разностные уравнения в виде (G — матрица перехода)

$$\begin{pmatrix} \vec{r} \\ \vec{u} \end{pmatrix}^{n+1} = G \begin{pmatrix} \vec{r} \\ \vec{u} \end{pmatrix}^n. \quad (9)$$

Используя (9), получаем связь моментов импульса на последовательных временных слоях:

$$(M\vec{u} \times \vec{r})^{n+1} = \det(G) (M\vec{u} \times \vec{r})^n.$$

Таким образом, точность выполнения закона сохранения момента импульса зависит от того, насколько детерминант матрицы перехода G отличается от единицы. Непосредственной проверкой убеждаемся, что для гамильтоновой схемы RKN4 $\det(G) = 1$.

Что касается закона сохранения полной энергии системы частиц, то его выполнение не гарантируется разностной схемой. По этой причине во всех расчетах, представленных в следующем разделе, приведены данные по дисбалансу полной энергии.

Фазовая ошибка. Вычислим фазовую ошибку для линеаризованной системы уравнений:

$$\delta_F = \frac{\omega \Delta t - \arg(\lambda)}{\omega \Delta t},$$

где $\arg(\lambda)$ — аргумент собственного значения матрицы перехода. Известно, что модуль собственного значения "отвечает" за устойчивость разностной схемы, а его аргумент — за точность.

Зависимости $\arg(\lambda)$ и δ_F от числа Куранта для наиболее распространенных разностных схем представлены соответственно в табл. 2 и на рис. 2. Как видим, для разностной схемы RKN4 фазовая ошибка практически отсутствует в широком диапазоне чисел Куранта $K < 1$. Отметим, что в практических расчетах значения K не превышают 0,1.

Таблица 2

Значения $\arg(\lambda)$ для наиболее распространенных разностных схем

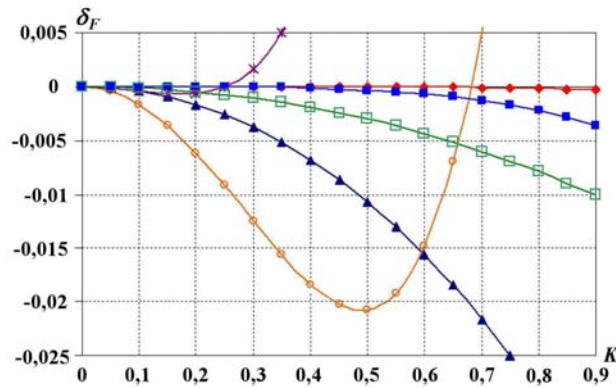


Рис. 2. Зависимости фазовой ошибки от числа Куранта для разностных схем: —◆— — RKN4; —○— — CROS; —■— — T-1/6; —▲— — Verlet; —×— — FR; —□— — OMF

Схема	$\arg(\lambda)$
RKN4	$\arcsin\left(\sqrt{1 - \left(1 - \frac{K^2}{2} + \frac{K^4}{24} - \frac{K^6}{4 \cdot 12^2}\right)^2}\right)$
T-1/6	$\arcsin\left(\sqrt{1 - \left(\frac{6 - 2K^2 - 0,25K^4}{6 + K^2}\right)^2}\right)$
FR	$\arcsin\left(\sqrt{1 - [1 - 0,5K^2(1 - aK^4)]^2}\right),$ $a = \alpha_{FR}^2(1 - 2\alpha_{FR})^3(1 + 4\alpha_{FR})$
Verlet	$\arcsin\left(K\sqrt{1 - \frac{K^2}{4}}\right)$
CROS	$\arcsin\left(K\left(1 + \frac{K^4}{4}\right)^{-3/2}\right)$
OMF	$\arcsin\left(\sqrt{1 - [1 - 0,5K^2(1 - aK^2)]^2}\right),$ $a = 0,5\alpha_{OMF}(1 - 2\alpha_{OMF})$

Примеры расчетов

Задача 1. *О гармоническом осцилляторе.* Вернемся к задаче о гармоническом осцилляторе, представленной в начале статьи. Постановка задачи взята из [3]. Рассматривается движение частицы с заданной массой $m = 1$ в гармоническом потенциальном поле $U(r) = 0,5\omega^2 r^2$, $\omega = 1$, описываемое известным решением $r_a = \sin(\omega t)$, $u_a = \cos(\omega t)$.

