

УДК 519.622.2

Трехстадийные симплектические разностные схемы молекулярной динамики: описание, классификация, численно- аналитическое исследование

В. Н. Софронов, В. Е. Шемарулин

Представлены результаты исследования многообразия трехстадийных симплектических разностных схем, предназначенных для численного решения натуральных гамильтоновых систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Рассматриваются только явные схемы. Проведена классификация трехстадийных схем 3-го порядка, образующих двухпараметрическое семейство; предъявлены все схемы 4-го порядка (их оказалось 7); доказано отсутствие схем 5-го порядка точности. Перечислены схемы, оптимальные по фазовой ошибке; показано, что в этом семействе нет схем 4-го порядка. Результаты численных расчетов демонстрируют качества перечисленных схем. Схемы сравниваются по соотношению «точность – экономичность».

Введение

В работе дано исчерпывающее описание многообразия явных трехстадийных симплектических схем, предназначенных для решения натуральных гамильтоновых систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Натуральными гамильтоновыми системами здесь (по аналогии с натуральными лагранжевыми) называются гамильтоновы системы, функции Гамильтона которых являются суммами кинетической и потенциальной энергий (распадаются): $H(\bar{r}, \bar{p}) = K(\bar{p}) + U(\bar{r})$.

Особая роль натуральных систем обусловлена тем, что на практике, как правило, приходится иметь дело именно с такими системами. В частности, они естественным образом возникают в задачах молекулярной динамики.

Дискретные методы решения дифференциальных уравнений требуют больших вычислительных ресурсов, поэтому поиск разностных схем, оптимальных по соотношению «точность – экономичность», является важной и актуальной задачей. По мнению авторов, поиск оптимальных схем следует проводить в классе симплектических схем, сохраняющих гамильтонову структуру исходных дифференциальных уравнений ([1, 2]). Для систем с гамильтонианами общего вида не суще-

ствуется явных симплектических схем ([2, 3]). Численная реализация неявных схем для задач с большим количеством частиц требует значительных вычислительных затрат. Поэтому с прикладной точки зрения наибольший интерес представляют системы с распадающимися гамильтонианами.

Интерес к трехстадийным схемам связан с поиском схем высокого порядка аппроксимации. Известно, что в классе одностадийных явных схем существует единственная симплектическая схема второго порядка аппроксимации – схема Verlet (получившая в связи с этим наибольшее распространение в молекулярно-динамическом (МД) моделировании), а среди двухстадийных симплектических схем не существует схем с порядком аппроксимации выше второго. В классе же трехстадийных схем существуют схемы как третьего, так и четвертого порядка. При этом схемы третьего порядка образуют нетривиальное двухпараметрическое семейство.

Основной целью настоящей работы является решение проблемы описания многообразия явных трехстадийных симплектических схем. Надеемся, что она послужит стимулом для продолжения исследований в данной области: в частности, развитая в конце прошлого века техника базисов Гребнера, использованная в процессе решения проблемы, может применяться для описания многообразий симплектических схем с числом стадий больше трех.

1. Общие замечания о симплектических методах

Рассматривается система с $3N$ степенями свободы, состояние которой определяется обобщенными координатами $\vec{r} = (\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ и импульсами $\vec{p} = m\vec{u} = (\vec{p}_1, \vec{p}_2, \dots, \vec{p}_N) = (m_1\vec{u}_1, m_2\vec{u}_2, \dots, m_N\vec{u}_N)$. Динамические переменные $\vec{r}(t), \vec{p}(t)$, изменяются со временем согласно уравнениям Гамильтона:

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

Потенциал взаимодействия является парным, функция Гамильтона имеет вид:

$$H(\vec{r}, \vec{p}) = K(\vec{p}) + U(\vec{r}) = \sum_i \frac{|\vec{p}_i|^2}{2m_i} + \sum_i \sum_{j \neq i} U(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|), \quad i, j = 1, 2, \dots, N.$$

Фазовый поток $G: R^{6N}(\vec{p}, \vec{r}) \rightarrow R^{6N}(\vec{p}, \vec{r})$ гамильтоновой системы преобразует начальное состояние $\vec{r}(t=0), \vec{p}(t=0)$ в текущее $\vec{r}(t), \vec{p}(t)$, сохраняя симплектическую структуру на $R^{6N}(\vec{p}, \vec{r})$, заданную 2-формой [4]:

$$\omega^2 = \sum_i d\vec{p}_i \wedge d\vec{r}_i, \\ d\vec{p}_i \wedge d\vec{r}_i = dp_{ix} \wedge dx_i + dp_{iy} \wedge dy_i + dp_{iz} \wedge dz_i.$$

Из сохранения симплектической структуры следует инвариантность интегралов $\int (\omega^2)^L = \text{const}$, $(\omega^2)^L = \omega^2 \wedge \omega^2 \dots \wedge \omega^2$, $1 \leq L \leq 3N$ по соответствующим $2L$ -многообразиям. Конструкция данных

инвариантов состоит в последовательном применении операции внешнего умножения 2-форм. Последним в ряду перечисленных инвариантов стоит фазовый объем.

Для симплектичности преобразования необходимо и достаточно, чтобы матрица Якоби D фазового потока удовлетворяла соотношению [4]

$$(D)^T JD = J, \quad J = \begin{pmatrix} 0 & -E_{3N} \\ E_{3N} & 0 \end{pmatrix},$$

где E_{3N} – единичная матрица порядка $3N$.

