

P11-2016-14

Б. Батгэрэл^{1,2}, Э. Г. Никонов¹, И. В. Пузынин¹

**ПРОЦЕДУРА ПОСТРОЕНИЯ
СИМПЛЕКТИЧЕСКИХ ЧИСЛЕННЫХ СХЕМ
ДЛЯ РЕШЕНИЯ ГАМИЛЬТОНОВЫХ
СИСТЕМ УРАВНЕНИЙ**

Направлено в журнал «Вестник Российского университета
дружбы народов»

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

² Монгольский государственный университет науки и технологии,
Улан-Батор

Батгэрэл Б., Никонов Э. Г., Пузынин И. В.

P11-2016-14

Процедура построения симплектических численных схем для решения гамильтоновых систем уравнений

Предлагаются новая процедура построения симплектических численных схем для решения гамильтоновых систем уравнений и новый подход к симметризации полученных симплектических разностных схем. Численные схемы, построенные с помощью предложенной процедуры, сохраняют энергию системы на большом интервале численного интегрирования при относительно больших величинах шага интегрирования по сравнению с методом Верле, который обычно используется при решении уравнений движения молекулярной динамики. Приведены результаты численных экспериментов, отражающие основные преимущества полученных в работе симметричных симплектических численных схем третьего порядка точности по шагу интегрирования гамильтоновых систем уравнений по сравнению с численными схемами метода Верле второго порядка.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2016

Batgerel B., Nikonov E. G., Puzynin I. V.

P11-2016-14

A Procedure for Constructing Symplectic Numerical Schemes for Solving Hamiltonian Systems of Equations

A new procedure for constructing symplectic numerical schemes for solving the Hamiltonian systems of equations is proposed. A method for symmetrization of the obtained symplectic numerical schemes is suggested. The numerical schemes constructed by the above procedure conserve the energy of a system on the large interval of numerical integration for relatively large integration step in comparison with the Verlet method which is usually used for solving equations of motion in molecular dynamics. Results of numerical experiments are given. These results show the main advantages of the obtained symmetric symplectic numerical schemes of the third order of accuracy for the integration step for the Hamiltonian systems of equations in comparison with numerical schemes of the Verlet method of the second order of accuracy.

The investigation has been performed at the Laboratory of Information Technologies, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2016

ВВЕДЕНИЕ

В классической молекулярной динамике для описания движения частиц используются уравнения Ньютона. При этом для получения координат и скоростей системы, состоящей из N частиц, требуется на каждом временном шаге в трехмерном случае решить $6N$ уравнений. Для моделирования поведения системы из N частиц при решении прикладных задач исследования эволюции физических систем необходимо использовать достаточно большой интервал интегрирования по времени. С учетом того, что традиционно используемые для решения уравнений движения молекулярной динамики численные схемы Верле [1] устойчивы лишь при достаточно малых значениях шага интегрирования по времени, на большом интервале интегрирование приводит к большому количеству временных шагов. В этом случае, чтобы увеличить значение шага интегрирования для уменьшения количества шагов при заданном интервале интегрирования, необходимо обеспечить устойчивость схемы по шагу интегрирования. Кроме того, численные методы должны сохранять основные свойства точных решений, в частности такие первые интегралы, как энергия системы и суммарный момент импульса.

Пакеты программ молекулярной динамики для численного интегрирования уравнений движения используют схемы по методу Верле. В них интегрирование ведется с достаточно малым шагом по времени и контролем сохранения гамильтониана (энергии системы), поскольку уже при значении приведенной величины шага порядка 0,1 и количестве шагов порядка 10^3 накопленная вычислительная ошибка приводит к неустойчивости численной схемы и потере сохранения гамильтониана.

Для решения проблем размерности и быстродействия, возникающих при молекулярно-динамических расчетах, используются следующие пути.

- Усовершенствование существующих пакетов программ:
 - векторизация, как, например, в программе DL-POLY [2];
 - распараллеливание и ускорение межпроцессорных обменов на многопроцессорных системах;
 - разработка спецпроцессоров [3].
- Разработка эффективных новых и оптимизация существующих методов численного интегрирования уравнений движения.

Предлагается новый подход к построению численных схем для решения уравнений движения молекулярной динамики. Построенные численные схемы сохраняют в приближенном решении основные свойства точного решения и

обладают более высоким порядком аппроксимации, чем схемы по методу Верле, а также являются устойчивыми по отношению к шагу аппроксимации.

Предложенный подход заключается в следующем:

- Использование гамильтоновой формулировки уравнений движения молекулярной динамики.

- Разложение точного решения в ряд Тейлора [4]. При этом возможно применение аппарата компьютерной алгебры для получения аналитических выражений для производных ряда Тейлора.