В качестве меры точности разностных схем выбрана амплитудная ошибка (отклонение в норме L_2 положения частицы от точного значения за время, равное 1000 периодов). В численных расчетах определялась зависимость времени вычисления от амплитудной ошибки. Время вычислялось на основе экспертной оценки числа арифметических операций. За единицу было выбрано время вычисления с шагом $\Delta t = 1$ ($K = 1$) по схеме Verlet.

Результаты представлены на рис. 3. Как видим, использование схемы RKN4 позволило существенно (примерно на два порядка) уменьшить время расчета для получения результатов с заданной точностью.

На рис. 4 показано убывание погрешности численного решения при уменьшении шага интегрирования. Интересно отметить, что схемы (за исключением RKN4), имеющие разные порядки аппроксимации, демонстрируют один и тот же порядок сходимости ($p = 2$). Для схемы RKN4 порядок сходимости совпадает с порядком аппроксимации ($p = 4$).

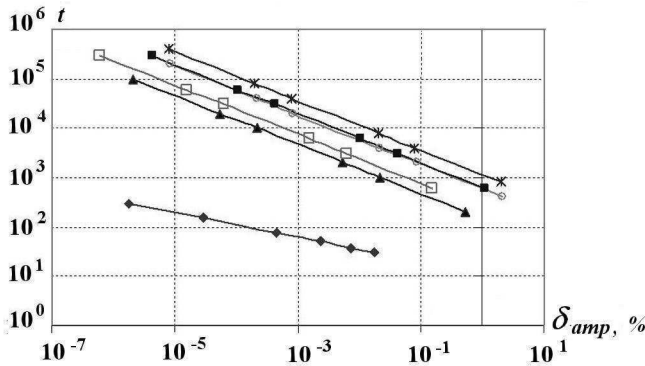


Рис. 3. Задача 1. Зависимости времени вычисления от амплитудной ошибки: —◆— — RKN4; —○— — CROS; —■— — T-1/6; —▲— — Verlet; —*— — FR; —□— — OMF

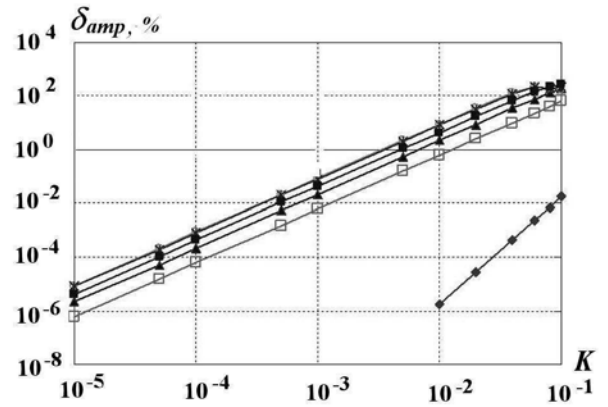


Рис. 4. Задача 1. Зависимости амплитудной ошибки от числа Куранта ($K = \omega\Delta t$): —◆— — RKN4; —○— — CROS; —■— — T-1/6; —▲— — Verlet; —*— — FR; —□— — OMF

Задача 2. *О колебательном движении двух тел в поле сил потенциала Морзе.* Рассматривается движение двух частиц с массами $m_1 = m_2 = m$ и потенциалом межчастичного взаимодействия Морзе

$$U(r) = D \left[\exp(-2\beta(r - a)) - 2\exp(-\beta(r - a)) \right], \quad r = r_1 - r_2.$$

В момент $t = 0$ задана скорость разлета частиц, направленная вдоль прямой линии, соединяющей эти частицы. Их начальное положение соответствует равновесному состоянию: $r_1 = 0,5a; r_2 = -0,5a; u_1 = u_0; u_2 = -u_0$.