Одношаговый разностный метод называется симплектическим, если оператор перехода $D^{n+1} = \partial(\bar{r}^{n+1}, \bar{p}^{n+1}) / \partial(\bar{r}^n, \bar{p}^n)$ осуществляет симплектическое преобразование динамических переменных на каждом временном шаге [5, 6]:

$$(D^{n+1})^T JD^{n+1} = J. \quad (1)$$

2. Условие симплектичности для схем Рунге – Кутты – Нистрема

Для m -стадийных разностных схем Рунге – Кутты – Нистрема (RKN)

$$\begin{aligned} \bar{r}^{n+1} &= \bar{r}^n + \Delta t \bar{u}^n + \Delta t^2 \sum_{l=1}^{l=m} \beta_l \bar{\phi}(\bar{\xi}^l), & \bar{u}^{n+1} &= \bar{u}^n + \Delta t \sum_{l=1}^{l=m} \gamma_l \bar{\phi}(\bar{\xi}^l), \\ \bar{\xi}^l &= \bar{r}^n + \Delta t \alpha_l \bar{u}^n + \Delta t^2 \sum_{k=1}^m a_{lk} \bar{\phi}(\bar{\xi}^k) \end{aligned} \quad (2)$$

условие симплектичности (1) будет выполняться при следующих ограничениях на коэффициенты разностной схемы [5, 6]:

$$\beta_l = \gamma_l (1 - \alpha_l), \quad \gamma_l a_{lk} - \gamma_k a_{kl} + \gamma_l \gamma_k (\alpha_k - \alpha_l) = 0, \quad l, k = 1, 2, \dots, m.$$

Для явных схем матрица a_{lk} – нижнетреугольная, связь коэффициентов матрицы с параметрами α_l, γ_l устанавливается однозначным образом:

$$a_{lk} = \begin{cases} 0, & 1 \leq l \leq k \leq m \\ \gamma_k (\alpha_l - \alpha_k), & 1 \leq k < l \leq m. \end{cases}$$

Следующим шагом при построении разностной схемы является выполнение условий порядка на коэффициенты. Эти условия возникают в результате приравнивания коэффициентов в степенных разложениях точного и численного решений, что обеспечивает нужный порядок аппроксимации.

В дальнейшем схемы с мнимыми параметрами рассматриваются наряду с вещественными и включаются в общий список, хотя вопросы реализации таких схем требуют отдельного изучения. Заметим, что сам факт использования схем с мнимыми коэффициентами не является новым. В качестве примера можно указать схему Розенброка (CROS) [7].

В классе одностадийных схем $m = 1$ существует единственная симплектическая схема второго порядка – схема Verlet [8] с параметрами $\alpha_1 = 0,5$, $\gamma_1 = 1$. Данная схема получила наибольшее распространение в МД-моделировании.

Порядок аппроксимации выше второго может быть получен только для схем с числом стадий $m \geq 3$ [5]. Параметрами трехстадийных симплектических схем являются два вектора $\alpha = (\alpha_i)$ и $\gamma = (\gamma_i)$ размерности $m = 3$. В дальнейшем семейства трехстадийных схем отождествляются с соответствующими подмножествами в пространстве параметров $R^6(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3)$.

3. Классификация трехстадийных схем третьего порядка

Для аппроксимации $O(\Delta t^3)$ требуется выполнение четырех соотношений:

$$\begin{aligned} F_1 &= \gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3 - 1 = 0, \\ F_2 &= \alpha_1 \gamma_1 + \alpha_2 \gamma_2 + \alpha_3 \gamma_3 - 1/2 = 0, \\ F_3 &= \alpha_1^2 \gamma_1 + \alpha_2^2 \gamma_2 + \alpha_3^2 \gamma_3 - 1/3 = 0, \\ F_4 &= \gamma_1 \gamma_2 (\alpha_2 - \alpha_1) + \gamma_1 \gamma_3 (\alpha_3 - \alpha_1) + \gamma_2 \gamma_3 (\alpha_3 - \alpha_2) - 1/6 = 0. \end{aligned} \quad (3)$$

В пространстве $R^6(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3)$ семейство схем третьего порядка представляет собой множество M_3 , получаемое следующим образом [9]. Из многообразия $\Phi_4 = \alpha_2^2(-36\alpha_1\alpha_3 + 24\alpha_1 + 12\alpha_3 - 9) + \alpha_2(36\alpha_1^2\alpha_3 + 36\alpha_3^2\alpha_1 - 24\alpha_1^2 - 12\alpha_3^2 - 36\alpha_1\alpha_3 + 9\alpha_1 + 9\alpha_3) - 24\alpha_1\alpha_3^2 - 12\alpha_1^2\alpha_3 + 9\alpha_1^2 + 9\alpha_3^2 + 33\alpha_1\alpha_3 - 12\alpha_1 - 12\alpha_3 + 4 = 0$ исключаются точки, имеющие равные координаты $\alpha_i = \alpha_j$, $\forall i \neq j$. К полученному многообразию добавляются:

– две мнимые точки, лежащие на плоскости $\alpha_1 = \alpha_2$:

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \frac{9 \pm i\sqrt{3}}{12}, \quad \alpha_3 = \frac{3\alpha_1 - 2}{3(2\alpha_1 - 1)}, \quad \gamma_2 = \frac{2\alpha_1\gamma_1 - 2\alpha_3\gamma_1 + 2\alpha_3 - 1}{2(\alpha_1 - \alpha_3)}, \quad \gamma_3 = \frac{2\alpha_1 - 1}{2(\alpha_1 - \alpha_3)}; \quad (4)$$

– две мнимые точки, лежащие на плоскости $\alpha_2 = \alpha_3$ (в формулах (4) переменные α_1 , α_3 меняются местами);

– однопараметрическое семейство точек (вещественных и мнимых), лежащих на плоскости $\alpha_1 = \alpha_3$ (параметр α_1 , различающий схемы, принимает любое значение, отличное от $1/2$ и $(3 \pm i\sqrt{3})/6$):

$$\alpha_3 = \alpha_1, \alpha_2 = \frac{3\alpha_1 - 2}{3(2\alpha_1 - 1)}, \gamma_1 = -\frac{12\alpha_1^2 - 18\alpha_1 + 7}{24(3\alpha_1^2 - 3\alpha_1 + 1)(2\alpha_1 - 1)},$$

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

Многообразие $\Phi_4 = 0$ имеет две асимптотические плоскости $\alpha_1 = 1/3$, $\alpha_2 = 2/3$ и две полуасимптотические плоскости в областях (рис. 1, см. также цв. вкл.) $\alpha_3 > \alpha_1$, $(\alpha_2 = 2/3, \alpha_2 = \alpha_1 + \alpha_3 + 2/3)$ и $\alpha_3 < \alpha_1$, $(\alpha_2 = 1/3, \alpha_2 = \alpha_1 + \alpha_3 + 1/3)$.

