

Заключение

В РФЯЦ-ВНИИТФ проводятся связанные расчеты нейтронно-физических и теплогидравлических характеристик активных зон реакторов следующих типов: ВВЭР-1000, ВВЭР-1200 и РУ типа БРЕСТ. Результаты расчетов могут быть представлены разными способами: в виде полей физических величин, таблиц, в виде картограмм, а также в виде графиков. В результате расчетов можно оценить среднюю температуру теплоносителя при заданных начальных параметрах, при которой работа реактора была бы наиболее эффективной и безопасной.

Проведенные расчеты показывают возможность вычисления на современных вычислительных системах теплогидравлических характеристик реактора с использованием нейтронно-физических характеристик, оцененных методами статистического моделирования. В то же время проверочные расчеты позволили наметить пути дальнейшего развития методик. В настоящее время разрабатывается методика учета переноса тепловых потоков между соседними ТВС. В ближайшей перспективе предполагается проведение расчета теплогидравлических характеристик всей активной зоны реактора.

Литература

1. Кириллов П. Л., Богословская Г. П. Тепломассообмен в ядерных энергетических установках: Учебное пособие для вузов. М.: ИздАт, 2008.
2. IAEA Nuclear Data Centre. [Electronic resource]. Mode of access: <http://www-nds.iaea.org>.
3. Зацепин О. В., Кандиев Я. З., Кашаева Е. А. и др. Расчеты методом Монте-Карло по программе ПРИЗМА нейтронно-физических характеристик активной зоны ВВЭР-1000 // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика ядерных реакторов. 2011. Вып. 4. С. 64–74.
4. Кандиев Я. З., Куропатенко Э. С., Шмаков В. М., Черепанова Е. И. Библиотеки системы константного обеспечения расчетов КОБРА. Использование библиотек ENDL, ENDF // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1986.
5. Модестов Д. Г. Разработка программного комплекса для расчета кампании реактора // XI Забабахинские научные чтения. 16–20 апреля, 2012. Снежинск: Изд-во РФЯЦ-ВНИИТФ, 2013.
6. Chudanov V. V. et al. Current status and validation of CONV2D\&3D code // Proc. OECD/CSNI Workshop on in vessel core debris retention and coolability, Garching near Munich, Germany, March 3–6, 1998 // Nuclear Safety NEA/CSNI/R 1999. (98) 18. P. 223–224.
7. OpenFOAM. [Electronic resource]. Mode of access: <http://opencfd.co.uk/openfoam>.

ТРЕХСТАДИЙНЫЕ СИМПЛЕКТИЧЕСКИЕ РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ. КЛАССИФИКАЦИЯ, СРАВНИТЕЛЬНОЕ ЧИСЛЕННО-АНАЛИТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

В. Н. Софронов, В. Е. Шемарулин

Российский федеральный ядерный центр –
Всероссийский НИИ экспериментальной физики, г. Саров

Введение

Представлены результаты исследования многообразия трехстадийных симплектических разностных схем, предназначенных для численного решения натуральных гамильтоновых систем обык-

новенных дифференциальных уравнений – систем с распадающимися гамильтонианами $H(\vec{r}, \vec{p}) = K(\vec{p}) + U(\vec{r})$. Рассматриваются только явные схемы.

Интерес к натуральным системам обусловлен тем, что они возникают в задачах молекулярной динамики, а также тем, что для таких систем могут быть построены явные симплектические схемы.

Известно, что в классе одностадийных явных схем существует единственная симплектическая схема второго порядка аппроксимации – схема Verlet (получившая в связи с этим наибольшее распространение в МД моделировании). Интерес к трехстадийным схемам связан с поиском схем высокого порядка аппроксимации, так как порядок аппроксимации выше второго может быть получен только в том случае, если число стадий увеличивается до трех.

Авторами проведена классификация трехстадийных схем третьего порядка, предъявлены все схемы четвертого порядка (их оказалось 7), доказано отсутствие схем пятого порядка точности. Перечислены схемы, оптимальные по фазовой ошибке (однопараметрическое семейство схем с уменьшенной фазовой ошибкой $O(K^6)$), показано, что в этом семействе нет схем четвертого порядка. Доказано, что единственной обратимой схемой является схема SIA4.

Представлены результаты численных расчетов, демонстрирующие качества перечисленных схем. Проведен их сравнительный анализ – ранжирование по соотношению «точность – экономичность».

