

УДК 681.324

## РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ. 3. РЕЗУЛЬТАТЫ ТЕСТОВЫХ РАСЧЕТОВ

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

Представлены результаты расчетов тестовых задач, построенных на основе точных решений для потенциалов Ньютона, Морзе и Леннарда-Джонса. Данные задачи использовались для проверки устойчивости, точности и консервативных свойств разностной схемы Verlet, самой распространенной в расчетах молекулярной динамики, и выбранной в качестве ее альтернативы трехстадийной схемы RKN4, принадлежащей к классу схем, сохраняющих каноничность фазового потока. Исследованы особенности поведения разностных схем и численных решений в случае нарушения условий устойчивости аналитических решений.

Схема RKN4 продемонстрировала высокие консервативные свойства на асимптотически больших временах, а по соотношению *точность-экономичность* — значительное превосходство над схемой Verlet.

*Ключевые слова:* молекулярная динамика, потенциал Ньютона, классический и модифицированный потенциалы Морзе, потенциал Леннарда-Джонса, разностные схемы молекулярной динамики.

### Введение

В работе [1] представлена система тестов, созданная на основе точных решений задач для потенциалов Ньютона, Морзе и Леннарда-Джонса. Данная система тестов предназначена для проверки устойчивости, точности и консервативных свойств разностных схем молекулярной динамики.

Рассмотрим примеры численных расчетов задач, представленных в [1]. Для потенциала Ньютона полагаем  $\gamma = 1$  ( $\gamma$  — гравитационная постоянная). Задачи Эйлера и Лагранжа интересны для выяснения особенностей поведения разностных схем и численных решений в случае нарушения условий устойчивости аналитических решений. Потеря устойчивости систем с большим количеством частиц является актуальной при решении задач молекулярной динамики. Однако определение границ областей устойчивости для таких задач весьма проблематично.

Ограничимся рассмотрением двух разностных схем — Verlet и RKN4. Первая из них — самая распространенная в расчетах молекулярной динамики. Вторая схема (RKN4) является ее альтернативой. Она продемонстрировала высокие консервативные свойства на асимптотически больших временах. Трехстадийная схема RKN4 принадлежит к классу схем, сохраняющих каноничность фазового потока [2].

В качестве меры точности численных расчетов выбрано суммарное отклонение положения частиц от эталонного (аналитического) решения:

$$dr(t) = \sqrt{\frac{\sum_i |\vec{r}_i(t) - \vec{r}_{ia}(t)|^2}{\sum_i |\vec{r}_{ia}(0)|^2}}.$$

Структура разностных уравнений молекулярной динамики такова, что закон сохранения импульса выполнен автоматически. Отличительной особенностью гамильтоновых схем является выполнение еще одного закона — сохранения момента импульса. Что касается закона сохранения полной энергии системы частиц, то его выполнение не гарантируется разностной схемой. По этой причине для всех расчетов приведены данные либо по дисбалансу полной энергии (в виде функции времени), либо по максимальному дисбалансу для заданного временного интервала (в виде функции временного шага):

$$dE(t) = \left| \frac{0,5 \sum_i m_i |\vec{u}_i|^2 + \sum_i \sum_{j \neq i} U(\vec{r}_i, \vec{r}_j) - E_0}{E_0} \right|; \quad dE_{\max}(T) = \max_{t < T} dE(t).$$

### 1. Задача Эйлера

Рассматривается задача о коллинеарном движении системы трех материальных точек  $m_1 = 3$ ,  $m_2 = 2$ ,  $m_3 = 1$  вокруг начала координат (центра масс). Начальные данные

$$\begin{aligned} (x_i, y_i) &= (r_i \cos \varphi_i, r_i \sin \varphi_i); & (u_{xi}, u_{yi}) &= (-r_i \omega_0 \sin \varphi_i, r_i \omega_0 \cos \varphi_i), & i &= 1, 2, 3; \\ r_1 &= 1; & r_2 &= \frac{m_1 - \kappa m_3}{m_2 + (\kappa + 1) m_3}; & r_3 &= \frac{(\kappa + 1) m_1 + \kappa m_2}{m_2 + (\kappa + 1) m_3}; \\ \varphi_1(0) &= \pi; & \varphi_2(0) &= 0; & \varphi_3(0) &= 0 \end{aligned}$$

соответствуют решению, приведенному в [1]. Система материальных точек вращается вокруг начала координат с постоянной угловой скоростью

$$\omega = \omega_0 = \sqrt{\left[ \frac{m_2 + (\kappa + 1) m_3}{m_1 + m_2 + m_3} \right]^3 \left[ \frac{m_1}{(\kappa + 1)^3} + \frac{(\kappa^2 + 1) m_2}{\kappa^2 (\kappa + 1)} + \frac{m_3}{(\kappa + 1)^3} \right]} = 0,958\,801\,579\,9,$$

где  $\kappa = 0,780\,671\,8588$  является положительным корнем уравнения  $(m_1 + m_2) \kappa^5 + (3m_1 + 2m_2) \kappa^4 + (3m_1 + m_2) \kappa^3 - (m_2 + 3m_3) \kappa^2 - (2m_2 + 3m_3) \kappa - (m_2 + m_3) = 0$ .

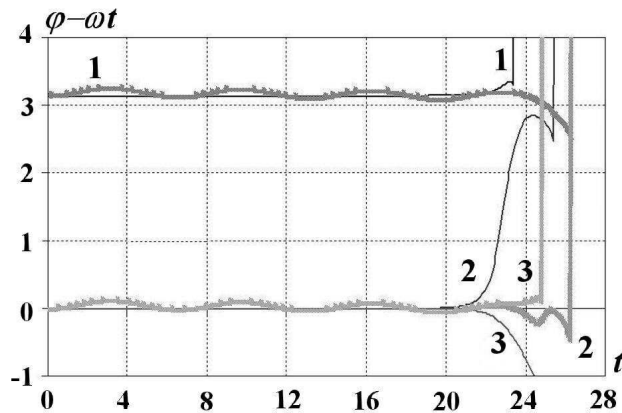


Рис. 1. Зависимость полярного угла частиц (1–3) от времени для задачи Эйлера: — — RKN4; — — Verlet

Решение задачи Эйлера —  $r_i(t) = r_i(0)$ ,  $\varphi_i(t) = \varphi_i(0) + \omega_0 t$ ,  $i = 1, 2, 3$ . Известно, что данное решение является неустойчивым, поэтому в численных расчетах частицы уходят со стационарных траекторий после трех периодов вращения. Результаты расчетов, преобразованные в полярную систему координат, изображены на рис. 1. Шаг интегрирования  $\Delta t = 0,01 \times 2\pi/\omega_0$ . Отметим также, что использование схемы RKN4 позволяет существенно уменьшить дисбаланс полной энергии частиц (рис. 2) и погрешность численных расчетов (рис. 3).