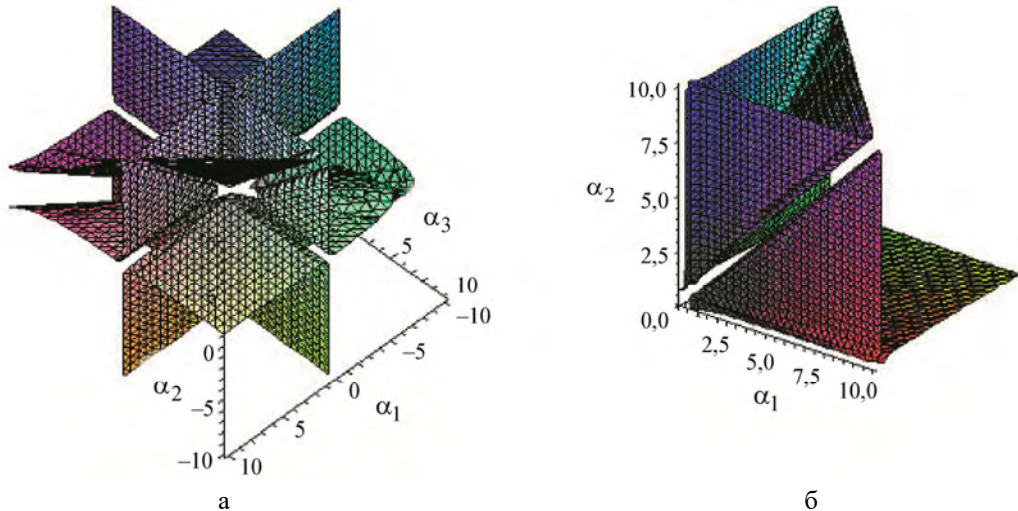


Рис. 1. Структура многообразия параметров $\Phi_4 = 0$ в окрестности начала системы координат:
 а – область изменения параметров $-10 < \alpha_i < 10$, $i = 1, 2, 3$;
 б – фрагмент области в положительном октанте $0 < \alpha_i < 10$, $i = 1, 2, 3$

4. Классификация трехстадийных схем четвертого порядка

Порядок аппроксимации может быть увеличен до четырех, если к системе (3) добавить соотношения

$$\begin{aligned} F_5 &= \alpha_1^3\gamma_1 + \alpha_2^3\gamma_2 + \alpha_3^3\gamma_3 - 1/4 = 0, \\ F_6 &= \alpha_1\gamma_1\gamma_2(\alpha_2 - \alpha_1) + \alpha_1\gamma_1\gamma_3(\alpha_3 - \alpha_1) + \alpha_2\gamma_2\gamma_3(\alpha_3 - \alpha_2) - 1/24 = 0, \\ F_7 &= \alpha_2\gamma_1\gamma_2(\alpha_2 - \alpha_1) + \alpha_3\gamma_1\gamma_3(\alpha_3 - \alpha_1) + \alpha_3\gamma_2\gamma_3(\alpha_3 - \alpha_2) - 1/8 = 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Задача описания трехстадийных схем четвертого порядка аппроксимации эквивалентна нахождению общего решения системы семи уравнений (3), (5). Полученная система имеет конечное число решений. Решение системы элементарными средствами – трудоемкая процедура. Проще использовать технику базисов Гребнера [10], реализованную в пакете программ Maple 12 [11].

Минимальный редуцированный базис Гребнера системы (3), (5) состоит из 6 полиномов:

$$\begin{aligned} B_1 &= 1 + 15\gamma_3 - 228\gamma_3^2 + 1218\gamma_3^3 - 3510\gamma_3^4 + 5868\gamma_3^5 - 5184\gamma_3^6 + 1728\gamma_3^7, \\ B_2 &= -1877 - 11224\gamma_3 + 138720\gamma_3^2 - 578046\gamma_3^3 + 1276020\gamma_3^4 - 1405440\gamma_3^5 + 537408\gamma_3^6 + 2398\gamma_2, \\ B_3 &= -521 - 13622\gamma_3 - 138720\gamma_3^2 + 578046\gamma_3^3 - 1276020\gamma_3^4 + 1405440\gamma_3^5 - 537408\gamma_3^6 + 2398\gamma_1, \\ B_4 &= -3418 - 39603\gamma_3 + 218880\gamma_3^2 - 626304\gamma_3^3 + 1058688\gamma_3^4 - 965376\gamma_3^5 + 331776\gamma_3^6 + 7194\alpha_3, \\ B_5 &= -2919 + 16020\gamma_3 - 138720\gamma_3^2 + 578046\gamma_3^3 - 1276020\gamma_3^4 + 1405440\gamma_3^5 - 537408\gamma_3^6 + 4796\alpha_2, \\ B_6 &= -3227 - 2526\gamma_3 + 49248\gamma_3^2 - 237318\gamma_3^3 + 574884\gamma_3^4 - 976896\gamma_3^5 + 489024\gamma_3^6 + 14388\alpha_1. \end{aligned}$$

Исходная система уравнений (3), (5) эквивалентна системе $B_i = 0$, $i = 1, 2, 3, \dots, 6$. Уравнение $B_1 = 0$ содержит единственный параметр γ_3 и приводимо, его правая часть является произведением трех полиномов:

$$B_1 = (6\gamma_3^2 - 3\gamma_3 + 1)(6\gamma_3^3 - 12\gamma_3^2 + 6\gamma_3 - 1)(48\gamma_3^2 - 24\gamma_3 - 1) = 0. \quad (6)$$

Остальные пять полиномов дают явные выражения параметров $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \gamma_1, \gamma_2$ через γ_3 .