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

$$\frac{\partial \vec{r}}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} = \vec{u}, \quad \frac{d\vec{u}}{dt} = -\frac{1}{m} \frac{\partial H}{\partial \vec{r}} = \vec{\Phi},$$

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

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 [1]

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

Из сохранения симплектической структуры следует инвариантность интегралов:

$$\int (\omega^2)^L = \text{const}, \quad (\omega^2)^L = \omega^2 \wedge \omega^2 \dots \wedge \omega^2, \quad 1 \leq L \leq 3N.$$

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 [1]

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

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 [2]–[3]

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

2. Условие симплектичности для схем Рунге – Кутты – Нистрема (RKN)

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

$$\begin{aligned} \bar{r}^{n+1} &= \bar{r}^n + \Delta t \bar{u}^n + \Delta t^2 \sum_{l=1}^{l=m} \beta_l \bar{\varphi}(\bar{\xi}^l), & \bar{u}^{n+1} &= \bar{u}^n + \Delta t \sum_{l=1}^{l=m} \gamma_l \bar{\varphi}(\bar{\xi}^l), \\ \bar{\xi}^l &= \bar{r}^n + \Delta t \alpha_l \bar{u}^n + \Delta t^2 \sum_{k=1}^m a_{lk} \bar{\varphi}(\bar{\xi}^k). \end{aligned} \quad (2.1)$$

условие симплектичности (1.3) будет выполнено при следующих ограничениях на коэффициенты разностной схемы [2]–[3]:

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

Для явных схем матрица a_{lk} -нижне-треугольная, 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 получаются приравниванием 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 рассмотрения. Заметим, что сам факт использования схем с мнимыми коэффициентами не является новым. В качестве примера можно указать схему Розенброка (CROS) [4].

В классе одностадийных схем $m = 1$ существует единственная симплектическая схема второго порядка – схема Verlet [5] 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 $m \geq 3$ [2]. Параметрами трехстадийных симплектических схем являются два вектора $\alpha = (\alpha_i)$ и $\gamma = (\gamma_i)$ длиной $m = 3$. 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:

$$\begin{aligned} F_1 &= \gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3 - 1 = 0, \\ F_2 &= \alpha_1\gamma_1 + \alpha_2\gamma_2 + \alpha_3\gamma_3 - \frac{1}{2} = 0, \\ F_3 &= \alpha_1^2\gamma_1 + \alpha_2^2\gamma_2 + \alpha_3^2\gamma_3 - \frac{1}{3} = 0, \end{aligned} \quad (3.1)$$

$$F_4 = \gamma_1\gamma_2(\alpha_2 - \alpha_1) + \gamma_1\gamma_3(\alpha_3 - \alpha_1) + \gamma_2\gamma_3(\alpha_3 - \alpha_2) - \frac{1}{6} = 0.$$

Поэтому в классе трехстадийных схем $m = 3$ существует двухпараметрическое семейство схем третьего порядка. Это семейство схем параметризуется точками алгебраического многообразия 4-й степени:

$$\begin{aligned} \Phi 4 &= \alpha_2^2(-36\alpha_1\alpha_3 + 24\alpha_1 + 12\alpha_3 - 9) + \alpha_2(36\alpha_1^2\alpha_3 + 36\alpha_3^2\alpha_1 - 24\alpha_1^2 - 12\alpha_3^2 - 36\alpha_1\alpha_3 + 9\alpha_1 + 9\alpha_3) - \\ &- 24\alpha_1\alpha_3^2 - 12\alpha_1^2\alpha_3 + 9\alpha_1^2 + 9\alpha_3^2 + 33\alpha_1\alpha_3 - 12\alpha_1 - 12\alpha_3 + 4 = 0. \end{aligned}$$

Если $\alpha_1 \neq \alpha_2 \neq \alpha_3 \neq \alpha_1$ параметры $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ определяются согласно формулам:

$$\gamma_1 = \frac{6\alpha_2\alpha_3 - 3\alpha_2 - 3\alpha_3 + 2}{6(\alpha_1 - \alpha_3)(\alpha_1 - \alpha_2)}, \quad \gamma_2 = -\frac{6\alpha_1\alpha_3 - 3\alpha_1 - 3\alpha_3 - 2}{6(\alpha_1 - \alpha_2)(\alpha_2 - \alpha_3)}, \quad \gamma_3 = \frac{6\alpha_1\alpha_2 - 3\alpha_1 - 3\alpha_2 + 2}{6(\alpha_2 - \alpha_3)(\alpha_1 - \alpha_3)}.$$