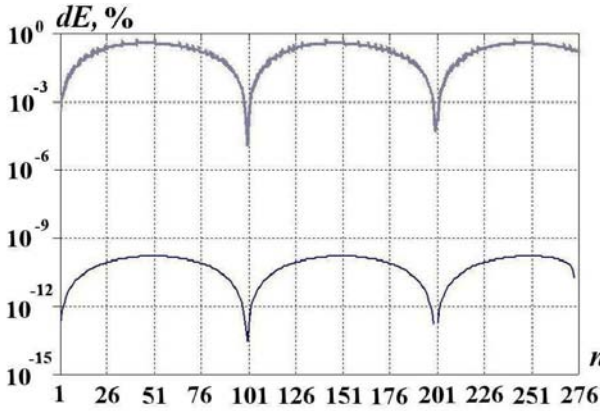


Рис. 2. Зависимость дисбаланса суммарной энергии частиц от номера шага. Расчет задачи Эйлера с шагом  $\Delta t = 0,01 \cdot 2\pi/\omega_0$ : — — RKN4; — — Verlet

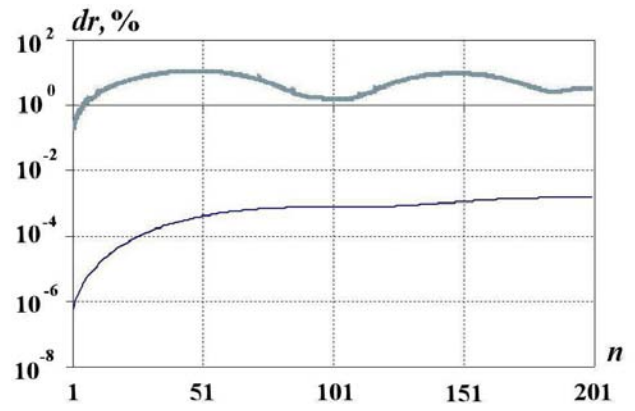


Рис. 3. Мера погрешности численного решения. Расчет задачи Эйлера с шагом  $\Delta t = 0,01 \cdot 2\pi/\omega_0$ : — — RKN4; — — Verlet

## 2. Задачи Лагранжа с устойчивыми и неустойчивыми траекториями частиц

В задаче Лагранжа частицы  $m_1, m_2, m_3$  расположены в вершинах равностороннего треугольника, вращающегося с постоянной угловой скоростью вокруг центра масс  $\omega = \omega_0 = \sqrt{\frac{\gamma(m_1 + m_2 + m_3)}{l^3}}$ . Начальные данные соответствуют решению, приведенному в [1], со значением свободного параметра  $l = \sqrt[3]{m_1 + m_2 + m_3}$ :

$$(x_i, y_i) = (r_i \cos \varphi_i, r_i \sin \varphi_i); \quad (u_{xi}, u_{yi}) = (-\omega_0 r_i \sin \varphi_i, \omega_0 r_i \cos \varphi_i), \quad i = 1, 2, 3,$$

где

$$r_1 = \frac{l\sqrt{m_2^2 + m_2 m_3 + m_3^2}}{m_1 + m_2 + m_3}; \quad r_2 = \frac{l\sqrt{m_1^2 + m_1 m_3 + m_3^2}}{m_1 + m_2 + m_3}; \quad r_3 = \frac{l\sqrt{m_1^2 + m_1 m_2 + m_2^2}}{m_1 + m_2 + m_3}; \quad (1)$$

$$\varphi_1 = 0; \quad \varphi_2 = \arccos\left(\frac{r_1^2 + r_2^2 - l^2}{2r_1 r_2}\right); \quad \varphi_3 = 2\pi - \arccos\left(\frac{r_1^2 + r_3^2 - l^2}{2r_1 r_3}\right). \quad (2)$$

Решение задачи Лагранжа —  $r_i(t) = r_i(0)$ ,  $\varphi_i(t) = \varphi_i(0) + \omega_0 t$ ,  $i = 1, 2, 3$ , устойчиво в первом приближении при выполнении условия Раусса

$$27 < \frac{(m_1 + m_2 + m_3)^2}{m_1 m_2 + m_1 m_3 + m_2 m_3}. \quad (3)$$

Рассмотрим варианты этой задачи:

- 1) устойчивый:  $m_1 = 0,97$ ,  $m_2 = 0,015$ ,  $m_3 = 0,015$ ;
- 2) неустойчивый:  $m_1 = 1$ ,  $m_2 = 2$ ,  $m_3 = 3$ .

Результаты расчетов с шагом интегрирования  $\Delta t = 0,01T = 0,01 \cdot 2\pi/\omega_0$  представлены на рис. 4–7.

В устойчивом варианте частицы остаются на стационарных траекториях на всем временном интервале  $0 < t < 200T$ . В расчетах Verlet наблюдается заметная фазовая ошибка. На момент времени  $t = 200T$  отставание по углу от эталонного решения составляет  $\sim \pi$  (см. рис. 4). В расчетах с использованием схемы RKN4 положение частиц после 200 периодов вращения с точностью до графического изображения совпадает с аналитическим решением. Суммарная ошибка положения частиц в указанном интервале не превысила 0,15 %; для схемы Verlet эта ошибка составила  $\sim 20$  % (см. рис. 5).

В неустойчивом варианте задачи частицы уходят со стационарных траекторий в момент времени  $t \approx 8T$ . Отметим также, что с течением времени увеличиваются расхождения в расчетах, полученных по двум разностным схемам (см. рис. 6).

Точность расчетов RKN4 в интервале устойчивости увеличена по сравнению с расчетами Verlet примерно на три порядка (см. рис. 7).