Решение задачи может быть представлено в элементарных функциях. Если начальная кинетическая энергия частиц больше размера потенциальной ямы, $b = \sqrt{mu_0^2/D} > 1$, то частицы разлетаются на бесконечное расстояние с конечной скоростью. При $b < 1$ частицы колеблются около положения равновесия. Значению $b = 1$ соответствует режим разлета, при котором частицы останавливаются на бесконечности.

Рассмотрим вариант задачи с колебательным режимом:

$$\begin{aligned} r_1(t) &= 0,5r(t); & r_2(t) &= -0,5r(t); & u_1 &= u(t); & u_2 &= -u(t); \\ r(t) &= a + \frac{1}{\beta} \ln \left(\frac{1 + b \sin(\varphi(t))}{1 - b^2} \right); & u(t) &= 2u_0 \sqrt{1 - b^2} \frac{\cos(\varphi(t))}{1 + b \sin(\varphi(t))}; \\ \varphi &= 2t\beta \sqrt{\frac{D}{m}} \sqrt{1 - b^2} - \arcsin(b). \end{aligned}$$

Период колебаний $T = \frac{\pi}{\beta} \sqrt{\frac{m}{D(1 - b^2)}}$; амплитуда $\Delta r = \frac{1}{\beta} \ln \left(\frac{1 + b}{1 - b} \right)$. Траектория относительного движения частиц на фазовой плоскости ($p = mu, r$) замкнута и определяется уравнением

$$\Phi(p, r) = \left(b \frac{p}{2mu_0}\right)^2 + \left[1 - \exp(-\beta(x - a))\right]^2 - b^2 = 0.$$

Значения параметров потенциала $\beta = 4$, $D = 1/(4\beta^2) = 0,015625$ выбираем так, чтобы частота малых колебаний была равна единице: $\omega = 2\sqrt{D\beta^2/m} = 1$. Значению параметра $b = 1$ соответствует начальная скорость частиц $u_0 = b\sqrt{D/m} = 1/8 = 0,125$.

В расчетах с потенциалом Морзе амплитудная ошибка δ_{amp} вычислялась за время $T = 100 \cdot (2\pi/\omega)$, соответствующее 100 периодам. Величина δ_{amp} нормировалась на размер $L = a$. Для этой нелинейной задачи результаты расчетов качественно совпадают с данными, полученными в задаче 1 с использованием гармонического потенциала. Имеет место безусловное превосходство схемы RKN4 (рис. 5, 6).

Особенности численного моделирования траектории движения частиц на фазовой плоскости иллюстрируют рис. 7–9 (см. также цветную вкладку). Численный дисбаланс полной энергии, характерный для схемы Verlet, приводит к изменению траектории от замкнутой к расходящейся. Этот эф-

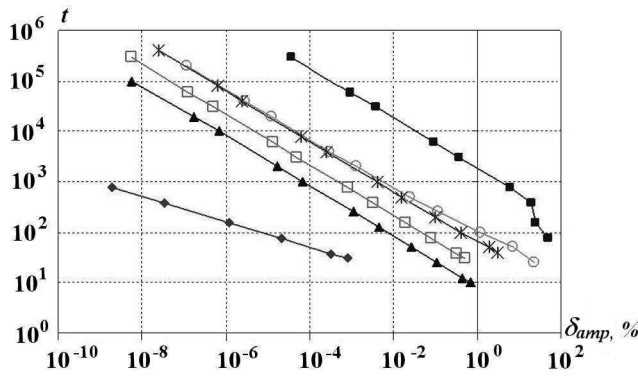


Рис. 5. Задача 2. Зависимости времени вычисления от амплитудной ошибки в расчетах с $u_0 = 0,12$: —◆— RKN4; —○— CROS; —■— T-1/6; —▲— Verlet; —*— FR; —□— OMF