4. Классификация трехстадийных схем четвертого порядка. Отсутствие трехстадийных схем пятого порядка

Порядок аппроксимации может быть увеличен до четырех, если к системе (3.1) добавить следующие соотношения:

$$\begin{aligned} F_5 &= \alpha_1^3\gamma_1 + \alpha_2^3\gamma_2 + \alpha_3^3\gamma_3 - \frac{1}{4} = 0, \\ F_6 &= \alpha_1\gamma_1\gamma_2(\alpha_2 - \alpha_1) + \alpha_1\gamma_1\gamma_3(\alpha_3 - \alpha_1) + \alpha_2\gamma_2\gamma_3(\alpha_3 - \alpha_2) - \frac{1}{24} = 0, \\ F_7 &= \alpha_2\gamma_1\gamma_2(\alpha_2 - \alpha_1) + \alpha_3\gamma_1\gamma_3(\alpha_3 - \alpha_1) + \alpha_3\gamma_2\gamma_3(\alpha_3 - \alpha_2) - \frac{1}{8} = 0. \end{aligned} \quad (4.1)$$

Задача описания трехстадийных схем четвертого порядка аппроксимации эквивалентна нахождению общего решения системы семи уравнений (3.1), (4.1). Полученная система имеет конечное число решений. Решение системы элементарными средствами является трудоемкой процедурой. Более естественно использовать технику базисов Гребнера [6], реализованную в пакете программ Maple 12 [7].

Минимальный редуцированный базис Гребнера системы (3.1), (4.1) состоит из 6 полиномов: $B_G = \{B_i, i = 1 \div 6\}$. Исходная система уравнений (3.1), (4.1) эквивалентна системе $B_i = 0, i = 1, 2, 3, \dots, 6$.

Уравнение $B_1 = 0$ содержит единственный параметр γ_3 , его правая часть является произведением трех полиномов:

$$B_1 = (6\gamma_3^2 - 3\gamma_3 + 1)(6\gamma_3^3 - 12\gamma_3^2 + 6\gamma_3 - 1)(48\gamma_3^2 - 24\gamma_3 - 1) = 0. \quad (4.2)$$

Остальные 5 полиномов дают явные выражения параметров $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \gamma_1, \gamma_2$ через γ_3 . Семь различных корней уравнения (4.2) определяют семь решений исходной системы.

• Схема RKN4 [8] в исходном и сопряженном (в алгебраическом смысле – с изменением знаков при радикалах) виде

$$\begin{aligned}\alpha_1 &= \frac{3 \mp \sqrt{3}}{6}, \quad \alpha_2 = \frac{3 \pm \sqrt{3}}{6}, \quad \alpha_3 = \frac{3 \mp \sqrt{3}}{6}, \\ \gamma_1 &= \frac{3 \pm 2\sqrt{3}}{12}, \quad \gamma_2 = \frac{1}{2}, \quad \gamma_3 = \frac{3 \mp 2\sqrt{3}}{12}.\end{aligned}\quad (4.3)$$

• Схема SIA4 (symplectic integration algorithm) с действительными (4.4) [9], [10] и мнимыми (4.5) коэффициентами. Последние получаются из (4.4) заменой $2^{1/3}$ на $\varepsilon 2^{1/3}$ и $\varepsilon^2 2^{1/3}$, $\varepsilon = \exp(2\pi i/3)$:

$$\begin{aligned}\alpha_1 &= \frac{2^{1/3}}{6} + \frac{2^{2/3}}{12} + \frac{1}{3}, \quad \alpha_2 = \frac{1}{2}, \quad \alpha_3 = \frac{2}{3} - \frac{2^{1/3}}{6} - \frac{2^{2/3}}{12}, \\ \gamma_1 &= \frac{2^{1/3}}{3} + \frac{2^{2/3}}{6} + \frac{2}{3}, \quad \gamma_2 = -\frac{1}{3} - \frac{2 \cdot 2^{1/3}}{3} - \frac{2^{2/3}}{3}, \quad \gamma_3 = \frac{2^{1/3}}{3} + \frac{2^{2/3}}{6} + \frac{2}{3},\end{aligned}\quad (4.4)$$