- Использование при выводе численных схем аппарата производящих функций для сохранения геометрических свойств точного решения [1].

В работе решены следующие задачи:

- Построение симметричных симплектических численных схем интегрирования гамильтоновых систем уравнений более высокого порядка точности, чем схемы по методу Верле, что позволяет увеличить шаг при фиксированном интервале интегрирования и, соответственно, уменьшить общий объем вычислений.

- Проведение численных экспериментов для сравнительного анализа свойств схем по методу Верле и построенных численных схем.

- Оценка перспективы применения построенных численных схем в существующих пакетах программ, например, в LPMD [5].

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

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

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

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

с начальными условиями

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

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

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

где $M(\mathbf{q})$ — симметричная и положительно определенная матрица масс.

Гамильтонова система уравнений движения эквивалентна уравнениям, полученным в рамках ньютоновского формализма, если силы, действующие на материальные точки, представить в виде $\mathbf{f}(\mathbf{q}) = \nabla V(\mathbf{q})$ и стандартным образом перейти от дифференциального уравнения Ньютона 2-го порядка с заменой переменных к системе уравнений 1-го порядка:

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

2. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

2.1. Геометрические методы. Геометрическим называют такой метод, который сохраняет некоторые геометрические свойства точного решения системы (1)–(3) [1].

Можно выделить следующие геометрические свойства решений:

- Отображение $\varphi : (p(t_0), q(t_0)) \mapsto (p(t), q(t))$, реализующее решение гамильтоновой системы уравнений (1)–(3), является симплектическим.
- Решение обратимо во времени.
- Решение сохраняет значение гамильтониана (4) для любого момента времени.

2.2. Симплектические методы. Дифференцируемое отображение

$$\varphi : U \rightarrow \mathbb{R}^{2d} \quad (U \in \mathbb{R}^{2d})$$

называется симплектическим [1], если якобиан $\varphi'(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ удовлетворяет тождеству

$$\varphi'(\mathbf{p}, \mathbf{q})^T J \varphi'(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = J,\tag{6}$$

где

$$J = \begin{pmatrix} \mathbf{0}_d & \mathbf{I}_d \\ -\mathbf{I}_d & \mathbf{0}_d \end{pmatrix},$$

$\mathbf{0}_d, \mathbf{I}_d$ — нулевая и единичная матрицы размерности d .

2.3. Симплектические численные методы. На дискретном множестве $\{t_k : k = 0, 1, \dots; t_{k+1} - t_k = h\}$ одношаговый метод решения системы (1)–(3) при постоянном шаге по времени h можно представить в виде

$$(\mathbf{p}^{k+1}, \mathbf{q}^{k+1}) = \Phi_h(\mathbf{p}^k, \mathbf{q}^k),\tag{7}$$

где $\Phi_h(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ — преобразование приближенного решения $(\mathbf{p}^k, \mathbf{q}^k)$ при $t = t_k$ в приближенное решение $(\mathbf{p}^{k+1}, \mathbf{q}^{k+1})$ при $t = t_{k+1}$.

Одношаговый метод (7) называется *симплектическим*, если преобразование (7), реализующее приближенное решение гамильтоновой системы (1)–(2),

является симплектическим. В качестве примеров симплектических численных методов 1-го и 2-го порядка аппроксимации можно привести явный и неявный методы Эйлера [1] и метод Верле.

Метод Верле:

$$\mathbf{q}^{k+1} = \mathbf{q}^k + h\mathbf{p}^k - \frac{h^2}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}^k), \quad (8)$$

$$\mathbf{p}^{k+1} = \mathbf{p}^k - \frac{h}{2} [\mathbf{f}(\mathbf{q}^k) + \mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1})]. \quad (9)$$

Алгоритм вычисления по методу Верле следующий:

$$\mathbf{p}^{k+1/2} = \mathbf{p}^k - \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}^k), \quad (10)$$

$$\mathbf{q}^{k+1} = \mathbf{q}^k + h\mathbf{p}^{k+1/2}, \quad (11)$$

$$\mathbf{p}^{k+1} = \mathbf{p}^{k+1/2} - \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1}). \quad (12)$$

Как уже упоминалось, метод Верле является основным методом численного интегрирования уравнений движения в молекулярной динамике.

Если переписать систему уравнений (5) в виде обыкновенного дифференциального уравнения

$$\ddot{\mathbf{q}} = -\mathbf{f}(\mathbf{q}), \quad (13)$$

то метод Верле может быть записан в форме стандартной разностной схемы 2-го порядка:

$$\frac{\mathbf{q}^{k+1} - 2\mathbf{q}^k + \mathbf{q}^{k-1}}{h^2} = -\mathbf{f}(\mathbf{q}^k), \quad k = 0, 1, \dots \quad (14)$$

Большинство стандартных численных методов изначально не являются симплектическими, в частности, методы Рунге–Кутты. Для того чтобы метод стал симплектическим, необходимо проделать ряд нетривиальных шагов для модификации метода в сторону симплектичности.