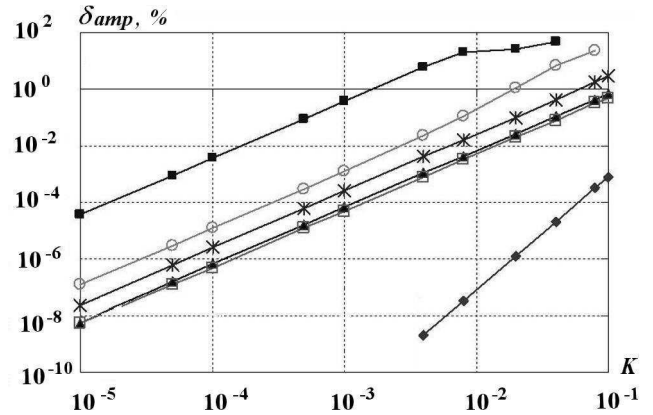


Рис. 6. Задача 2. Зависимости амплитудной ошибки от числа Куранта в расчетах с $u_0 = 0,12$: —◆— RKN4; —○— CROS; —■— T-1/6; —▲— Verlet; —*— FR; —□— OMF

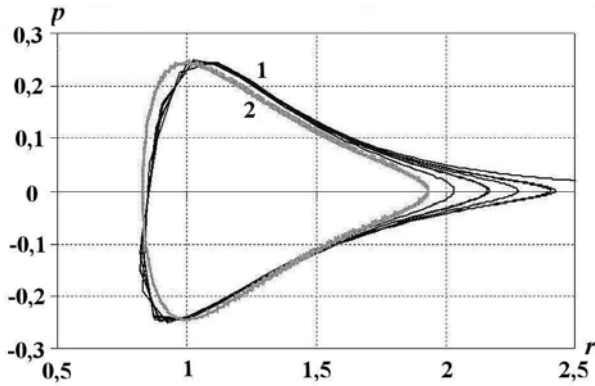


Рис. 7. Задача 2. Траектории относительного движения частиц ($u_0 = 0,122$) на фазовой плоскости ($p = mu, r$) в интервале времени $0 < t < 500$: 1 — расчет по схеме Verlet с шагом $\Delta t = 0,5$ ($K = 0,5$); 2 — аналитическое решение

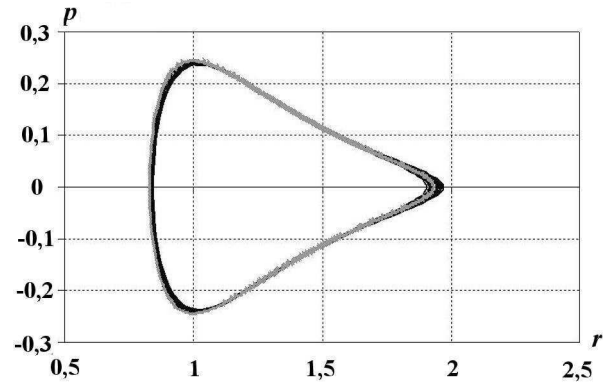


Рис. 8. Задача 2. Траектории относительного движения частиц ($u_0 = 0,122$) на фазовой плоскости ($p = mu, r$) в интервале времени $0 < t < 500$: расчет по схеме RKN4 с шагом $\Delta t = 0,5$ ($K = 0,5$) и аналитическое решение

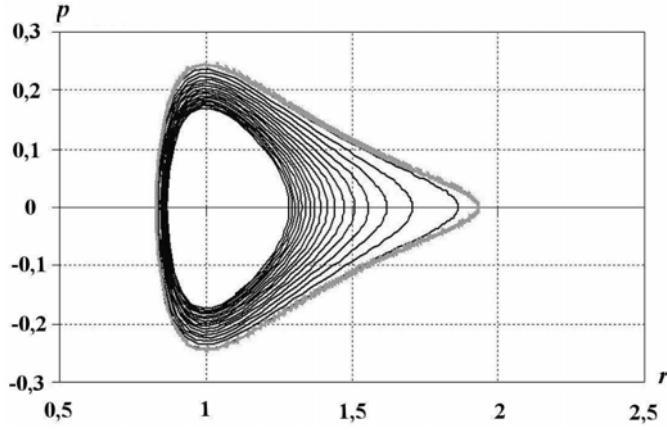


Рис. 9. Задача 2. Траектории относительного движения частиц ($u_0 = 0,122$) на фазовой плоскости ($p = mu, r$) в интервале времени $0 < t < 500$: расчет по схеме CROS с шагом $\Delta t = 0,5$ ($K = 0,5$) и аналитическое решение (внешний контур)