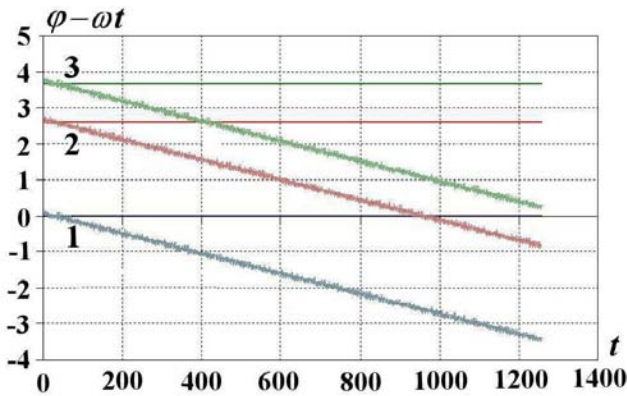


Рис. 4. Зависимость полярного угла частиц (1–3) от времени для устойчивого варианта задачи Лагранжа: — — RKN4; - - - Verlet

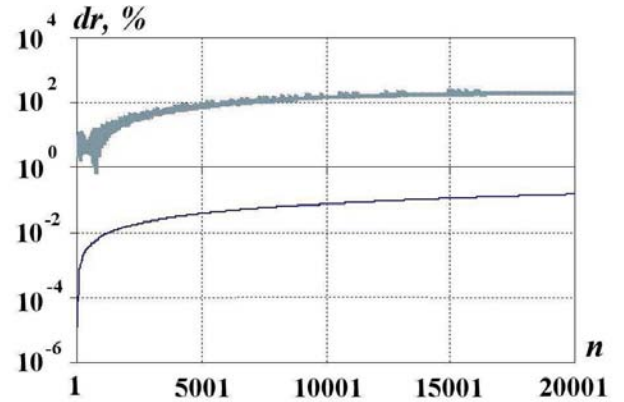


Рис. 5. Мера погрешности численного решения. Расчет устойчивого варианта задачи Лагранжа с шагом интегрирования  $\Delta t = 0,01 \cdot 2\pi/\omega_0$ : — — RKN4; - - - Verlet

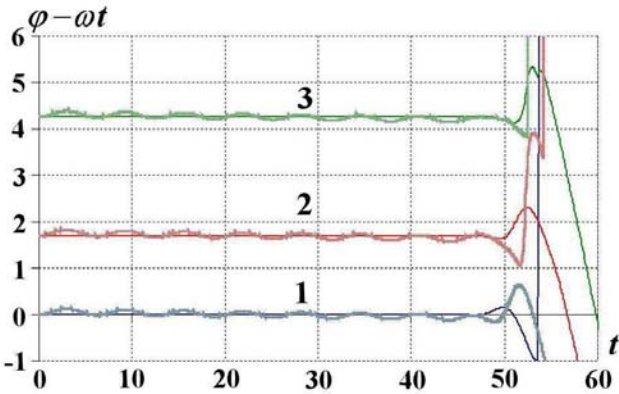


Рис. 6. Зависимость полярного угла частиц (1–3) от времени для неустойчивого варианта задачи Лагранжа: — — RKN4; - - - Verlet

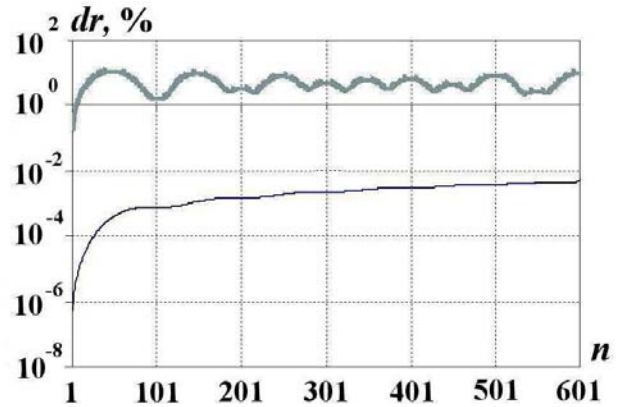


Рис. 7. Мера погрешности численного решения. Расчет неустойчивого варианта задачи Лагранжа с шагом интегрирования  $\Delta t = 0,01 \cdot 2\pi/\omega_0$ : — — RKN4; - - - Verlet

### 3. Гомографическая задача трех тел

Начальные данные для гомографической задачи однозначно определяются заданием масс частиц  $m_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) и эксцентриситета  $e$  траекторий:

$$(x_i, y_i) = (r_i \cos \varphi_i, r_i \sin \varphi_i); \quad (u_{xi}, u_{yi}) = (-r_i \sqrt{1+e} \sin \varphi_i, r_i \sqrt{1+e} \cos \varphi_i), \quad i = 1, 2, 3.$$

Как и в задаче Лагранжа, частицы расположены в вершинах равностороннего треугольника со стороной  $l = \sqrt[3]{m_1 + m_2 + m_3}$ . Координаты  $(r_i, \varphi_i)$  вычисляются по формулам (1), (2). Период обращения по орбитам для  $e < 1$  равен  $T = 2\pi (1 - e)^{-3/2}$ . Для гомографических решений выполнен закон сохранения энергии для каждой частицы  $i$ :

$$E_i = \frac{m_i (u_{xi}^2 + u_{yi}^2)}{2} - \frac{m_i r_{0i}^3}{|\vec{r}_i|} = E_{0i} = \frac{m_i r_{0i}^2 (e - 1)}{2}$$

и для всей системы:

$$E = \sum_{i=1}^3 \left[ \frac{m_i (u_{xi}^2 + u_{yi}^2)}{2} - \sum_{j \neq i} \frac{m_i m_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right] = \sum_{i=1}^3 E_{0i} = \frac{e-1}{2} \sum_{i=1}^3 m_i r_{0i}^2.$$

В полярной системе координат траектории частиц имеют вид

$$r_i(\varphi) = \frac{r_{0i}(1+e)}{1+e \cos(\varphi - \varphi_{0i})}, \quad i = 1, 2, 3.$$

Зависимость координат частиц от времени может быть представлена в параметрическом виде. Выпишем уравнения эллиптических ( $e < 1$ ) и параболических ( $e = 1$ ) траекторий:

– для эллиптических орбит ( $e < 1$ )

$$x_i(t) = \frac{r_{0i}(1 - e \cos \xi(t)) \cos \varphi_i(t)}{1 - e}; \quad y_i(t) = \frac{r_{0i}(1 - e \cos \xi(t)) \sin \varphi_i(t)}{1 - e},$$

$$\varphi_i(t) = \varphi_{0i} + \text{sign}(\sin \xi(t)) \arccos\left(\frac{\cos \xi(t) - e}{1 - e \cos \xi(t)}\right).$$