$$\begin{aligned}\alpha_1 &= \frac{\varepsilon_{1,2}}{6} + \frac{\varepsilon_{1,2}^2}{12} + \frac{1}{3}, \quad \alpha_2 = \frac{1}{2}, \quad \alpha_3 = \frac{2}{3} - \frac{\varepsilon_{1,2}}{6} - \frac{\varepsilon_{1,2}^2}{12}, \\ \gamma_1 &= \frac{\varepsilon_{1,2}}{3} + \frac{\varepsilon_{1,2}^2}{6} + \frac{2}{3}, \quad \gamma_2 = -\frac{1}{3} - \frac{2\varepsilon_{1,2}}{3} - \frac{\varepsilon_{1,2}^2}{3}, \quad \gamma_3 = \frac{\varepsilon_{1,2}}{3} + \frac{\varepsilon_{1,2}^2}{6} + \frac{2}{3},\end{aligned}\quad (4.5)$$

$$\varepsilon_{1,2} = 2^{1/3} \varepsilon_1, \quad 2^{1/3} \varepsilon_2, \quad \varepsilon_1 = \varepsilon = \exp(2\pi i/3), \quad \varepsilon_2 = \varepsilon^2, \quad i = \sqrt{-1}.$$

• Схема CRKN4 с мнимыми коэффициентами:

$$\begin{aligned}\alpha_1 &= \frac{1}{8} \pm \frac{\sqrt{15}}{24} i, \quad \alpha_2 = \frac{1}{2} \pm \frac{\sqrt{15}}{12} i, \quad \alpha_3 = \frac{7}{8} \pm \frac{\sqrt{15}}{24} i, \\ \gamma_1 &= \frac{1}{4} \pm \frac{\sqrt{15}}{12} i, \quad \gamma_2 = \frac{1}{2}, \quad \gamma_3 = \frac{1}{4} \mp \frac{\sqrt{15}}{12} i.\end{aligned}\quad (4.6)$$

Система уравнений для нахождения коэффициентов трехстадийных схем пятого порядка аппроксимации состоит из двенадцати уравнений: к системе семи уравнений для коэффициентов схем четвертого порядка добавляются пять уравнений. Полученная система является несовместной. Это означает, что трехстадийных симплектических схем пятого порядка не существует.

5. Трехстадийные схемы с фазовой ошибкой шестого порядка

В классе трехстадийных схем можно выделить однопараметрическое семейство схем с уменьшенной фазовой ошибкой $O(K^6)$, если к условиям порядка (3.1) добавить уравнение

$$Z = \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 (\alpha_3 - \alpha_2)(\alpha_2 - \alpha_1)(1 - \alpha_3 + \alpha_1) = \frac{1}{360}.\quad (5.1)$$

Далее многообразие схем 3-го порядка, параметры которых удовлетворяют соотношению (5.1), 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: параметр 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:

$$\alpha_1 = \frac{(100 + 60\sqrt{5})^{1/3}}{60} - \frac{1}{3(100 + 60\sqrt{5})^{1/3} + \frac{1}{6}}, \quad \alpha_3 = -\frac{(100 + 60\sqrt{5})^{1/3}}{60} + \frac{1}{3(100 + 60\sqrt{5})^{1/3} + \frac{5}{6}}. \quad (5.2)$$

6. Обратимые схемы

Обратимыми (симметричными [11]) называются схемы, инвариантные относительно перестановок

$$\vec{r}^n \Leftrightarrow \vec{r}^{n+1}, \quad \vec{u}^n \Leftrightarrow \vec{u}^{n+1}, \quad \Delta t \Leftrightarrow -\Delta t. \quad (6.1)$$

Условия симметричности (6.1) сводятся к следующим ограничениям на коэффициенты схемы (2.1):

$$\alpha_{m+1-l} + \alpha_l = 1, \quad \gamma_{m+1-l} = \gamma_l, \quad l = 1, 2, \dots, m. \quad (6.2)$$

Список обратимых схем может быть получен проверкой совместности уравнений (6.2) с системой (3.1) либо с системой (3.1), (4.1). Из общего списка следует исключить схемы третьего порядка, так как все симметричные схемы имеют четный порядок аппроксимации [11]. Ввиду того, что 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 (6.2). Таким образом, выясняется, что в двухпараметрическом семействе трехстадийных симплектических схем существует единственная обратимая схема – SIA4 (4.7), (4.8). Заметим, что в классе одностадийных явных схем единственная схема второго порядка Verlet также является обратимой.

7. Фазовая ошибка трехстадийных схем

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 [1]. Для матрицы перехода трехстадийных схем характеристическое уравнение

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

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

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

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

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

$$Z = \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 (\alpha_3 - \alpha_2)(\alpha_2 - \alpha_1)(1 - \alpha_3 + \alpha_1) = \frac{1}{360}. \quad (7.1)$$

Соотношение (7.1) совместно с условиями (3.1), обеспечивающими третий порядок аппроксимации, определяет однопараметрическое семейство схем с фазовой ошибкой $O(K^6)$. Явное описание многообразия таких схем дано в разделе 5. Следует отметить, что в этом семействе нет схем четвертого порядка.