2.4. Симметричные численные методы. Одношаговый метод (7) называется симметричным, если удовлетворяет условию

$$\Phi_h = \Phi_{-h}^{-1}. \quad (15)$$

В качестве примера симметричного симплектического метода можно привести метод средних точек, который для гамильтоновых систем вида (1), (2)

может быть записан следующим образом:

$$\mathbf{p}^{k+1} = \mathbf{p}^k - h \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \left(\frac{\mathbf{p}^k + \mathbf{p}^{k+1}}{2}, \frac{\mathbf{q}^k + \mathbf{q}^{k+1}}{2} \right), \quad (16)$$

$$\mathbf{q}^{k+1} = \mathbf{q}^k + h \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \left(\frac{\mathbf{p}^k + \mathbf{p}^{k+1}}{2}, \frac{\mathbf{q}^k + \mathbf{q}^{k+1}}{2} \right). \quad (17)$$

3. СИМПЛЕКТИЧЕСКИЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ И ПРОИЗВОДЯЩИЕ ФУНКЦИИ

3.1. Канонические преобразования. В гамильтоновой механике каноническое преобразование — это преобразование канонических переменных и гамильтониана

$$\varphi : (\mathbf{p}, \mathbf{q}) \mapsto (\mathbf{P}, \mathbf{Q}), \quad (18)$$

не меняющее общий вид уравнений Гамильтона [6].

Канонические преобразования взаимно-однозначно определяются производящей функцией $S(\mathbf{p}, \mathbf{q})$, которая является решением уравнения Гамильтона–Якоби и полный дифференциал которой равен

$$dS = \mathbf{P}^\top d\mathbf{Q} - \mathbf{p}^\top d\mathbf{q}. \quad (19)$$

3.2. Производящие функции. Производящая функция может быть выражена через любую пару из четырех переменных \mathbf{p} , \mathbf{q} , \mathbf{P} , \mathbf{Q} (возможны четыре варианта пар). Полученные при этом функции принято называть производящими функциями первого, второго, третьего или четвертого типа соответственно (см. таблицу).

Производящая функция	Производные
$S = S_1(\mathbf{q}, \mathbf{Q}, t)$	$\mathbf{p} = -\frac{\partial S_1}{\partial \mathbf{q}} \quad \mathbf{P} = \frac{\partial S_1}{\partial \mathbf{Q}}$
$S = S_2(\mathbf{q}, \mathbf{P}, t)$	$\mathbf{p} = \frac{\partial S_2}{\partial \mathbf{q}} \quad \mathbf{Q} = \frac{\partial S_2}{\partial \mathbf{P}}$
$S = S_3(\mathbf{p}, \mathbf{Q}, t)$	$\mathbf{q} = -\frac{\partial S_3}{\partial \mathbf{p}} \quad \mathbf{P} = -\frac{\partial S_3}{\partial \mathbf{Q}}$
$S = S_4(\mathbf{p}, \mathbf{P}, t)$	$\mathbf{q} = \frac{\partial S_4}{\partial \mathbf{p}} \quad \mathbf{Q} = -\frac{\partial S_4}{\partial \mathbf{P}}$

3.3. Связь симплектических преобразований и производящих функций. В соответствии с известной теоремой Пуанкаре [1] для любого симплектического преобразования φ существует производящая функция $S(\mathbf{q}, \mathbf{Q})$, и наоборот, для конкретной производящей функции $S(\mathbf{q}, \mathbf{Q})$ существует симплектическое преобразование φ , которое может быть реконструировано при помощи формул

$$\mathbf{p} = -\frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}, \mathbf{Q}), \quad \mathbf{P} = \frac{\partial S}{\partial \mathbf{Q}}(\mathbf{q}, \mathbf{Q}). \quad (20)$$

4. ПРОЦЕДУРА ПОСТРОЕНИЯ СИМПЛЕКТИЧЕСКИХ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДЯЩЕЙ ФУНКЦИИ ПЕРВОГО ТИПА

Для процедуры построения симплектических разностных схем выбрана производящая функция первого типа $S = S_1(\mathbf{q}, \mathbf{Q}, t)$.

При построении численных схем используются обозначения:

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

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

4.1. Схема с разложением в ряд Тейлора «вперед».

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

$$\mathbf{p}^{k+1} = \frac{\partial S_{m,1}}{\partial \mathbf{q}^{k+1}} \quad (21)$$

путем дифференцирования.