Функция  $\xi(t)$  определяется из уравнения  $\xi - e \sin(\xi) - (1 - e)^{3/2} t = 0$ ;

– для параболических орбит ( $e = 1$ )

$$x_i(t) = r_{0i}(1 + \eta(t)^2) \cos \varphi_i(t); \quad y_i(t) = r_{0i}(1 + \eta(t)^2) \sin \varphi_i(t);$$

$$\varphi_i(t) = \varphi_{0i} + \arccos\left(\frac{1 - \eta(t)^2}{1 + \eta(t)^2}\right); \quad \eta(t) = \left(\sqrt{1 + \frac{9t^2}{8}} - \frac{3t}{2\sqrt{2}}\right)^{1/3} - \left(\sqrt{1 + \frac{9t^2}{8}} + \frac{3t}{2\sqrt{2}}\right)^{1/3}.$$

В качестве начальных данных выберем массы частиц  $m_1 = 1$ ,  $m_2 = 2$ ,  $m_3 = 3$  и два варианта орбит:  $e = 0,75$  и  $e = 1$ . Для обоих вариантов шаг интегрирования полагался равным  $\Delta t = 0,01T = 0,50265$ , где  $T$  — период обращения по орбите с  $e = 0,75$ . Отметим, что в данной постановке задача является неустойчивой, так как для нее не выполнено условие Раусса (3).

Результаты расчетов эллиптических траекторий  $e = 0,75$  представлены на рис. 8 (см. также цветную вкладку). Для гомографических решений частицы в каждый момент времени расположены в вершинах равностороннего треугольника. Как видим, это свойство выполняется и для численного решения. Отметим, что в расчетах Verlet частицы значительно отклоняются от стационарных траекторий. В то же время, в расчетах со схемой RKN4 положение частиц в интервале времени  $t \lesssim 6T \simeq 300$  близко к аналитическому решению. При больших временах численное решение теряет устойчивость. Максимальный дисбаланс полной энергии во временном интервале, не выходящем за пределы устойчивости, уменьшен в расчетах RKN4 на несколько порядков (рис. 9).

Результаты расчетов параболических траекторий представлены на рис. 10 (см. также цветную вкладку). Весьма значительный дисбаланс схемы Verlet приводит к тому, что полученное по этой схеме численное решение соответствует гиперболическому типу орбит. Так как полная энергия системы для этого варианта траекторий равна нулю, то дисбаланс нормировался на начальную кинетическую энергию частиц (рис. 11).

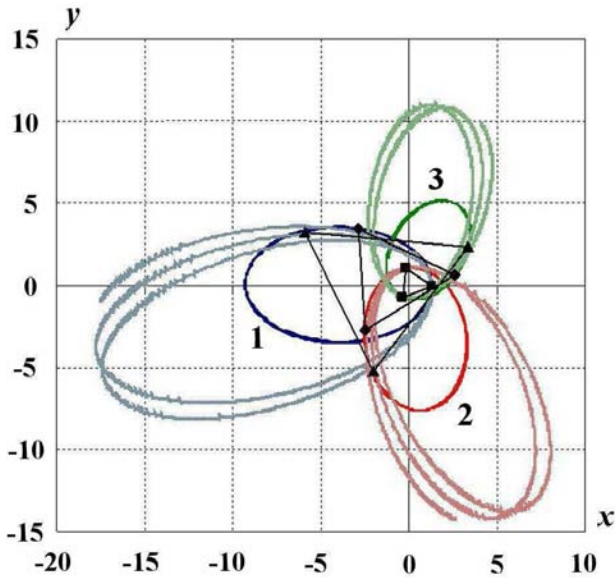


Рис. 8. Задача трех тел. Эллиптические траектории частиц (1–3) в интервале времени  $0 < t < 6T$ ,  $e = 0,75$ : —◆— RKN4; —■— Verlet; маркерами отмечено положение частиц в моменты времени  $t = 0; 5,03; 10,01$

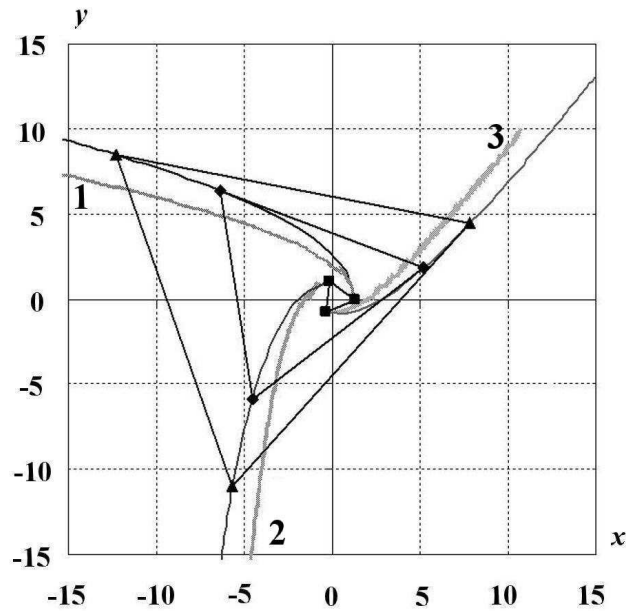


Рис. 10. Задача трех тел. Параболические траектории частиц (1–3) в интервале времени  $0 < t < 25$ ,  $e = 1$ : —◆— RKN4; —■— Verlet; маркерами отмечено положение частиц в моменты времени  $t = 0; 5,03; 10,01$

#### 4. Гомографическая задача пяти тел

Для гомографической задачи пяти тел получить в явном виде решение нелинейной системы уравнений ([1], формула (11)) не представляется возможным. Начальные данные получены с использованием численного решения этой системы при заданных массах частиц  $m_1 = 5$ ,  $m_2 = 6$ ,  $m_3 = 7$ ,  $m_4 = 8$ ,  $m_5 = 9$ :