Семь различных корней уравнения (6) определяют семь решений исходной системы:

– схема RKN4 [12] в исходном и сопряженном (в алгебраическом смысле – с изменением знаков при радикалах) виде:

$$\alpha_1 = \frac{3 \mp \sqrt{3}}{6}, \quad \alpha_2 = \frac{3 \pm \sqrt{3}}{6}, \quad \alpha_3 = \frac{3 \mp \sqrt{3}}{6}, \quad \gamma_1 = \frac{3 \pm 2\sqrt{3}}{12}, \quad \gamma_2 = \frac{1}{2}, \quad \gamma_3 = \frac{3 \mp 2\sqrt{3}}{12}; \quad (7)$$

– схема SIA4 (Symplectic Integration Algorithm) с действительными (8) [13, 14] и мнимыми (9) коэффициентами. Последние получаются из (8) заменой $2^{1/3}$ на $\varepsilon_1 = \exp(2\pi i/3) 2^{1/3}$ и $\varepsilon_2 = \exp(4\pi i/3) 2^{1/3}$:

$$\alpha_1 = \frac{1}{2(2 - 2^{1/3})}, \quad \alpha_2 = \frac{1}{2}, \quad \alpha_3 = 1 - \alpha_1, \quad \gamma_1 = \frac{1}{2 - 2^{1/3}}, \quad \gamma_2 = -\frac{(1 + 2^{1/3})^2}{3}, \quad \gamma_3 = \gamma_1, \quad (8)$$

$$\alpha_1 = \frac{1}{2(2 - \varepsilon_{1,2})}, \quad \alpha_2 = \frac{1}{2}, \quad \alpha_3 = 1 - \alpha_1, \quad \gamma_1 = \frac{1}{2 - \varepsilon_{1,2}}, \quad \gamma_2 = -\frac{(1 + \varepsilon_{1,2})^2}{3}, \quad \gamma_3 = \gamma_1; \quad (9)$$

– схема CRKN4 с мнимыми коэффициентами:

$$\alpha_1 = \frac{1}{8} \pm \frac{\sqrt{15}}{24}i, \quad \alpha_2 = \frac{1}{2} \pm \frac{\sqrt{15}}{12}i, \quad \alpha_3 = \frac{7}{8} \pm \frac{\sqrt{15}}{24}i, \quad \gamma_1 = \frac{1}{4} \pm \frac{\sqrt{15}}{12}i, \quad \gamma_2 = \frac{1}{2}, \quad \gamma_3 = \frac{1}{4} \pm \frac{\sqrt{15}}{12}i. \quad (10)$$

5. Отсутствие трехстадийных схем пятого порядка

Система уравнений для нахождения коэффициентов трехстадийных схем пятого порядка аппроксимации состоит из тринадцати уравнений: к системе (3), (5) добавляются шесть уравнений, два из которых непосредственно следуют из приведенных ниже четырех:

$$F_8 = \alpha_1^4 \gamma_1 + \alpha_2^4 \gamma_2 + \alpha_3^4 \gamma_3 - 1/5 = 0,$$

$$F_9 = \alpha_2^2 \gamma_1 \gamma_2 (\alpha_2 - \alpha_1) + \alpha_3^2 \gamma_1 \gamma_3 (\alpha_3 - \alpha_1) + \alpha_3^2 \gamma_2 \gamma_3 (\alpha_3 - \alpha_2) - 1/10 = 0,$$

$$F_{10} = \gamma_1 \gamma_2 (\alpha_2 - \alpha_1) (\alpha_2 + \alpha_1)^2 + \gamma_1 \gamma_3 (\alpha_3 - \alpha_1) (\alpha_3 + \alpha_1)^2 + \gamma_2 \gamma_3 (\alpha_3 - \alpha_2) (\alpha_3 + \alpha_2)^2 - 11/60 = 0,$$

$$F_{11} = F_{12} = \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 (\alpha_2 - \alpha_1) (\alpha_3 - \alpha_2) - 1/120 = 0.$$

Данная система является несовместной, так как ее базис Гребнера состоит из 1: $B_G = \{1\}$. Это означает, что трехстадийных симплектических схем пятого порядка не существует.

6. Обратимые схемы

Обратимыми (симметричными [15]) называют схемы, инвариантные относительно перестановок

$$\vec{r}^n \leftrightarrow \vec{r}^{n+1}, \vec{u}^n \leftrightarrow \vec{u}^{n+1}, \Delta t \leftrightarrow -\Delta t. \quad (11)$$

Условия симметричности (11) сводятся к следующим ограничениям на коэффициенты схемы (2):

$$\alpha_{m+1-l} + \alpha_l = 1, \gamma_{m+1-l} = \gamma_l, l = 1, 2, \dots, m. \quad (12)$$

Список обратимых схем может быть получен проверкой совместности уравнений (12) с системой (3) или системой (3), (5). Из этого списка следует сразу исключить схемы третьего порядка, так как все симметричные схемы имеют четный порядок аппроксимации [15]. Поскольку в двухпараметрическом семействе трехстадийных схем существует конечное число (а именно семь) схем четвертого порядка, то самым простым способом выделения обратимых схем является прямая проверка коэффициентов этих схем на выполнение условий (12). Таким образом выясняется, что в двухпараметрическом семействе трехстадийных симплектических схем существуют только три обратимых схемы (8–9). Заметим, что в классе одностадийных явных схем единственная схема второго порядка Verlet также является обратимой.

7. Фазовая ошибка. Трехстадийные схемы с фазовой ошибкой шестого порядка

Фазовая ошибка разностной схемы вычисляется для линеаризованной системы уравнений с матрицей перехода G . Если симплектическая схема устойчива, то все корни ее характеристического уравнения $|G - \lambda E| = 0$ лежат на единичной окружности комплексной плоскости [4]. Для матрицы перехода трехстадийных схем характеристическое уравнение

$$\lambda^2 - (G_{11} + G_{22})\lambda + 1 = 0, \quad G_{11} + G_{22} = 2 - K^2 + \frac{K^4}{12} - ZK^6, \quad Z = \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 (\alpha_3 - \alpha_2) (\alpha_2 - \alpha_1) (1 - \alpha_3 + \alpha_1)$$

в области устойчивости $K < K_{CR}$ имеет два комплексно-сопряженных корня. Здесь $K = \omega \Delta t$ – коэффициент Куранта; ω – частота малых колебаний, однозначно определяемая параметрами потенциала.