Зависимость фазовой ошибки от числа Куранта в диапазоне устойчивости разностных схем $0 < K < K_{CR}$ изображена на рис. 1. В практически важной для расчетов МД области чисел Куранта $0,001 < K < 0,1$ наклон кривых определяется остаточным членом в разложении фазовой ошибки по степеням K . Фазовая ошибка схем RKN4, CRKN4 примерно на два порядка меньше фазовой ошибки схемы SIA4, однако превосходит фазовую ошибку схем RKN3_6 с меньшим порядком аппроксимации, если выполнено условие (7.1).

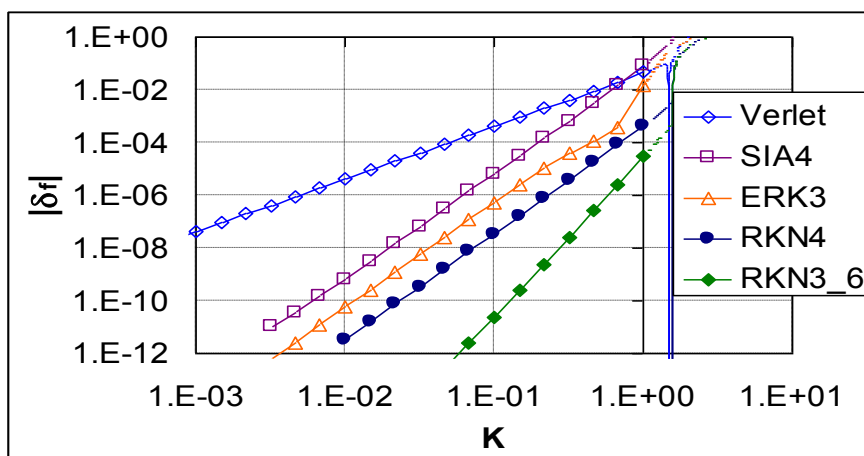


Рис. 1. Зависимость фазовой ошибки от числа Куранта. Фазовая ошибка меняет знак при значениях $K \sim 1,48$ для схем Verlet, ERK3 и $K \sim 1,57$ для схем RKN4, RKN3_6

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

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

В расчетах на сходимость вычислялось среднее значение дисбаланса в заданном временном интервале (S – число шагов)

$$\Delta E(t_1 < t < t_S) = \frac{1}{S} \sum_{n=1}^{n=S} \delta E(t_n).$$

Качества схем оцениваются 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 (5.2) с минимальной фазовой ошибкой. В число рассматриваемых включена трехстадийная схема Рунге-Кутты ERK3 третьего порядка с набором параметров, обеспечивающим минимальную невязку [12]. 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 [13]:

$$r(t=0) = r_0 = 1, \quad u(t=0) = u_0 = 1, \quad \omega = 1, \quad \Delta t = K/\omega.$$

В серии расчетов вычислялось среднее значение дисбаланса энергии ΔE за время, равное 1000 периодам ($t_S = 1000T$, $T = 2\pi/\omega$). Варьировалась величина временного шага. Зависимость дисбаланса энергии ΔE от объема выполненной работы в двойном логарифмическом масштабе представлена на рис. 2,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. 2,б представлены траектории, полученные в расчетах с шагом $\Delta t = 1$, $Cur = \omega \Delta t = 1$. 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.