факт демонстрирует рис. 7. Для схемы RKN4 при тех же начальных условиях имеем устойчивую траекторию (рис. 8). Численный дисбаланс другого знака, характерный для схемы CROS, приводит к уменьшению амплитуды колебаний. В этом случае имеем траекторию в форме спирали, сходящейся в точку ($p = 0, r = 1$) (рис. 9).

Задача 3. *О движении двух тел в поле сил модифицированного потенциала Морзе.* Модифицированный потенциал Морзе зависит не только от расстояния между частицами, но и от угла между вектором $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ и единичным вектором \vec{n} некоторого выделенного направления:

$$U(\vec{r}) = R(r) \left[b + d \frac{(\vec{n} \cdot \vec{r})^2}{(\vec{r} \cdot \vec{r})} \right], \quad R(r) = D \left[\exp(-2\beta(r-a)) - 2\exp(-\beta(r-a)) \right],$$

$$d, b \in \mathbb{R}, \quad d \geq 0, \quad b > 0, \quad d + b = 1.$$

Учет угловых зависимостей требуется для получения в расчетах устойчивых состояний решеток, характерных для ковалентных кристаллов.

В качестве примера рассмотрим движение частиц в поле модифицированного потенциала Морзе с параметрами $D = 1; a = 1; \beta = 4; b = 0; d = 1; n_x = 1; n_y = 0$ и начальными данными

$$m_1 = m_2 = 2; \quad x_1 = 0,505; \quad x_2 = -0,505; \quad y_1 = y_2 = 0;$$

$$u_{x1} = \omega x_1; \quad u_{x2} = \omega x_2; \quad u_{y1} = u_{y2} = 0; \quad \omega = 1,3.$$

Траектории относительного движения частиц изображены на рис. 10. Существуют только два типа центральных полей, в которых все финитные траектории замкнуты [1, 15]. Это поля, для которых потенциальная энергия пропорциональна r^{-1} или r^2 . Потенциал Морзе не принадлежит к этому классу полей, следовательно, для него возможны ограниченные незамкнутые траектории. В частности, для модифицированного потенциала Морзе существуют незамкнутые траектории, всюду плотно заполняющие некоторую область в плоскости движения, не содержащую начало координат (см. рис. 10).

Решение рассматриваемой задачи в квадратурах не известно. По этой причине отсутствуют данные об амплитудной ошибке. О точности расчетов можно судить по дисбалансу полной энергии (рис. 11)

$$\delta E_{\max} = \max_t \left| \frac{0,5 \left(m_1 |\vec{u}_1|^2 + m_2 |\vec{u}_2|^2 \right) + U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) - E_0}{E_0} \right|.$$

Дисбаланс для схемы RKN4 уменьшается в соответствии с порядком аппроксимации.

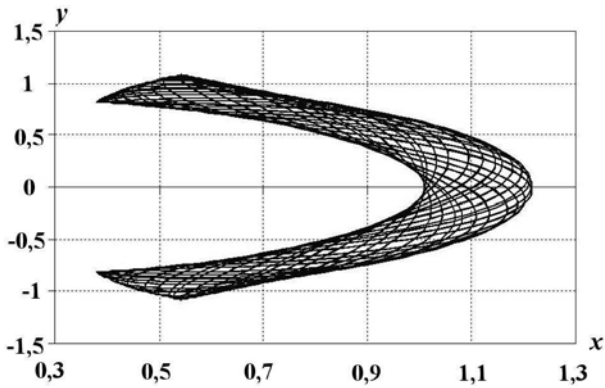


Рис. 10. Задача 3. Траектории относительного движения частиц в интервале времени $0 < t < 150$: расчет по схеме RKN4 ($K = 0,25$)