4.2. Схема с разложением в ряд Тейлора «назад».

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

$$\mathbf{p}^k = -\frac{\partial S_{m,2}}{\partial \mathbf{q}^k} \quad (22)$$

путем дифференцирования.

6. Решить, вообще говоря, нелинейное относительно \mathbf{q}^{k+1} уравнение (22). В дальнейшем используется метод Ньютона.

7. Получить \mathbf{p}^{k+1} при помощи полученного в п. 2 выражения, используя известное значение \mathbf{q}^k и полученное в п. 6 значение \mathbf{q}^{k+1} .

4.3. Симплектическая разностная схема 2-го порядка. Для вычисления величины \mathbf{p}^k используем разложение для \mathbf{q} в ряд Тейлора «вперед» до 2-го порядка:

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

В результате получим явную симплектическую разностную схему 2-го порядка:

$$\mathbf{p}^k = \frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h} + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}^k), \quad (23)$$

$$S_2 = \frac{h}{2} \left(\frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h} \right)^2 - \frac{h}{2} [V(\mathbf{q}^k) + V(\mathbf{q}^{k+1})], \quad (24)$$

$$\mathbf{p}^{k+1} = \frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h} - \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1}). \quad (25)$$

Если для вычисления величины \mathbf{p}^{k+1} использовать разложение для \mathbf{q} в ряд Тейлора «назад» до 2-го порядка

$$\mathbf{q}^k = \mathbf{q}^{k+1} - h\mathbf{p}^{k+1} - \frac{h^2}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1}) + \mathcal{O}(h^3),$$

то получим ту же самую схему (23), (25).

Если ввести обозначение

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

то получится известная схема Верле (10)–(12), которая является симплектической и симметричной.

4.4. Явная и неявная симплектические разностные схемы 3-го порядка.

При построении явных и неявных схем 3-го порядка с помощью производящей функции первого типа для нахождения величин \mathbf{p}^k и \mathbf{p}^{k+1} используем разложение точного решения для канонической переменной \mathbf{q} в ряд Тейлора для явной схемы — «вперед», для неявной — «назад».

Явная схема:

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

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

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

то получим явную схему 3-го порядка:

$$\mathbf{p}^k = \frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h} + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}^k) + \frac{h^2}{6}\nabla\mathbf{f}(\mathbf{q}^k) \cdot \frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h}, \quad (26)$$

$$S_{3,1} = \frac{h}{2} \left(\frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h} \right)^2 - \frac{h}{3} [2V(\mathbf{q}^k) + V(\mathbf{q}^{k+1})] - \frac{h^2}{6}\mathbf{f}(\mathbf{q}^k) \cdot \frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h}, \quad (27)$$

$$\mathbf{p}^{k+1} = \frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h} - \frac{h}{6} [\mathbf{f}(\mathbf{q}^k) + 2\mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1})]. \quad (28)$$

Введя обозначение

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

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

$$\mathbf{p}^{k+1/2} = \mathbf{p}^k - \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}^k), \quad (29)$$

$$\tilde{\mathbf{p}}^{k+1/2} = \Theta^k \mathbf{p}^{k+1/2}, \quad (30)$$

$$\mathbf{q}^{k+1} = \mathbf{q}^k + h\tilde{\mathbf{p}}^{k+1/2}, \quad (31)$$

$$\mathbf{p}^{k+1} = \tilde{\mathbf{p}}^{k+1/2} - \frac{h}{6} [\mathbf{f}(\mathbf{q}^k) + 2\mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1})]. \quad (32)$$

Неявная схема:

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

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

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

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

В результате получим следующее выражение:

$$\mathbf{p}^{k+1} = \frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h} - \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1}) + \frac{h^2}{6}\nabla\mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1}) \cdot \frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h}. \quad (33)$$

После интегрирования по \mathbf{q}^{k+1} получаем производящую функцию

$$S_{3,2} = \frac{h}{2} \left(\frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h} \right)^2 - \frac{h}{3} [V(\mathbf{q}^k) + 2V(\mathbf{q}^{k+1})] + \frac{h^2}{6}\mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1}) \cdot \frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h} \quad (34)$$

и дифференцированием по \mathbf{q}^k с учетом знака находим выражение

$$\mathbf{p}^k = \frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h} + \frac{h}{6} [2\mathbf{f}(\mathbf{q}^k) + \mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1})]. \quad (35)$$