Фазовой ошибкой будем называть относительную разность частот дифференциального ω и разностного Ω уравнений

$$\delta_F = (\omega - \Omega)/\omega = (K - |\arg(\lambda)|)/K, |\arg(\lambda)| = \arcsin \sqrt{1 - (1 - K^2/2 + K^4/24 - ZK^6/2)^2}.$$

Разложение фазовой ошибки по степеням K позволяет установить связь остаточного члена с коэффициентами схемы:

$$\delta_F = \left(\frac{1}{360} - Z\right) \frac{K^4}{2} + \left(\frac{5}{2016} - Z\right) \frac{K^6}{12} + O(K^8).$$

Трехстадийные схемы с минимальной фазовой ошибкой удовлетворяют условию

$$Z = \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 (\alpha_3 - \alpha_2)(\alpha_2 - \alpha_1)(1 - \alpha_3 + \alpha_1) = 1/360. \quad (13)$$

Соотношение (13) совместно с условиями (3), обеспечивающими третий порядок аппроксимации, определяет однопараметрическое семейство схем с фазовой ошибкой $O(K^6)$. Следует отметить, что в этом семействе нет схем четвертого порядка. Далее многообразие схем третьего порядка, параметры которых удовлетворяют соотношению (13), будем обозначать M_{36} . На плоскости параметров α_1, α_3 многообразие M_{36} описывается уравнением

$$\begin{aligned} \Phi_6 = & \alpha_3^4 (180 - 1440\alpha_1 + 3600\alpha_1^2) + \alpha_3^3 (-540 + 4140\alpha_1 - 8640\alpha_1^2 - 7200\alpha_1^3) + \\ & \alpha_3^2 (606 - 4440\alpha_1 + 7200\alpha_1^2 + 15840\alpha_1^3 + 3600\alpha_1^4) + \alpha_3 (-300 + 2088\alpha_1 - 2220\alpha_1^2 - 11700\alpha_1^3 - 5760\alpha_1^4) + \\ & + 55 - 360\alpha_1 + 126\alpha_1^2 + 2880\alpha_1^3 + 2340\alpha_1^4 = 0. \end{aligned}$$

Каждая точка (α_1, α_3) многообразия M_{36} определяет схему с минимальной фазовой ошибкой, параметры $\alpha_2, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ которой определяются следующим образом: α_2 находится из уравнения $(\Phi_4 = 0)$ многообразия M_3 ; далее по известным $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ вычисляются параметры $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$. В дальнейшем будем использовать разностную схему из семейства M_{36} , параметры которой соответствуют точке пересечения двух гладких ветвей многообразия M_{36} с координатами (рис. 2):

$$\begin{aligned} \alpha_1 = & \frac{(100 + 60\sqrt{5})^{1/3}}{60} - \frac{1}{3(100 + 60\sqrt{5})^{1/3}} + \frac{1}{6}, \\ \alpha_3 = & -\frac{(100 + 60\sqrt{5})^{1/3}}{60} + \frac{1}{3(100 + 60\sqrt{5})^{1/3}} + \frac{5}{6}. \end{aligned} \quad (14)$$

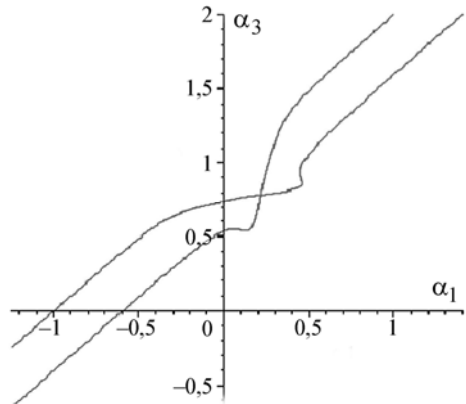


Рис. 2. Связь параметров α_1, α_3 на многообразии M_{36}

Так как порядок фазовой ошибки кратен двум, то в некоторых случаях он может быть выше порядка аппроксимации. Такое несоответствие между этими порядками объясняется тем, что фазовая ошибка характеризует только часть общей аппроксимационной ошибки. По этой причине исследование точности должно быть дополнено оценкой качеств схем с использованием других критериев.

8. Примеры численных расчетов

В качестве меры точности принят дисбаланс полной энергии системы, т. е. отклонение полной энергии системы от начального значения

$$\delta E(t^n) = \left| (E^n - E^0) / E^0 \right|, \quad E^n = 0,5 \sum_i m_i \left| \vec{u}_i^n \right|^2 + \sum_i \sum_{j \neq i} U \left(\left| \vec{r}_i^n - \vec{r}_j^n \right| \right).$$

В расчетах на сходимость вычислялось среднее значение дисбаланса в заданном временном интервале (S – число шагов): $\Delta E(t_1 < t < t_S) = \sum_{n=1}^{n=S} \delta E(t_n) / S$. Качество схем оценивается по объему

выполненной работы для получения заданной точности. Всюду предполагается, что объем выполненной работы пропорционален числу шагов и числу стадий разностной схемы ($\sim Sm$). Из многообразия трехстадийных схем для исследования выбраны схемы с лучшими аппроксимационными свойствами: две схемы четвертого порядка (SIA4, RKN4) и схема (14) с минимальной фазовой ошибкой. В число рассматриваемых включена трехстадийная схема Рунге – Кутты ERK3 третьего порядка с набором параметров, обеспечивающим минимальную невязку [16]. Схема ERK3 понадобилась только для того, чтобы выяснить, насколько важно выполнение условия симплектичности в задачах молекулярной динамики.

8.1. Гармонический осциллятор

Рассматривается движение частицы заданной массы $m = 1$ в гармоническом потенциальном поле $U(r) = 0,5\omega^2 (r - r_0)^2$, описываемое известным решением $r_a = r_0 + r_0 \sin(\omega t)$, $u_a = u_0 \cos(\omega t)$. Начальные данные [17]: $r(t=0) = r_0 = 1$, $u(t=0) = u_0 = 1$, $\omega = 1$, $\Delta t = K/\omega$.

В серии расчетов вычислялось среднее значение дисбаланса энергии ΔE за время, равное 1000 периодам ($t_S = 1000T$, $T = 2\pi/\omega$). Варьировался временной шаг. Зависимость дисбаланса энергии ΔE от объема выполненной работы в двойном логарифмическом масштабе показана на рис. 3,а. Наклон кривых соответствует порядку аппроксимации. Оптимальной по соотношению «точность – экономичность» является схема RKN4.