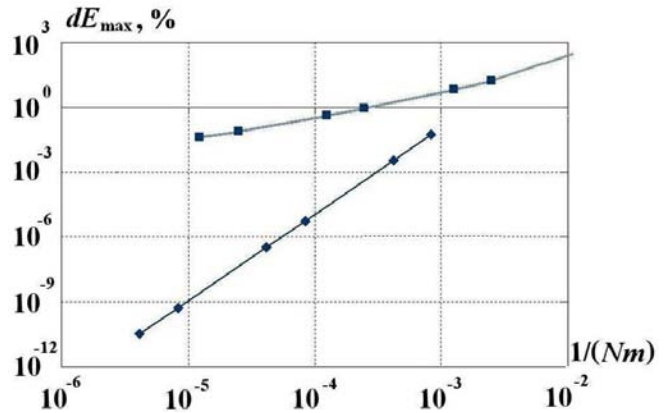


Рис. 9. Расчет эллиптических траекторий трех тел. Зависимость максимального (в интервале времени  $0 < t < 4T$ ) дисбаланса полной энергии частиц от числа обращений к функции вычисления сил: —◆— RKN4; —■— Verlet ( $N$  — число шагов,  $m$  — количество стадий разностной схемы)

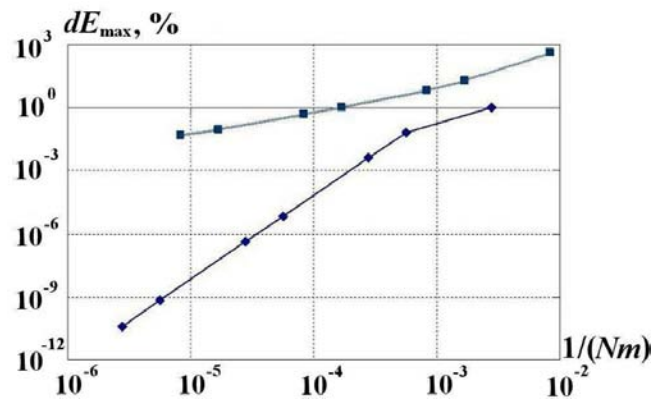


Рис. 11. Расчет параболических траекторий трех тел. Зависимость максимального (в интервале времени  $0 < t < 50$ ) дисбаланса полной энергии частиц от числа обращений к функции вычисления сил: —◆— RKN4; —■— Verlet

$$\begin{aligned}
 (x_1, y_1) &= (1,653\ 168\ 149\ 232\ 52; -1,785\ 811\ 020\ 808\ 70); \\
 (x_2, y_2) &= (-2,603\ 123\ 828\ 153\ 07; -1,785\ 811\ 020\ 808\ 70); \\
 (x_3, y_3) &= (-1,118\ 723\ 159\ 839\ 59; -0,705\ 916\ 706\ 154\ 389); \\
 (x_4, y_4) &= (1,539\ 561\ 308\ 964\ 25; 2,366\ 306\ 680\ 768\ 69); \\
 (x_5, y_5) &= (0,318\ 608\ 207\ 768\ 776; 0,628\ 320\ 525\ 091\ 879); \\
 (u_{xi}, u_{yi}) &= (-y_i\sqrt{1+e}, x_i\sqrt{1+e}).
 \end{aligned}$$

Как и ранее, период обращения по орбитам для  $e < 1$  равен  $T = 2\pi(1-e)^{-3/2}$ . В зависимости от начальных скоростей траектории (орбиты) точек являются эллипсами ( $E < 0$ ), параболами ( $E = 0$ ) или гиперболами ( $E > 0$ ).

Полная энергия всей системы

$$E = \sum_{i=1}^5 \left[ \frac{m_i(u_{xi}^2 + u_{yi}^2)}{2} - \sum_{j \neq i} \frac{m_i m_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right] = \sum_{i=1}^5 E_{0i} = \frac{e-1}{2} \sum_{i=1}^5 m_i r_{0i}^2.$$

Задача решена для эллиптических орбит с  $e = 0,75$ . Шаг интегрирования полагался равным  $\Delta t = 0,01T = 0,502\ 65$ , где  $T$  — период обращения по орбите.

На рис. 12 (см. также цветную вкладку) представлены траектории движения частиц, полученные в расчетах со схемами Verlet и RKN4. В расчетах с RKN4 положение частиц в интервале устойчивости  $t \lesssim T$  близко к аналитическому решению. Как и ранее, в расчетах Verlet частицы значительно отклоняются от стационарных траекторий. Данные о дисбалансе полной энергии также свидетельствуют о превосходстве схемы RKN4 (рис. 13).

Условия устойчивости для общей задачи пяти тел авторам не известны. Выяснилось, что диапазон устойчивости численного решения для данной задачи сузился и составил примерно один период (в отличие от задачи трех тел, где он составлял примерно шесть периодов).

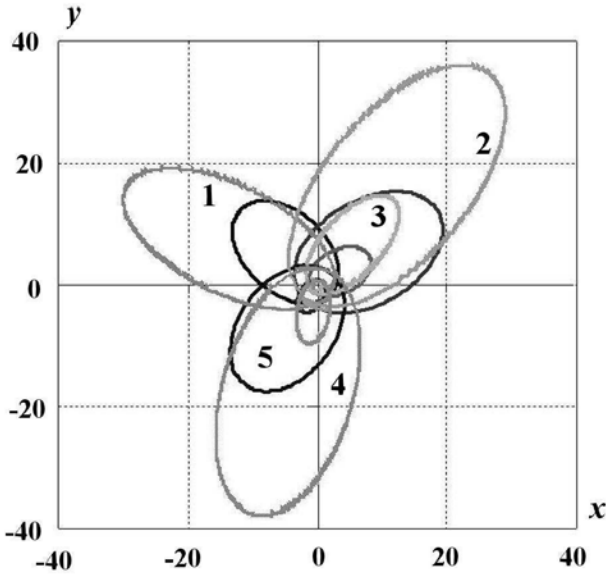


Рис. 12. Задача пяти тел. Эллиптические траектории частиц (1–5) в интервале времени  $0 < t < T$ ;  $e = 0,75$ : — RKN4; - - Verlet