Далее аналогично явной схеме получаем формулы для неявной схемы 3-го порядка

$$\mathbf{p}^{k+1/2} = \mathbf{p}^k - \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}^k), \quad (36)$$

$$\tilde{\mathbf{q}}^{k+1} = \mathbf{q}^k + h\mathbf{p}^{k+1/2}, \quad (37)$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{q}^{k+1}) = \tilde{\mathbf{q}}^{k+1}, \quad (38)$$

$$\boldsymbol{\mu}^{k+1} = \frac{h}{6} [\mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1}) - \mathbf{f}(\mathbf{q}^k)], \quad (39)$$

$$\boldsymbol{\theta}^{k+1} = \mathbf{I} + \frac{h^2}{6}\nabla\mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1}), \quad (40)$$

$$\tilde{\mathbf{p}}^{k+1/2} = \boldsymbol{\theta}^{k+1}(\mathbf{p}^{k+1/2} - \boldsymbol{\mu}^{k+1}), \quad (41)$$

$$\mathbf{p}^{k+1} = \tilde{\mathbf{p}}^{k+1/2} - \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1}), \quad (42)$$

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

$$\mathbf{F}(\mathbf{q}^{k+1}) = \mathbf{q}^{k+1} + \frac{h^2}{6} [\mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1}) - \mathbf{f}(\mathbf{q}^k)]. \quad (43)$$

5. СИММЕТРИЧНЫЕ СИМПЛЕКТИЧЕСКИЕ РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ

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

$$S_m(\alpha) = \alpha S_{m,1} + (1 - \alpha) S_{m,2}, \quad (44)$$

где $\alpha : 0 \leq \alpha \leq 1$, $S_{m,1}$ и $S_{m,2}$ — производящие функции, полученные при помощи процедур (21) и (22) соответственно. Каждая из этих производящих функций $S_m(\alpha)$ порождает симплектическую разностную схему m -го порядка. Если $\alpha = 1/2$, то получаем процедуры построения симметричных симплектических разностных схем.

Для численных расчетов наибольший интерес представляют схемы 3-го и 4-го порядка. Схема 4-го порядка для простоты представления приведена для одномерного случая. Схемы более высокого порядка аппроксимации имеет смысл выводить с использованием средств компьютерной алгебры.

5.1. Симметричная симплектическая схема для $m = 3$.

$$S_{3,3} = \frac{h}{2} \left(\frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h} \right)^2 - \frac{h}{2} [V(\mathbf{q}^k) + V(\mathbf{q}^{k+1})] + \frac{h^2}{12} [\mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1}) - \mathbf{f}(\mathbf{q}^k)] \cdot \frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h}, \quad (45)$$

$$\mathbf{p}^k = \frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h} + \frac{h}{12} [5\mathbf{f}(\mathbf{q}^k) + \mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1})] + \frac{h^2}{12} \nabla \mathbf{f}(\mathbf{q}^k) \cdot \frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h}, \quad (46)$$

$$\mathbf{p}^{k+1} = \frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h} - \frac{h}{12} [\mathbf{f}(\mathbf{q}^k) + 5\mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1})] + \frac{h^2}{12} \nabla \mathbf{f}(\mathbf{q}^{k+1}) \cdot \frac{\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k}{h}. \quad (47)$$

5.2. Симметричная симплектическая схема для $m = 4$. Для построения симметричной симплектической численной схемы 4-го порядка выводится схема «вперед».

Представим q_{k+1} в виде разложения в ряд Тейлора «вперед»:

$$q_{k+1} = q_k + hp_k - \frac{h^2}{2}f(q_k) - \frac{h^3}{6}f'(q_k)p_k - \frac{h^4}{24}[f''(q_k)p_k^2 - f'(q_k)f(q_k)] + \mathcal{O}(h^5).$$

После замены p_k в члене разложения с h^3

$$p_k = \frac{q_{k+1} - q_k}{h} + \frac{h}{2}f(q_k) + \mathcal{O}(h^2)$$

и квадрата p_k в члене разложения с h^4

$$p_k = \frac{q_{k+1} - q_k}{h} + \mathcal{O}(h)$$

получим выражение для p_k , зависящее только от q_k и q_{k+1} :

$$p_k = \frac{q_{k+1} - q_k}{h} + \frac{h}{2}f(q_k) + \frac{h^2}{6}f'(q_k) \left[\frac{q_{k+1} - q_k}{h} + \frac{h}{2}f(q_k) \right] + \frac{h^3}{24} \left[f''(q_k) \left(\frac{q_{k+1} - q_k}{h} \right)^2 - f'(q_k)f(q_k) \right].$$