При сохранении начальной энергии частица движется на фазовой плоскости по окружности единичного радиуса с центром ($r = 1$, $p = 0$). На рис. 4 (см. также цв. вкл.) представлены траектории, полученные в расчетах с шагом $\Delta t = 1$, $K = \omega \Delta t = 1$. Одному периоду колебаний соответствует ~ 6 счетных шагов. Отличительной особенностью симплектических схем RKN4 и SIA4 является отсутствие дрейфа полной энергии даже после 1000 периодов колебаний. В то же время в расчетах со схемой ERK3 за достаточно короткий интервал времени, равный ~ 15 периодам, дисбаланс полной энергии приближается к 100 %, что приводит к полному затуханию колебаний.

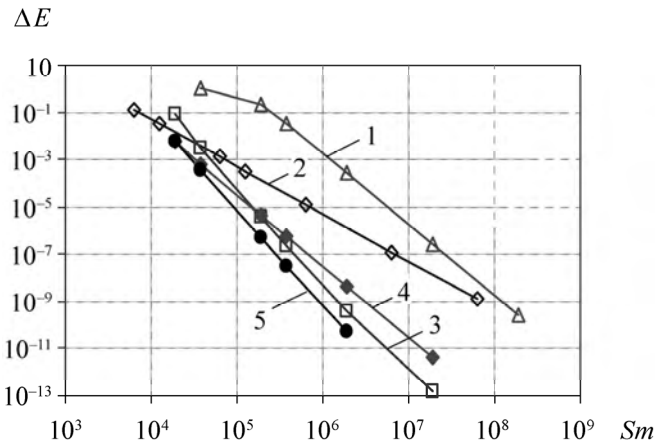


Рис. 3. Зависимость среднего дисбаланса полной энергии от числа обращений к функции вычисления сил ($S = 2000 \pi/K$ – число шагов, m – число стадий разностной схемы) в интервале времени $0 < t < 1000 T = 2000 \pi/\omega$ в расчетах по различным схемам: 1 – ERK3; 2 – Verlet; 3 – SIA4; 4 – RKN3_6; 5 – RKN4

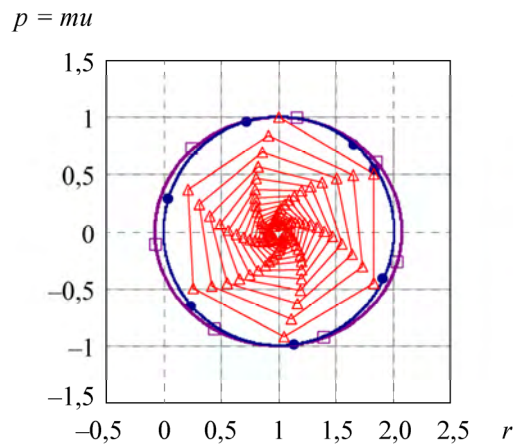


Рис. 4. Траектория движения частицы на фазовой плоскости в интервале времени, равном 1000 периодам для схем SIA4 (\square), RKN4 (\bullet) и 15 периодам для схемы ERK3 (Δ)

8.2. Гомографическое движение трех тел в поле потенциала Ньютона

Гомографические решения задачи многих тел являются обобщениями треугольных круговых решений Лагранжа и могут быть получены из решения задачи двух тел [18].

Рассматривается движение частиц в гравитационном поле с потенциалом $U(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) = m_i m_j |\vec{r}_i - \vec{r}_j|^{-1}$. Орбитами точек являются кривые второго порядка – подобные эллипсы, параболы или гиперболы. Отличительной особенностью гомографических траекторий является то, что материальные точки всегда расположены в вершинах многоугольника неизменной формы, вращающегося в фиксированной плоскости вокруг неподвижного центра масс.

Данные о влиянии шага интегрирования на среднее значение дисбаланса энергии ΔE за время, равное 5 периодам, представлены на рис. 5. Выяснилось, что наилучшими по соотношению «точность – экономичность» являются симплектические схемы RKN3_6 и RKN4.

Результаты расчетов эллиптических траекторий ($e = 0,75$) с шагом $\Delta t = K/\omega$ ($K = 0,05$) представлены на рис. 6 (см. также цв. вкл.). Свойство гомографических решений (расположение частиц в вершинах равностороннего треугольника) выполнено также для численного решения.

Отметим, что в расчетах по схеме ERK3 частицы значительно отклоняются от стационарных траекторий: это является следствием несохранения полной энергии. В то же время в расчетах RKN4 положение частиц в интервале времени $t \lesssim 5T$ с точностью до графического изображения совпадает с аналитическим решением. При больших временах численное решение теряет устойчивость.

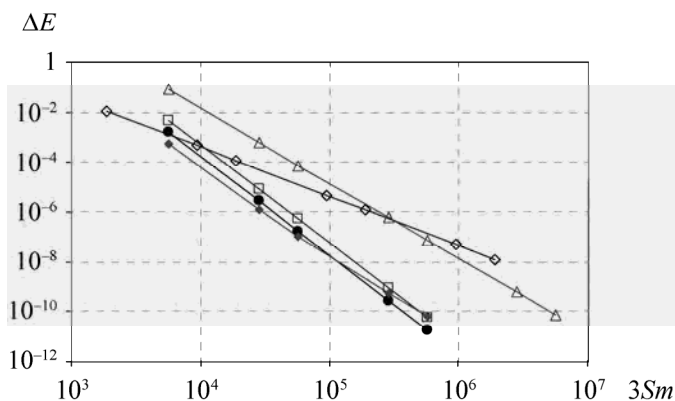


Рис. 5. Зависимость среднего дисбаланса полной энергии системы от числа обращений к функции вычисления сил в интервале времени $0 < t < 5T = 10\pi/\omega$ в расчетах по схемам ERK3 (Δ), Verlet (\diamond), SIA4 (\square), RKN3_6 ($*$), RKN4 (\bullet)

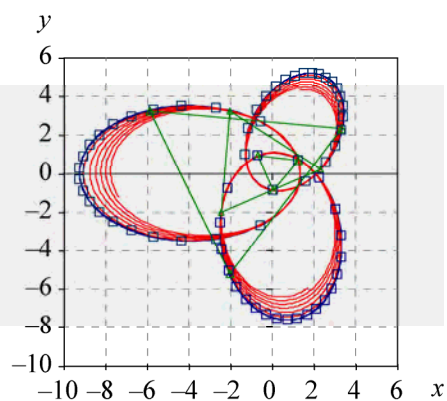


Рис. 6. Траектории частиц в поле сил потенциала Ньютона в интервале времени $0 < t < 5T$: \square – схема RKN4, $—$ – схема ERK3

8.3. МД-моделирование свойств жидкого аргона

Рассматривается процесс установления термодинамического равновесия для системы с числом частиц жидкого аргона $N = 256$. Постановка задачи взята из [19]. Использовался потенциал Леннарда – Джонса: $U_{LD}(r) = 4\epsilon \left[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6 \right]$ с параметрами из таблицы.