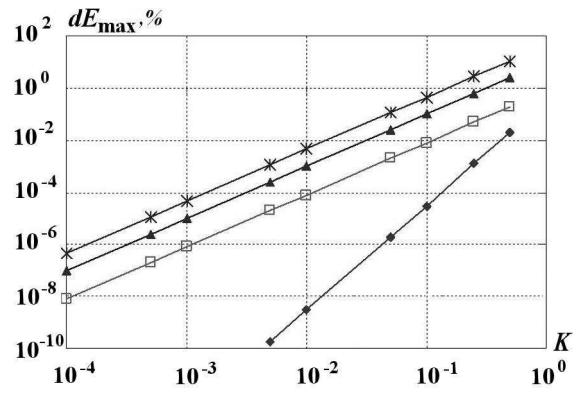


Рис. 11. Задача 3. Зависимости дисбаланса полной энергии от числа Куранта ($K = \omega \Delta t$): \blacklozenge — RKN4; \blacktriangle — Verlet; $*$ — FR; \square — OMF

Задача 4 (Аренсторфа). Рассмотрим пример ограниченной задачи трех тел [16]. Два тела с конечной массой (Земля, $m_1 = 1 - \mu$, и Луна, $m_2 = \mu$) и тело с пренебрежимо малой массой (спутник, $m_3 \approx 0$) движутся в гравитационном поле с потенциалом $U(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) = m_i m_j |\vec{r}_i - \vec{r}_j|^{-1}$. Начальные данные (в безразмерном виде)

$$\begin{aligned} \mu &= 0,012277471; & x_1 &= -\mu; & x_2 &= 1 - \mu; & x_3 &= 0,994; & y_1 &= y_2 = y_3 = 0; \\ u_{x1} &= u_{x2} = u_{x3} = 0; & u_{y1} &= -\mu; & u_{y2} &= 1 - \mu; & u_{y3} &= x_3 - 2,00158510637908252240537862224 \end{aligned}$$

выбраны так, что в неинерциальной системе координат, относительно которой Земля и Луна неподвижны, имеет место периодическое движение спутника с периодом

$$T = 17,0652165601579625588917206249.$$

Траектория спутника, изображенная на рис. 12, образует четыре петли. Еще более сложную структуру имеет поле скоростей (рис. 13).

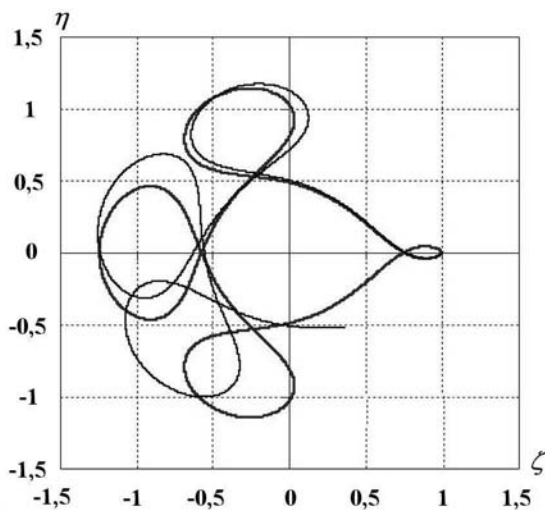


Рис. 12. Задача 4. Орбита Аренсторфа на плоскости (ζ, η) в интервале времени $0 < t < T$ в расчетах с шагом $\Delta t = 10^{-5}T$: — — RKN4; — — Verlet