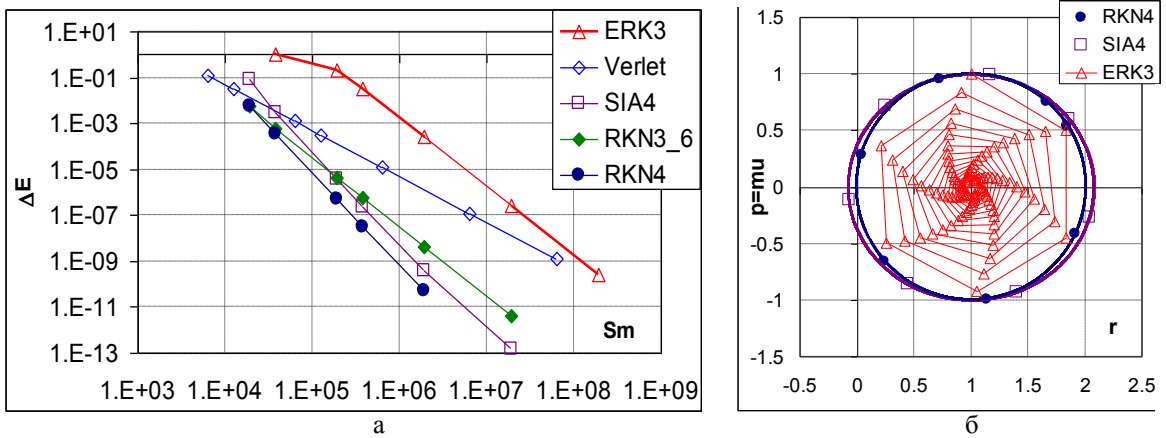


Рис. 2. а – зависимость среднего в интервале времени ($0 < t < 1000T = 2000\pi/\omega$) дисбаланса полной энергии от числа обращений к функции вычисления сил ($S = 2000\pi/K$ – число шагов, m – число стадий разностной схемы), б – траектория движения частицы ($\Delta t = K/\omega$, $K = 1$) на фазовой плоскости в интервале времени, равном 1000 периодам для схем (SIA4, RKN4) и 15 периодам для схемы ERK3

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 [14].

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. 3,а. Выяснилось, что наилучшими по соотношению «точность – экономичность» являются симплектические схемы RKN3_6 и RKN4.

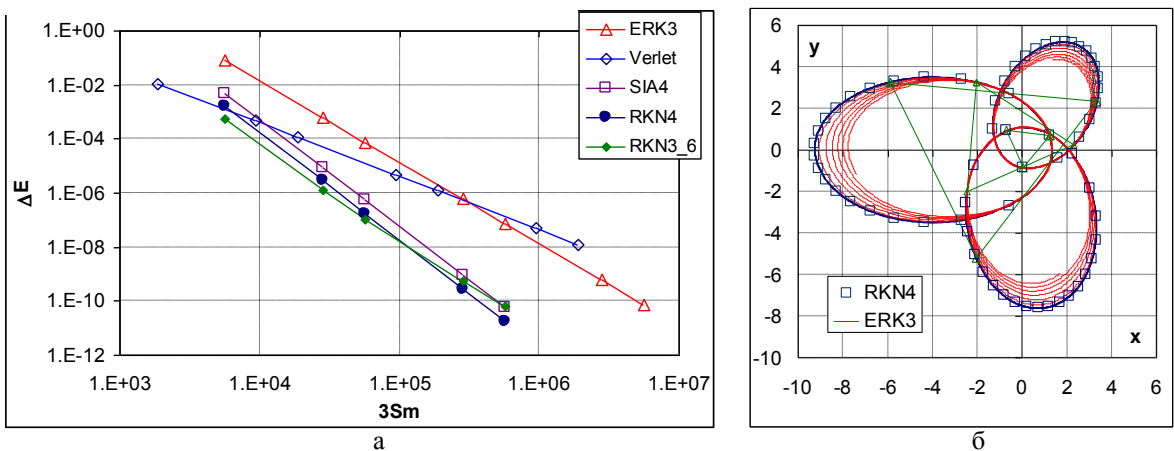


Рис. 3. а – зависимость среднего в интервале времени ($0 < t < 5T = 10\pi/\omega$) дисбаланса полной энергии системы от числа обращений к функции вычисления сил ($S = 10\pi/K$ – число шагов, m – число стадий разностной схемы), б – траектории частиц в поле сил потенциала Ньютона ($\Delta t = K/\omega$, $K = 0,05$) в интервале времени ($0 < t < 5T$)

Результаты расчетов эллиптических траекторий ($e = 0,75$) с шагом $\Delta t = K/\omega$ ($K = 0,05$) представлены на рис. 3,б. Свойство гомографических решений (расположение частиц в вершинах равностороннего треугольника) выполнено и для численного решения.