Термодинамические параметры и параметры потенциала Леннарда – Джонса

ϵ , Дж	k , Дж/К	σ , см	Масса частицы m , г	T , К	ρ , г/см ³
$1,65324 \cdot 10^{-21}$	$1,38042 \cdot 10^{-23}$	$3,405 \cdot 10^{-8}$	$6,64 \cdot 10^{-23}$	86,4956	1,4

При численном моделировании осуществлен переход к безразмерным переменным $r = r_*\sigma$, $t = \sqrt{m\sigma^2/(48\epsilon)}t_*$, $U^*(r_*) = (r_*^{-12} - r_*^{-6})/12$, $m_* = 1$.

Расчетная область – куб ($0 < x_* < L_*$, $0 < y_* < L_*$, $0 < z_* < L_*$), $L_* = 6,75$. В начальный момент времени частицы расположены в узлах гцк-решетки. Начальные скорости частиц задавались с помощью датчика случайных чисел с выполнением условий для импульса и температуры: $\sum_{i=1}^{i=N} \vec{u}_{*i} = 0$,

$$16 \frac{\epsilon}{kN} \sum_{i=1}^{i=N} |\vec{u}_{*i}|^2 = T = 86,4956 \text{ K}.$$

По всем трем направлениям задавались периодические граничные условия. Выполнена серия расчетов с шагом интегрирования из интервала $0,032 < \Delta t_* < 0,256$ до момента времени $t_{s*} = 65,536$.

Результаты расчетов этой задачи использовались в [19] для выяснения эффективности симплектических схем высокого (выше второго) порядка аппроксимации в МД-моделировании. Предметом исследований в [19] была схема Verlet и неявный двухстадийный метод Гаусса – Лежандра

(Gauss-Legendre, GL) четвертого порядка [20]. Данному методу соответствуют следующие параметры симплектической схемы RKN (2):

$$\alpha_{1,2} = (3 \mp \sqrt{3})/6, \beta_{1,2} = (3 \pm \sqrt{3})/12, \gamma_{1,2} = 1/2,$$

$$a_{11} = a_{22} = 1/24, a_{12} = (3 - 2\sqrt{3})/24, a_{21} = (3 + 2\sqrt{3})/24.$$

Система нелинейных уравнений относительно переменных $\bar{\xi}^l, l=1, 2$ решалась в [19] методом простых итераций с навязанным числом итераций ν , т. е. без проверки сходимости. Выяснилось, что в практически значимой области точности схема Verlet превосходит методы GL ($\nu = 1, 2, 3$) по соотношению «точность – экономичность». Таким образом, получен отрицательный ответ на вопрос, вынесенный в название статьи [19].

В настоящем сообщении, помимо Verlet и GL ($\nu = 3$), в число рассматриваемых включены явные симплектические трехстадийные схемы третьего и четвертого порядков. Результаты расчетов представлены на рис. 7. Отметим, что для некоторых схем в расчетах с $\Delta t_* = 0,256$ проявляется неустойчивость, обусловленная нелинейностью. Симплектические схемы RKN4 и RKN3_6 даже вблизи порога устойчивости ($\Delta t_* = 0,128$) имеют точность, которая, возможно, и не требуется для МД-моделирования. При фиксированном объеме вычислительной работы дисбаланс этих схем уменьшен по сравнению со схемами Verlet и GL ($\nu = 3$) на 1,5–2 порядка. Здесь следует учесть, что для явных симплектических схем объем работы пропорционален числу стадий, тогда как для методов GL он зависит от числа итераций и, следовательно, по сравнению с явными трехстадийными схемами увеличивается в $2(\nu + 1)/3$ раза. Отметим также, что методы GL с фиксированным числом итераций формально не являются симплектическими, поэтому для них имеет место некоторый дрейф полной энергии системы (рис. 8).

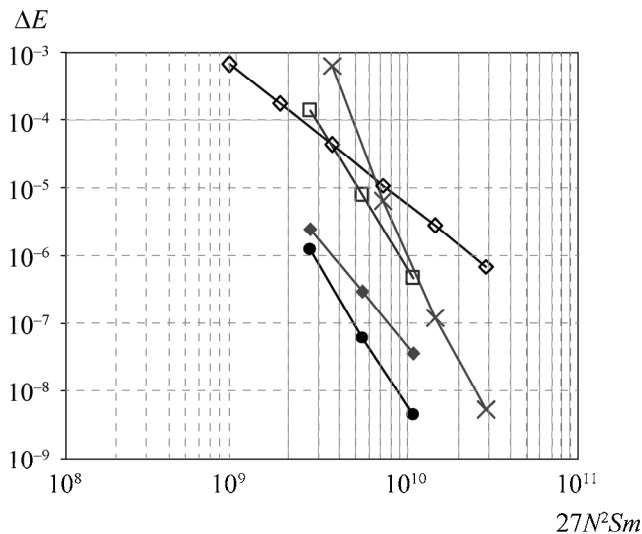


Рис. 7. Зависимость среднего дисбаланса полной энергии системы от числа обращений и функции вычисления сил в интервале времени ($0 < t_* < t_{s*} = 65,536$) (для схемы GL $m = 2\nu + 2 = 8, \nu = 3$) в расчетах по схемам Verlet (\diamond), SIA4 (\square), RKN3_6 (\blacklozenge), RKN4 (\bullet), GL (\times)