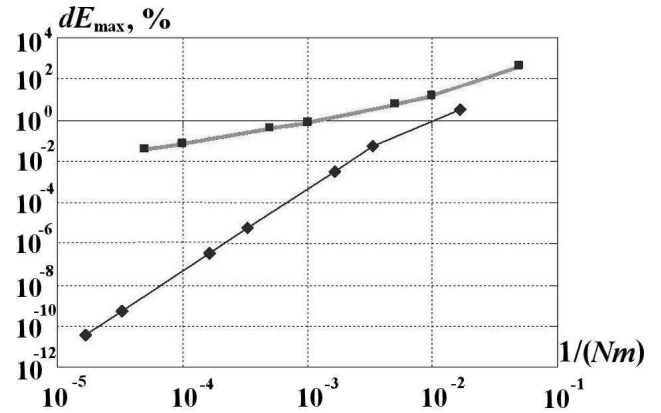


Рис. 13. Расчет эллиптических траекторий пяти тел. Зависимость максимального (в интервале времени  $0 < t < T$ ) дисбаланса полной энергии частиц от числа обращений к функции вычисления сил: —◆— RKN4; - - Verlet

## 5. Движение частиц в центральном поле потенциала Морзе

Рассматривается движение двух частиц массой  $m_1 = m_2 = m$  с потенциалом межчастичного взаимодействия Морзе:

$$U_M(r) = D \left[ e^{-2\beta(r-a)} - 2e^{-\beta(r-a)} \right], \quad D, \beta, a = \text{const.}$$

В момент  $t = 0$  задана скорость разлета частиц, направленная вдоль прямой линии, соединяющей эти частицы. Их начальное положение соответствует равновесному состоянию:  $r_1 = 0,5a$ ;  $r_2 = -0,5a$ ;  $u_1 = u_0$ ,  $u_2 = -u_0$ . Значения параметров потенциала  $\beta = 4$ ,  $D = \frac{1}{4\beta^2} = 0,015625$  выбираем так, чтобы частота малых колебаний была равна единице:  $\omega = 2\sqrt{\frac{D\beta^2}{m}} = 1$ .

При  $b = \sqrt{\frac{mu_0^2}{D}} < 1$  частицы колеблются около положения равновесия с периодом  $T = \frac{\pi}{\beta} \sqrt{\frac{m}{D(1-b^2)}}$ . Значению  $b = 1$  соответствует режим разлета, при котором частицы останавливаются на бесконечности. Если начальная кинетическая энергия частиц больше размера потенциальной ямы ( $b > 1$ ), то частицы разлетаются на бесконечность с конечной скоростью, отличной от нуля.

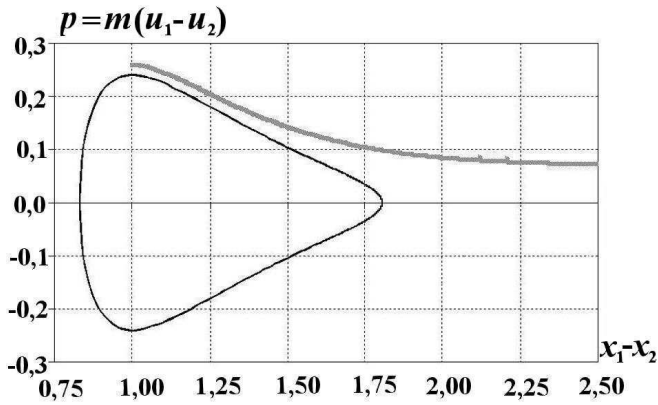


Рис. 14. Траектории относительного движения частиц на фазовой плоскости,  $\Delta t = 0,01 \cdot 2\pi/\omega_0$ : — —  $u_0 = 0,12$ ; — — —  $u_0 = 0,13$

Значению параметра  $b = 1$  соответствует начальная скорость частиц  $u_0 = b\sqrt{\frac{D}{m}} = \frac{1}{8} = 0,125$ .

На рис. 14 представлены результаты расчетов для двух режимов движения частиц с замкнутой ( $u_0 = 0,12$ ,  $b = 0,96$ ) и расходящейся ( $u_0 = 0,13$ ,  $b = 1,04$ ) траекториями на фазовой плоскости. Использование схемы RKN4 позволяет уменьшить меру погрешности по сравнению со схемой Verlet примерно на три порядка (рис. 15, 16).

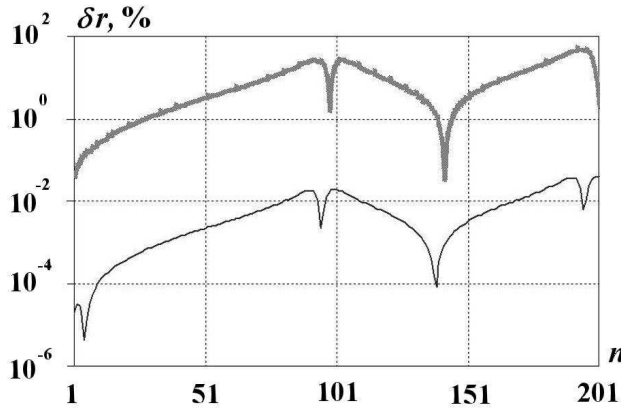


Рис. 15. Мера погрешности численного решения при  $b = 0,96$ ,  $\Delta t = 0,01T$ : — — — RKN4; — — — Verlet

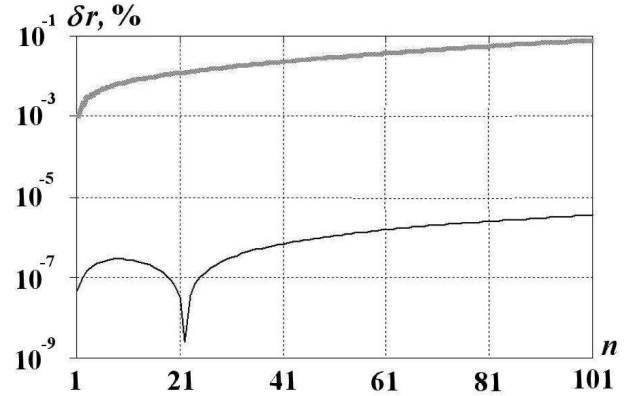


Рис. 16. Мера погрешности численного решения при  $b = 1,04$ ,  $\Delta t = 0,01 \cdot 2\pi/\omega_0$ : — — — RKN4; — — — Verlet

## 6. Движение частицы в поле сил модифицированного потенциала Морзе

Модифицированный потенциал Морзе не является центральным, так как зависит не только от расстояния между частицами, но и от полярного угла:

$$U_{MM}(r, \varphi) = U_M(r) \theta(\varphi), \quad U_M(r) = D [e^{-2\beta(r-a)} - 2e^{-\beta(r-a)}], \quad \theta(\varphi) = d + b \cos^2 \varphi, \quad (4)$$

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



В двух частных случаях (движение вдоль лучей и движение по окружности) решение задачи о движении частицы в поле потенциала  $U_{MМ}(r, \varphi)$  может быть представлено в элементарных функциях.