Далее интегрированием получаем производящую функцию

$$S_{4,1} = \frac{h}{2} \left(\frac{q_{k+1} - q_k}{h} \right)^2 - \frac{h}{4} [3V(q_k) + V(q_{k+1})] - \frac{h^2}{4}f(q_k) \left(\frac{q_{k+1} - q_k}{h} \right) - \frac{h^3}{24}f'(q_k) \left(\frac{q_{k+1} - q_k}{h} \right)^2 + \frac{h^3}{48} [f^2(q_{k+1}) - f^2(q_k)]$$

и дифференцированием выражение

$$p_{k+1} = \frac{q_{k+1} - q_k}{h} - \frac{h}{4} [f(q_k) + f(q_{k+1})] - \frac{h^2}{12}f'(q_k) \left(\frac{q_{k+1} - q_k}{h} \right) + \frac{h^3}{24}f'(q_{k+1})f(q_{k+1}).$$

Аналогично, в соответствии с процедурой (22), строится схема «назад» 4-го порядка.

Представим q_k в виде разложения в ряд Тейлора «назад»:

$$q_k = q_{k+1} - hp_{k+1} - \frac{h^2}{2}f'(q_{k+1}) + \frac{h^3}{6}f''(q_{k+1})p_{k+1} - \frac{h^4}{24}[f'''(q_{k+1})p_{k+1}^2 - f''(q_{k+1})f'(q_{k+1})] + \mathcal{O}(h^5).$$

Затем заменим p_{k+1} в члене разложения с h^3

$$p_{k+1} = \frac{q_{k+1} - q_k}{h} - \frac{h}{2}f'(q_k) + \mathcal{O}(h^2)$$

и квадрат p_{k+1} в члене разложения с h^4

$$p_{k+1} = \frac{q_{k+1} - q_k}{h} + \mathcal{O}(h).$$

В результате получим выражение для p_{k+1} , зависящее только от q_k и q_{k+1} :

$$p_{k+1} = \frac{q_{k+1} - q_k}{h} - \frac{h}{2}f'(q_{k+1}) + \frac{h^2}{6}f''(q_{k+1})\left(\frac{q_{k+1} - q_k}{h}\right) + \frac{h^3}{24}\left[f'''(q_{k+1})\left(\frac{q_{k+1} - q_k}{h}\right)^2 + f''(q_{k+1})f'(q_{k+1})\right].$$

Далее интегрированием получаем производящую функцию

$$S_{4,2} = \frac{h}{2}\left(\frac{q_{k+1} - q_k}{h}\right)^2 - \frac{h}{4}[V(q_k) + 3V(q_{k+1})] + \frac{h^2}{4}f'(q_{k+1})\left(\frac{q_{k+1} - q_k}{h}\right) - \frac{h^3}{24}f''(q_{k+1})\left(\frac{q_{k+1} - q_k}{h}\right)^2 + \frac{h^3}{48}[f^2(q_{k+1}) - f^2(q_k)]$$

и дифференцированием выражение

$$p_k = \frac{q_{k+1} - q_k}{h} + \frac{h}{4}[f'(q_k) + f'(q_{k+1})] - \frac{h^2}{12}f''(q_{k+1})\left(\frac{q_{k+1} - q_k}{h}\right) + \frac{h^3}{24}f''(q_k)f'(q_k).$$

С помощью формулы (44) при $\alpha = 0,5$

$$S_{4,3} = \frac{1}{2}(S_{4,1} + S_{4,2})$$

получаем симметричную производящую функцию

$$\begin{aligned}
S_{4,3} = & \frac{h}{2} \left(\frac{q_{k+1} - q_k}{h} \right)^2 - \frac{h}{2} [V(q_k) + V(q_{k+1})] + \\
& + \frac{h^2}{8} [f(q_{k+1}) - f(q_k)] \left(\frac{q_{k+1} - q_k}{h} \right) - \\
& - \frac{h^3}{48} [f'(q_{k+1}) + f'(q_k)] \left(\frac{q_{k+1} - q_k}{h} \right)^2 + \\
& + \frac{h^3}{48} [f^2(q_{k+1}) - f^2(q_k)].
\end{aligned}$$

В результате после соответствующей процедуры дифференцирования получим симметричную симплектическую схему 4-го порядка:

$$\begin{aligned}
p_k = & \frac{q_{k+1} - q_k}{h} + \frac{h}{8} [3f(q_k) + f(q_{k+1})] - \\
& - \frac{h^2}{24} [2f'(q_k) - f'(q_{k+1})] \left(\frac{q_{k+1} - q_k}{h} \right) + \\
& + \frac{h^2}{48} f''(q_k) \left(\frac{q_{k+1} - q_k}{h} \right)^2 - \frac{h^3}{24} f'(q_k) f(q_k),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
p_{k+1} = & \frac{q_{k+1} - q_k}{h} - \frac{h}{8} [f(q_k) + 3f(q_{k+1})] - \\
& - \frac{h^2}{24} [f'(q_k) - 2f'(q_{k+1})] \left(\frac{q_{k+1} - q_k}{h} \right) - \\
& - \frac{h^2}{48} f''(q_{k+1}) \left(\frac{q_{k+1} - q_k}{h} \right)^2 - \frac{h^3}{24} f'(q_{k+1}) f(q_{k+1}).
\end{aligned}$$

6. ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

Численные эксперименты выполнены для сравнительного анализа численной схемы по методу Верле и численных схем более высокого порядка аппроксимации при $m = 3$, полученных с использованием разработанной авторами процедуры, на примере задачи Кеплера [1], в которой движение двух материальных точек описывается гамильтонианом следующего вида:

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) - \frac{1}{\sqrt{q_1^2 + q_2^2}}. \quad (48)$$

Численные расчеты проводились при параметрах:

$$\begin{aligned} h = 0,01 \text{ и } T = 1000; & \quad h = 0,05 \text{ и } T = 1000; \\ h = 0,10 \text{ и } T = 1000; & \quad h = 0,20 \text{ и } T = 5000. \end{aligned}$$

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

Для каждого фиксированного шага по времени h сравнивались результаты расчетов, полученные с использованием метода Верле, с результатами, полученными при использовании явной, неявной и симметричной численных схем 3-го порядка, построенных в работе. В качестве точного решения использовались результаты расчетов по методу Верле с шагом по времени, равным $h/10$.

Результаты моделирования представлены на рис. 1–14.

Задача Кеплера. Явная схема:

Как показывают численные эксперименты, при величине шага по времени до $h = 0,1$ включительно схема Верле и явная схема 3-го порядка очень близки и по расчетным фазовым траекториям, и по значениям гамильтониана на всем интервале интегрирования (см. рис. 1–3). Начиная с величины шага $h = 0,2$, схема Верле оказалась более устойчивой, хотя и менее точной по сравнению с явной схемой 3-го порядка. Кроме того, начиная примерно с 500-го шага, она становится неустойчивой (см. рис. 4) по шагу интегрирования.

Задача Кеплера. Неявная схема:

Аналогично численным экспериментам с явной схемой 3-го порядка в случае неявной схемы, при величине шага по времени до $h = 0,1$ включительно, схема Верле и неявная схема 3-го порядка очень близки и по расчетным фазовым траекториям, и по значениям гамильтониана на всем интервале интегрирования (см. рис. 5–7). Начиная с величины шага $h = 0,2$, схема Верле снова оказывается более устойчивой по сравнению с неявной схемой 3-го порядка, однако примерно с 250-го шага становится неустойчивой по шагу интегрирования (см. рис. 8).

Задача Кеплера. Симметричная схема:

Совсем иная картина открывается при сравнении результатов расчетов с использованием симметричной симплектической численной схемы 3-го порядка. Вплоть до величины шага численного интегрирования по времени $h = 0,2$ включительно симметричная симплектическая схема 3-го порядка существенно более точна по расчетным фазовым траекториям и отклонениям значений гамильтониана от начального значения на всем интервале интегрирования (см. рис. 9–12).