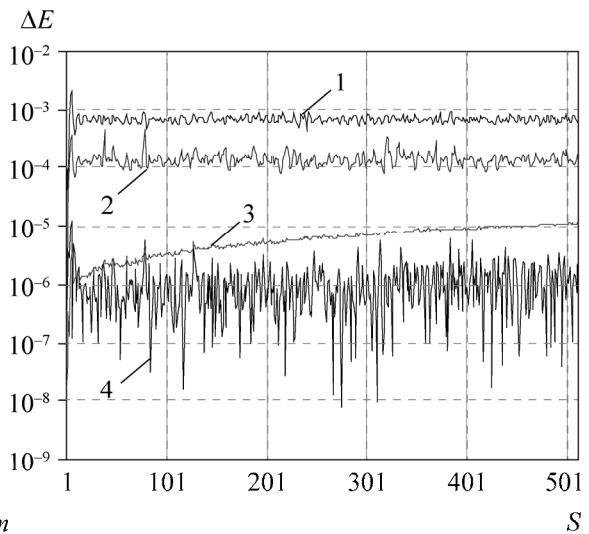


Рис. 8. Зависимость дисбаланса полной энергии системы от номера шага в расчетах по схемам Verlet (1), SIA4 (2), GL ($\nu = 3$) (3), RKN4 (4) ($\Delta t_* = 0,128$)

Заключение

В ряде публикаций (например, в [21]) утверждается, что использование симплектических схем в МД-расчетах является излишним и не оправдывает себя, так как не повышает точность усреднения. По мнению авторов, этот аргумент не является достаточным основанием для отказа от использования симплектических схем. Проблема выбора схем с оптимальными для МД-моделирования свойствами остается актуальной и должна иметь решения. Результаты расчетов показывают, что из всех рассмотренных в статье схем только симплектические схемы обеспечивают стационарность полной энергии с приемлемым уровнем осцилляций (отсутствие дрейфа). Симплектичность является одним из необходимых свойств, которыми должны обладать разностные схемы, используемые для решения задач молекулярной динамики.

В связи с этим стоит отметить, что схема Verlet получила наибольшее распространение в МД-расчетах именно потому, что является единственной симплектической схемой второго порядка в классе одностадийных явных схем.

Список литературы

1. Сурис Ю. Б. О каноничности отображений, порождаемых методами типа Рунге – Кутты при интегрировании систем // Журнал вычисл. математики и матем. физики. 1989. Т. 29, № 2. С. 202–211.
2. Сурис Ю. Б. Гамильтоновы методы типа Рунге – Кутты и их вариационная трактовка // Матем. моделирование. 1990. Т. 2, № 4. С. 78–87.
3. Еленин Г. Г., Шляхов П. И. Геометрическая структура пространства параметров трехстадийных симплектических методов Рунге – Кутты // Матем. моделирование. 2011. Т. 23, № 5. С. 16–34.
4. Арнольд В. И. Математические методы классической механики – М.: Наука, 1979.
5. Сурис Ю. Б. О сохранении симплектической структуры при численном решении гамильтоновых систем // Численное решение обыкновенных дифференциальных уравнений. – М.: ИПМ АН СССР, 1988. С. 148–160.
6. Sanz-Serna J. M. Runge-Kutta schemes for Hamiltonian system // BIT. 1988. Vol. 28. P. 877–883.
7. Rosenbrock H. H. Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations // Comput. J. 1963. Vol. 5, N 4. P. 329–330.
8. Verlet L. Computer «experiments» on classical fluids. Thermodynamical properties of Lennard – Jones molecules // Phys. Rev. 1967. Vol. 159, N 1. P. 98–103.
9. Софронов В. Н., Шемарулин В. Е. Классификация явных трехстадийных симплектических разностных схем численного решения натуральных гамильтоновых систем. Сравнительное исследование точности схем высокого порядка на задачах молекулярной динамики // Журнал вычисл. математики и матем. физики. 2016. Т. 56. № 4. С. 551–571.
10. Аржанцев И. В. Базисы Гребнера и системы алгебраических уравнений. – М.: МЦНМО, 2003.

11. Официальный сайт компании Maplesoft [Электронный ресурс]. – <http://www.maplesoft.com>.
12. Софронов В. Н., Мокина К. С., Шемарулин В. Е. Разностные схемы молекулярной динамики. Часть 1. Сравнительный анализ точности, устойчивости и экономичности // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Матем. моделирование физ. процессов. 2011. Вып. 2. С. 18–32.
13. Forest E., Ruth R. D. Fourth-order symplectic integration // Physica. D. 1990. Vol. 43. P. 105–117.
14. Candy J., Rozmus W. A symplectic integration algorithm for separable Hamiltonian function // J. of Comp. Phys. 1991. Vol. 92. P. 230–256.
15. Хайпер Э., Нерсетт С., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. – М.: Мир. 1990.
16. Альшина Е. А., Закс Е. М., Калиткин Н. Н. Оптимальные схемы Рунге – Кутты с первого по шестой порядок точности // Журнал вычисл. математики и матем. физики. 2007. Т. 47, № 9. С. 1538–1549.
17. 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 Numer. Methods in Engin. 2004. Vol. 61. P. 856–879.
18. Шемарулин В. Е., Софронов В. Н., Мокина К. С. Разностные схемы молекулярной динамики. Часть 2. Система двумерных тестов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Матем. моделирование физ. процессов. 2011. Вып. 3. С. 3–14.
19. Lopez-Marcos M. A., Sanz-Serna J. M., Skeel R. D. Are Gauss-Legendre methods useful in molecular dynamics? // J. of Comp. and Appl. Math. 1996. Vol. 67. P. 173–179.
20. Sanz-Serna J. M., Calvo M. P. Numerical Hamiltonian problems. – London: Chapman and Hall, 1984.
21. Норман Г. Э., Стегайлов В. В. Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики // Матем. моделирование. 2012. Т. 24, № 6. С. 3–44.

Three-Stage Symplectic Difference Schemes for Molecular Dynamics: Description, Classification, Analytical and Numerical Investigation

V. N. Sofronov, V. E. Shemarulin

The paper discusses the results of the research of three-stage symplectic difference schemes manifold for the numerical solving of natural Hamiltonian systems (with separable Hamiltonians). Only explicit schemes are considered. In this paper we perform the classification of the third-order schemes (the third-order schemes make a two-parameter family), show all the fourth-order schemes (it has turned out that they are 7), prove that there are no fifth-order accuracy schemes. We have also listed the schemes which are optimum in reference to the phase error, show that this family does not include the fourth-order schemes. We present the results of numerical calculations that show the features of the mentioned schemes. They have also been comparatively analyzed and ranged over the accuracy vs. efficiency relation.