**6.1. Движение частицы вдоль лучей покоя модифицированного потенциала Морзе.** Пусть  $d = 0, b = 1$ . В этом случае в поле модифицированного потенциала Морзе существуют два луча покоя:  $\varphi = \pi/2$  и  $\varphi = 3\pi/2$ . На этих лучах сила, действующая на частицу, равна нулю:  $F = -\text{grad } U = 0$ . Если в начальный момент времени угловая координата принимает значение  $\varphi = \pi/2$  или  $\varphi = 3\pi/2$ , а скорость направлена вдоль этого луча, то частица движется по инерции:

$$\begin{aligned} x(t) &= x(0) + tu_x(0); & y(t) &= y(0) + tu_y(0); \\ u(t) &= u_x(0) = U_0 \cos \varphi; & u_y(t) &= u_y(0) = U_0 \sin \varphi; & \varphi &= \pi/2, 3\pi/2. \end{aligned}$$

Расчеты по схемам Verlet и RKN4 не выявили признаков неустойчивости при движении частицы вдоль лучей покоя.

**6.2. Круговое движение частицы.** Параметры модифицированного потенциала Морзе:  $D = 1, a = 1, \beta = 4, d = 0, b = 1$ . Начальные данные:

$$x_0 = r_0 \cos \varphi_0; \quad y_0 = r_0 \sin \varphi_0; \quad u_{x0} = -r_0 \omega \sin \varphi_0; \quad u_{y0} = r_0 \omega \cos \varphi_0.$$

Здесь  $\varphi_0 = 0$ , параметры  $\omega = \sqrt{-\frac{2U_M(r_0)}{r_0^2} \theta(\varphi_0)} = 1,240\,132\,348$ ,  $r_0 = 1,088\,508\,355$  определены из уравнений (14) работы [1]. Решение задачи представлено в [1, разд. 3]:

$$r(t) = r_0; \quad \varphi(t) = \arcsin(\text{th}(\omega t)).$$

Согласно аналитическому решению траекторией движения частицы является четверть окружности — частица, стремясь к точке  $(r_0, \pi/2)$ , никогда не достигает ее:

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \varphi(t) = \pi/2.$$

Расчетные траектории частицы изображены на рис. 17, 18 (см. также цветную вкладку). Точки  $(r_0, \pm\pi/2)$  являются точками неустойчивого равновесия для потенциала  $U_{MМ}(r, \varphi)$  (4). Этим объясняется поведение численного решения: после продолжительного нахождения на очередной полочке  $\varphi = \pi/2, \varphi = 3\pi/2$ , или  $\varphi = 5\pi/2$  траектория уходит на следующую ветвь решения, расположенную в соседней полуплоскости. При уменьшении шага интегрирования частица пересекает границу  $\varphi = \pi/2$  в более поздний момент времени. В расчетах Verlet частица после пересечения линии  $\varphi = \pi/2$  остается в левой полуплоскости (см. рис. 17, 18).

Потенциальная энергия частицы обращается в нуль на лучах  $\varphi = \pm\pi/2$ , поэтому отсутствие дисбаланса гарантирует невозможность пересечения частицей этих лучей. Таким образом, точность расчета напрямую зависит от выполнения

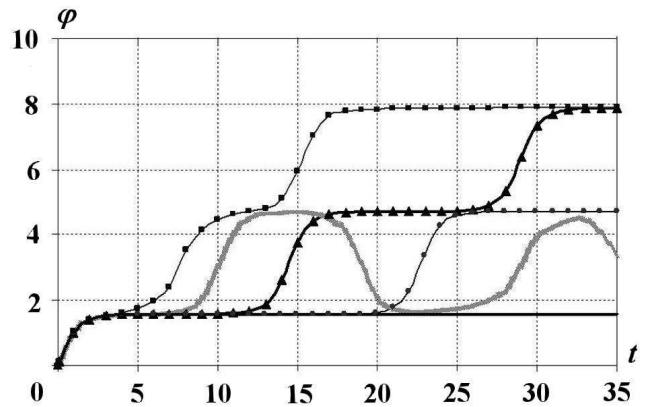


Рис. 17. Зависимость полярного угла частицы от времени при ее круговом движении: —▲— RKN4,  $dt = 0,1$ ; —●— RKN4,  $dt = 0,01$ ; —■— Verlet,  $dt = 0,1$ ; —▣— Verlet,  $dt = 0,01$ ; — — аналитическое решение

в разностном решении закона сохранения энергии. Максимальный дисбаланс полной энергии уменьшен в расчетах RKN4 на несколько порядков (рис. 19). Так как полная энергия частицы при ее круговом движении равна нулю, то дисбаланс нормировался на начальную кинетическую энергию.

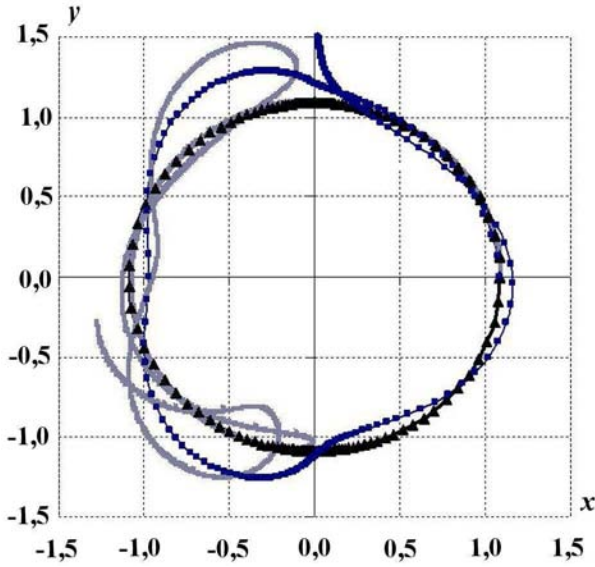


Рис. 18. Траектория кругового движения частицы в поле сил модифицированного потенциала Морзе: —▲— RKN4,  $dt = 0,1$ ; —■— Verlet,  $dt = 0,1$ ; — Verlet,  $dt = 0,01$