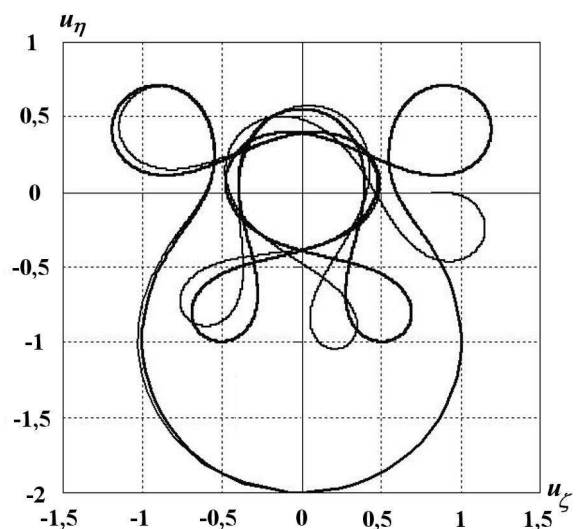


Рис. 13. Задача 4. Орбита Аренсторфа на плоскости (u_ζ, u_η) в интервале времени $0 < t < T$ в расчетах с шагом $\Delta t = 10^{-5}T$: — — RKN4; — — Verlet

В работах [14, 16] данная задача решалась в неинерциальной системе координат для двух координат и двух компонент скорости спутника. Выяснилось, что задача Арнсторфа не может быть решена с использованием схем низкого порядка. Среди всех схем, рассмотренных в [14], наилучший результат дала семистадийная схема, реализованная в программе DOPR15 [16]. Однако на других задачах эта схема ничем себя не проявила. По этой причине авторы отказались от расчетов по DOPR15, ограничившись рассмотрением трехстадийных схем.

Как и в работе [14], в качестве меры точности примем разницу между значениями координат и скорости спутника в моменты времени $t = 0$ и $t = T$:

$$\Delta = \sqrt{\frac{(x_3(T) - x_3(0))^2 + (y_3(T) - y_3(0))^2}{x_3^2(0) + y_3^2(0)} + \frac{(u_{x3}(T) - u_{x3}(0))^2 + (u_{y3}(T) - u_{y3}(0))^2}{u_{x3}^2(0) + u_{y3}^2(0)}}.$$

Авторы данной статьи использовали инерциальную систему отсчета и решали систему уравнений для трех тел. Переход в неинерциальную систему координат осуществлялся по формулам

$$\begin{aligned} \xi(t) &= x_3(x_2 - x_1) + y_3(y_2 - y_1); & \eta(t) &= y_3(x_2 - x_1) - x_3(y_2 - y_1); \\ u_\xi(t) &= (u_{x3} + y_3)(x_2 - x_1) + (u_{y3} - x_3)(y_2 - y_1); & u_\eta(t) &= (u_{y3} - x_3)(x_2 - x_1) + (u_{x3} + y_3)(y_2 - y_1). \end{aligned}$$

Полученные зависимости погрешности численного решения Δ от числа обращений Nm к функции вычисления сил (N — число шагов; m — количество стадий схемы) представлены на рис. 14. После включения в число рассматриваемых оптимальной, трехстадийной схемы Рунге—Кутты (ERK3) [14] выяснилось, что эта схема уступает по точности также трехстадийной схеме RKN4. Схема Verlet не позволяет получить приемлемых результатов даже с числом разбиений $N = 10^5$ (см. рис. 12–14).

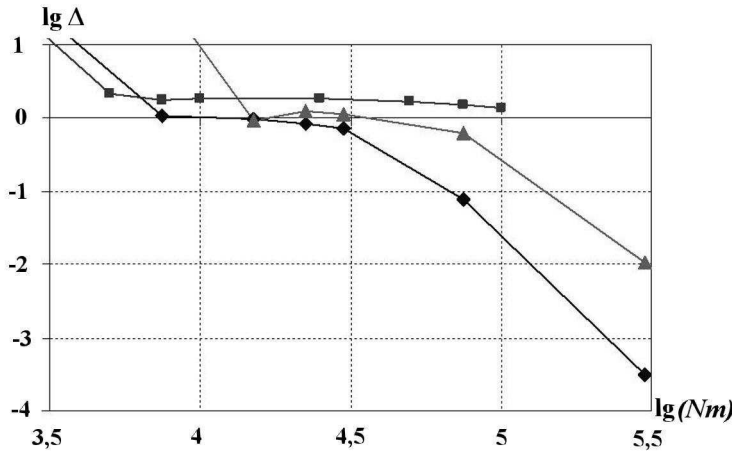


Рис. 14. Задача 4. Зависимости нормы погрешности от числа обращений к функции вычисления сил: —◆— — RKN4; —▲— — ERK3; —■— — Verlet