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

8.3. МД моделирование свойств жидкого аргона

Рассматривается процесс установления термодинамического равновесия для системы $N = 256$ частиц жидкого аргона. Постановка задачи взята из [15]. Использовался потенциал Леннарда – Джонса:

$$U_{LD}(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right].$$

При численном моделировании осуществлен переход к безразмерным переменным

$$r = r_*\sigma, \quad t = \sqrt{\frac{m\sigma^2}{48\varepsilon}} t_*, \quad U^*(r_*) = \frac{1}{12} \left[\left(\frac{1}{r_*} \right)^{12} - \left(\frac{1}{r_*} \right)^6 \right], \quad m_* = 1.$$

В начальный момент времени частицы расположены в узлах ГЦК решетки. Счетная область – куб:

$$(0 < x_* < L_*, 0 < y_* < L_*, 0 < z_* < L_*), \quad L_* = 6,75.$$

Начальные скорости частиц задавались с помощью датчика случайных чисел с выполнением условий для импульса и температуры:

$$\sum_{i=1}^{i=N} \vec{u}_{*i} = 0, \quad 16 \frac{\varepsilon}{kN} \sum_{i=1}^{i=N} |\vec{u}_{*i}|^2 = T = 86,4956 K.$$

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 [15] для выяснения эффективности симплектических схем высокого (выше второго) порядка аппроксимации в МД моделировании. Предметом исследований в [15] была схема Verlet и неявный двухстадийный метод Gauss-Legendre (GL) четвертого порядка [16]. Данному методу соответствуют следующие параметры симплектической схемы RKN (2.1):

$$\alpha_1 = \frac{3-\sqrt{3}}{6}, \quad \alpha_2 = \frac{3+\sqrt{3}}{6}, \quad \beta_1 = \frac{3+\sqrt{3}}{12}, \quad \beta_2 = \frac{3-\sqrt{3}}{12},$$

$$\gamma_1 = \gamma_2 = \frac{1}{2}, \quad a_{11} = a_{22} = \frac{1}{24}, \quad a_{12} = \frac{3-2\sqrt{3}}{24}, \quad a_{21} = \frac{3+2\sqrt{3}}{24}.$$

Система нелинейных уравнений относительно переменных $\vec{\xi}^l, l=1,2$ решалась в [15] методом простых итераций с навязанным числом итераций v , то есть без проверки сходимости. Выяснилось, что в практически значимой области точности схема Verlet превосходит методы GL ($v=1, 2, 3$) по соотношению «точность – экономичность». Таким образом, получен отрицательный ответ на вопрос, вынесенный в название статьи [15].

В настоящем докладе, помимо Verlet и $GL(v=3)$, в число рассматриваемых включены явные симплектические трехстадийные схемы третьего и четвертого порядков. Результаты расчетов представлены на рис. 4. 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 $GL(v=3)$ на 1,5–2 порядка. Здесь следует учесть то, что для явных симплектических схем объем работы пропорционален числу стадий, в то время как для методов GL он зависит от числа итераций. Поэтому объем работы для $GL(v=3)$ по сравнению с явными, трехстадийными схемами увеличивается в $2(v+1)/3$ раза. Отметим также, что методы GL с фиксированным числом итераций формально не являются симплектическими; поэтому для этих методов имеет место некоторый дрейф полной энергии системы (см. рис. 4,б).