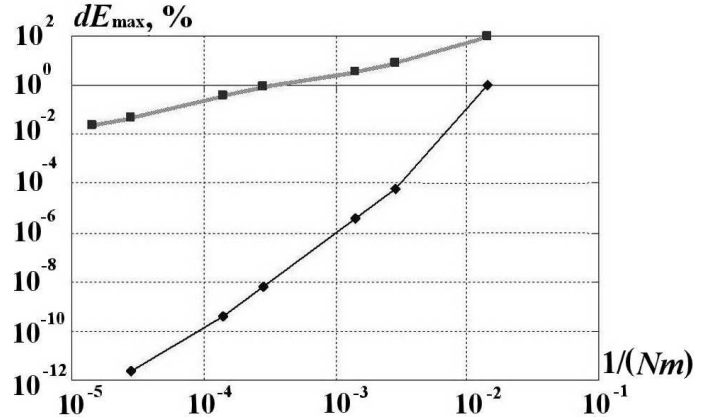


Рис. 19. Расчет круговой траектории. Зависимость максимального (в интервале времени  $0 < t < 35$ ) дисбаланса полной энергии частицы от числа обращений к функции вычисления сил: —◆— RKN4; —■— Verlet

## 7. Движение системы тел, взаимодействие которых описывается потенциалом Леннарда-Джонса

Тест о пространственном движении семи частиц предложен в [3]. Рассматривается потенциал типа Леннарда-Джонса:

$$U_{LD}(r) = U_0 \frac{nm}{n-m} \left[ \frac{1}{n} \left( \frac{r_0}{r} \right)^n - \frac{1}{m} \left( \frac{r_0}{r} \right)^m \right], \quad n, m = \text{const}, \quad U_0 = \text{const}, \quad r_0 = \text{const}.$$

В момент времени  $t = 0$  первая частица ( $i = 1$ ) расположена в центре системы координат:  $\vec{r}_1 = (0, 0, 0)$ . Остальные шесть находятся на координатных осях на одинаковом расстоянии от центра:

$$\begin{aligned} \vec{r}_2 &= (0, 75r_0, 0, 0); & \vec{r}_3 &= (-0, 75r_0, 0, 0); & \vec{r}_4 &= (0, 0, 75r_0, 0); \\ \vec{r}_5 &= (0, -0, 75r_0, 0); & \vec{r}_6 &= (0, 0, 0, 75r_0); & \vec{r}_7 &= (0, 0, 0, -0, 75r_0). \end{aligned}$$

Начальные скорости всех частиц равны нулю. В последующие моменты времени центральная частица остается неподвижной; другие шесть движутся вдоль координатных осей так, что все они оказываются удаленными на одинаковое расстояние от начала координат. Для частного случая ( $n = 2, m = 1, U_0 = 1$ ) получено [3] точное решение (в элементарных функциях):

$$\begin{aligned} \frac{r}{r_0} + \frac{\alpha}{2} &= -\beta \cos \left( \frac{2}{\alpha} \left[ \sqrt{\beta^2 - \left( \frac{r}{r_0} + \frac{\alpha}{2} \right)^2} + \sqrt{-\frac{H_{07}}{2}t} \right] \right), \\ H_{07} &= \frac{2 - 12\sqrt{2}}{9}, \quad \alpha = \frac{5 + 4\sqrt{2}}{4H_{07}}, \quad \beta = \sqrt{\left( \frac{\alpha}{2} \right)^2 + \frac{17}{16H_{07}}}. \end{aligned} \quad (5)$$

Период колебаний  $T = 2\pi \left( -\frac{\alpha}{\sqrt{-2H_{07}}} \right)$ , амплитуда  $r_{\min} = r_0 \left( -\frac{\alpha}{2} - \beta \right) = 0,75r_0$ ,  $r_{\max} = r_0 \left( -\frac{\alpha}{2} + \beta \right)$ . Полученные в расчетах RKN4 и Verlet ( $\Delta t = 0,01T$ )  $(r, t)$ -диаграммы движения частиц,  $i = 2, 3, \dots, 7$ , с точностью до графического изображения совпадают между собой и с аналитическим решением (5). По сравнению с расчетами Verlet дисбаланс полной энергии в расчетах RKN4 уменьшен примерно на четыре порядка (рис. 20).

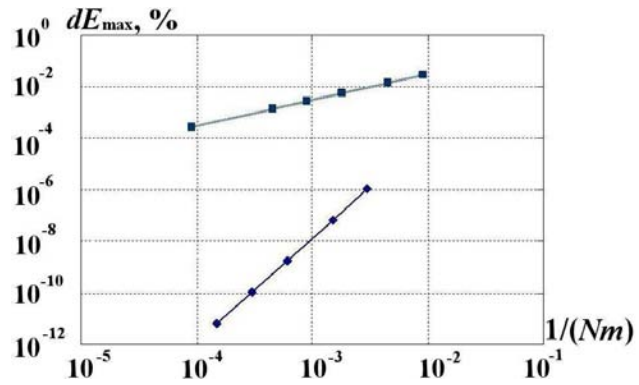


Рис. 20. Расчет пространственного движения семи частиц. Зависимость максимального (в интервале времени  $0 < t < 2T$ ) дисбаланса полной энергии частиц от числа обращений к функции вычисления сил: —◆— — RKN4; —■— — Verlet

### Выводы

1. Проведены расчеты тестовых задач для потенциалов Ньютона, Морзе и Леннарда-Джонса, позволившие оценить точность разностных схем RKN4 и Verlet и выяснить особенности поведения этих схем и численных решений в случае нарушения условий устойчивости аналитических решений.
2. Тестовые расчеты показали существенное превосходство схемы RKN4 по сравнению с широко используемой в расчетах молекулярной динамики схемой Verlet.

### Список литературы

1. Шемарулин В. Е., Софронов В. Н., Мокина К. С. Разностные схемы молекулярной динамики. Система двумерных тестов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2011. Вып. 3. С. 3—15.
2. Софронов В. Н., Мокина К. С., Шемарулин В. Е. Разностные схемы молекулярной динамики. 1. Сравнительный анализ устойчивости, точности и экономичности // Там же. Вып. 2. С. 18—32.
3. Алейников А. Ю., Барабанов Р. А., Бутнев О. И. и др. Программа МДП-СОВЦ решения задач молекулярной динамики на параллельных ЭВМ с распределенной памятью // Там же. 2001. Вып. 1. С. 3—13.

Статья поступила в редакцию 09.11.10.