Выводы

По результатам работы можно сделать следующие выводы:

1. Проведено исследование точности наиболее распространенных разностных схем МД. Показано, что наилучшими качествами по соотношению *точность — экономичность* обладают разностные схемы, сохраняющие каноничность фазового потока.
2. Предложена трехстадийная разностная схема RKN4 четвертого порядка аппроксимации. Расчеты продемонстрировали высокие консервативные свойства этой схемы на асимптотически больших временах.

3. Использование схемы RKN4 позволяет уменьшить (на 3-4 порядка) амплитудную ошибку и дисбаланс полной энергии по сравнению с самой распространенной в расчетах МД схемой Verlet. Таким образом, появляется возможность при сохранении заданной точности существенно уменьшать время расчетов.

Авторы выражают благодарность Ю. А. Бондаренко за критические замечания и обсуждение результатов работы.

Список литературы

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Т. 1. Механика. М.: Наука, 1973.
2. Verlet L. Computer "experiments" on classical fluids. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules // Phys. Rev. 1967. Vol. 159, No 1. P. 98—103.
3. Rougier E., Munjiza A., John N. W. M. Numerical comparison of some explicit time integration schemes used in DEM, FEM/DEM and molecular dynamics // Int. J. for Num. Methods in Eng. 2004. Vol. 61. P. 856—879.
4. Khakimov Z. M. New integrator for molecular dynamics simulation // Comp. Phys. Communications. 2002. Vol. 147. P. 733—736.
5. Omelyan I. P., Mryglod I. M., Folk R. Symplectic analytically integrable decomposition algorithms: classification, derivation and application to molecular dynamics, quantum and celestial mechanics simulations // Ibid. 2003. Vol. 151. P. 272—314.
6. Omelyan I. P., Mryglod I. M., Folk R. Optimized Verlet-like algorithms for molecular dynamics simulations // Phys. Rev. E. 2002. Vol. 65. P. 056707.
7. Forest E., Ruth R. D. Forth-order symplectic integration // Physica D. 1990. Vol. 43. P. 105—117.
8. Rosenbrock H. H. Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations // Comp. J. 1963. Vol. 5, No 4. P. 329—330.
9. Альшин А. Б., Альшина Е. А., Калиткин Н. Н., Корякина А. Б. Схемы Розенброка с комплексными коэффициентами для жестких и дифференциально-алгебраических систем // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 2006. Т. 46, № 8. С. 1392—1414.
10. Маркус М., Минк Х. Обзор по теории матриц и матричных неравенств. М.: Наука, 1972.
11. Сурис Ю. Б. О каноничности отображений, порождаемых методами типа Рунге—Кутты при интегрировании систем $x'' = -\partial U/\partial x$ // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1989. Т. 29, № 2. С. 202—211.
12. Сурис Ю. Б. Гамильтоновы методы типа Рунге—Кутты и их вариационная трактовка // Математическое моделирование. 1990. Т. 2, № 4. С. 78—87.
13. Butcher J. C. Coefficients for study of Runge-Kutte integration process // J. Austral. Math. Soc. 1963. Vol. 3. P. 185—201.
14. Альшина Е. А., Закс Е. М., Калиткин Н. Н. Оптимальные схемы Рунге—Кутты с первого по шестой порядок точности // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 2007. Т. 47, № 9. С. 1538—1549.
15. Арнольд В. И. Математические методы классической механики. М.: Наука, 1979.
16. Хайрер Э., Нерсетт С., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. М.: Мир, 1990.