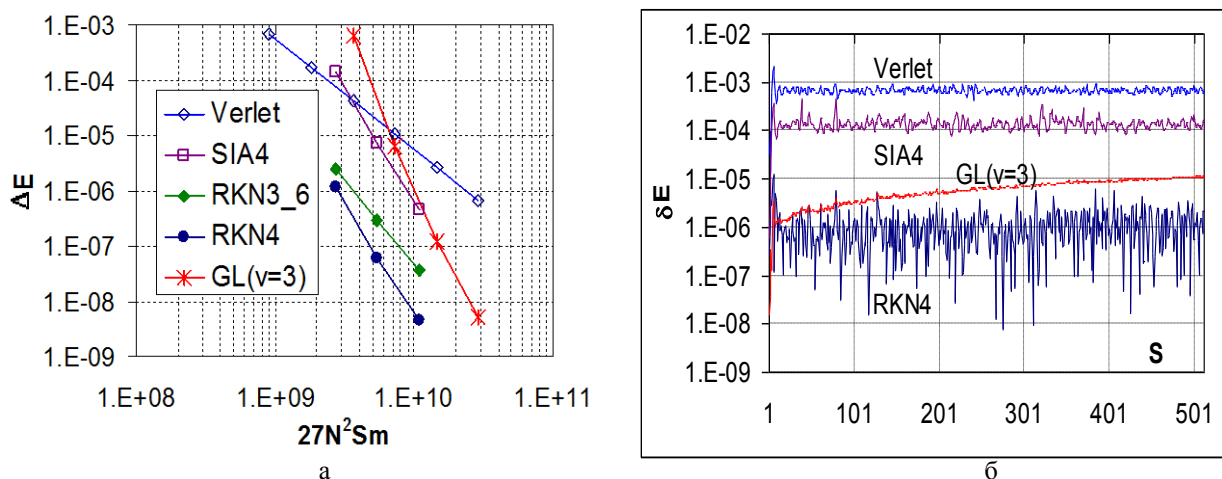


Рис. 4. а – зависимость среднего в интервале времени ($0 < t_* < t_{*G} = 65,536$) дисбаланса полной энергии системы от числа обращений к функции вычисления сил (m – число стадий для разностных схем Verlet, SIA4, RKN3_6, RKN4 и $m = 2v + 2 = 8$ для схемы $GL(v=3)$), б – зависимость дисбаланса полной энергии системы от номера шага в расчетах Verlet, SIA4, RKN4 ($\Delta t_* = 0,128$)

Заключение

В ряде публикаций (например, [17], [18]) утверждается, что использование симплектических схем в МД расчетах является излишним и не оправдывает себя, так как не повышает точность усреднения. По нашему мнению, 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 как-то решаться. Результаты расчетов показывают, что среди всех рассмотренных в статье схем только симплектические схемы обеспечивают стационарность полной энергии с приемлемым уровнем осцилляций (отсутствие дрейфа). Симплекτικότητα является одним из необходимых свойств, которыми должны обладать разностные схемы, используемые для решения задач молекулярной динамики.

Стоит отметить также, что схема Verlet получила наибольшее распространение в МД расчетах именно потому, что является единственной симплектической схемой второго порядка в классе одностадийных явных схем.

Литература

1. Арнольд В. И. Математические методы классической механики. М.: Наука, 1979.
2. 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.
3. Sanz – Serna J. M. Runge – Kutta schemes for Hamiltonian system // BIT. 1988. Vol. 22, N 4.
4. Rosenbrock H. H. Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations // Comput. J. 1963. Vol. 5, N 4. P. 329–330.
5. Verlet L. Computer «experiments» on classical fluids. Thermodynamical properties of Lennard – Jones molecules // Phys. Rev. 1967. Vol. 159, N 1. P. 98–103.
6. Аржанцев И. В. Базисы Гребнера и системы алгебраических уравнений. М.: МЦНМО, 2003.
7. [Electronic resource]. Mode of access: <http://www.maplesoft.com>.
8. Софронов В. Н., Мокина К. С., Шемарулин В. Е. Разностные схемы молекулярной динамики. 1 Сравнительный анализ точности, устойчивости и экономичности // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2011. Вып. 2. С. 18–32.
9. Forest E, Ruth R. D. Fourth-order symplectic integration // Phys. D. 1990. Vol. 43. P. 105–117.
10. Candy J., Rozmus W. A symplectic integration algorithm for separable Hamiltonian function // J. of Computational Phys. 1991. Vol. 92. P. 230–256.
11. Хайпер Э., Нерсетт С., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. М.: Мир, 1990.
12. 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.
13. Rougier E., Munjiza A., John N. W. M. Numerical comparison of some explicit time integration schemes used in DEM, FEM/DEM and molecular dynamics // International journal for numerical methods in engineering. 2004. Vol. 61. P. 856–879.
14. Шемарулин В. Е., Софронов В. Н., Мокина К. С. Разностные схемы молекулярной динамики. 2 Система двумерных тестов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2011. Вып. 3. С. 3–14.
15. Lopez – Marcos M. A., Sanz – Serna J. M., Skeel R. D. Are Gauss-Legendre methods useful in molecular dynamics? // Journal of Computational and Applied Mathematics. 1996. Vol. 67. P. 173–179.
16. Sanz – Serna J. M., Calvo M. P. Numerical Hamiltonian problems. London: Chapman and Hall, 1984.
17. Норман Г. Э., Стегайлов В. В. Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики // Математическое моделирование. 2012. Т. 24, № 6. С. 3–44.
18. Bond S. D., Leimkuhler B. J. Molecular dynamics and the accuracy of numerically computed averages // Acta Numerica. 2007. Vol. 5. P. 1–65.

МЕТОД ПРОГНОЗНОГО РАСЧЕТА ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ И ЭФФЕКТИВНОСТИ МУЛЬТИПРОЦЕССОРНЫХ СРЕД

С. А. Степаненко

Российский федеральный ядерный центр –
Всероссийский НИИ экспериментальной физики, г. Саров

Введение

Компьютерное моделирование является одним из основных современных средств исследований в различных областях естествознания.