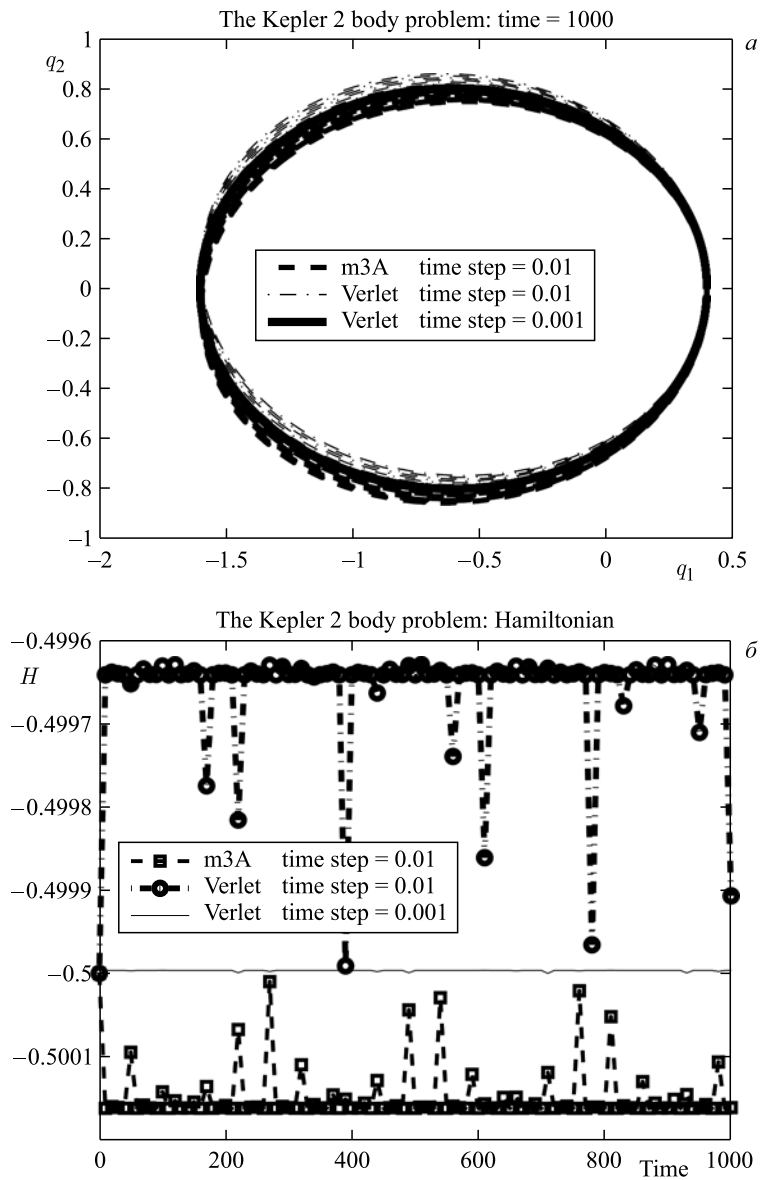


Рис. 1. Явная схема, схема Верле при $h = 0,01$ и $0,001$: а) фазовые траектории; б) зависимость гамильтониана от времени

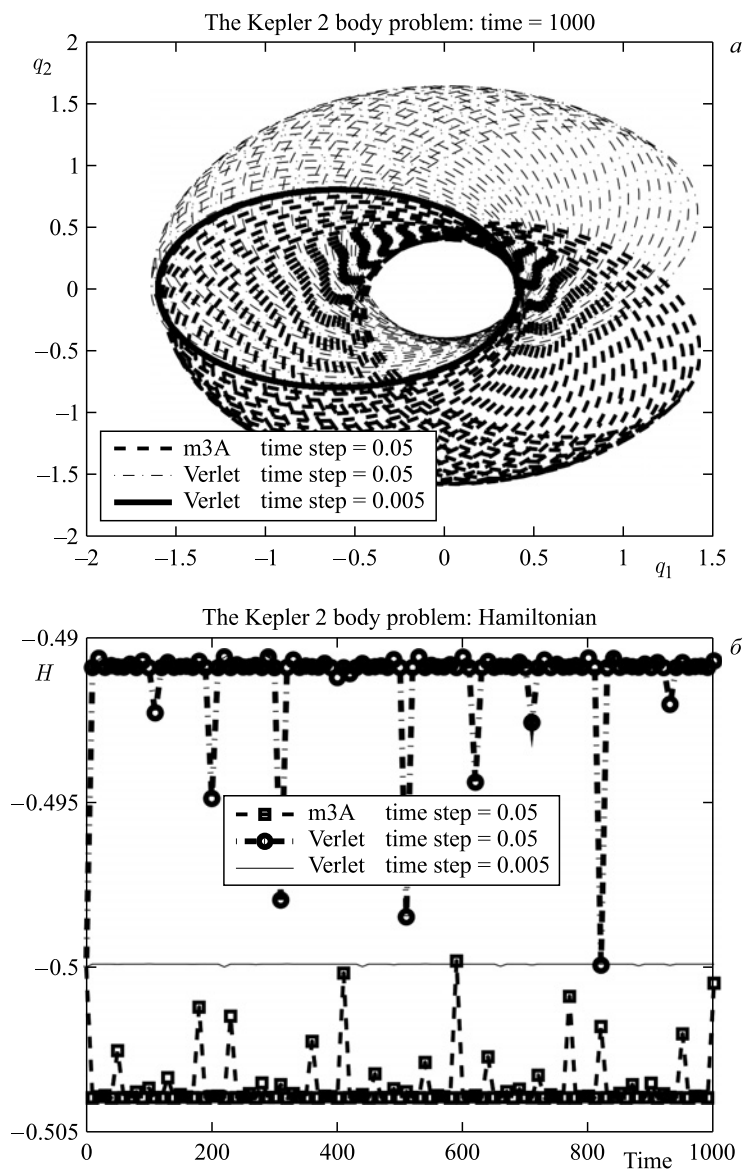


Рис. 2. Явная схема, схема Верле при $h = 0,05$ и $0,005$: а) фазовые траектории; б) зависимость гамильтониана от времени

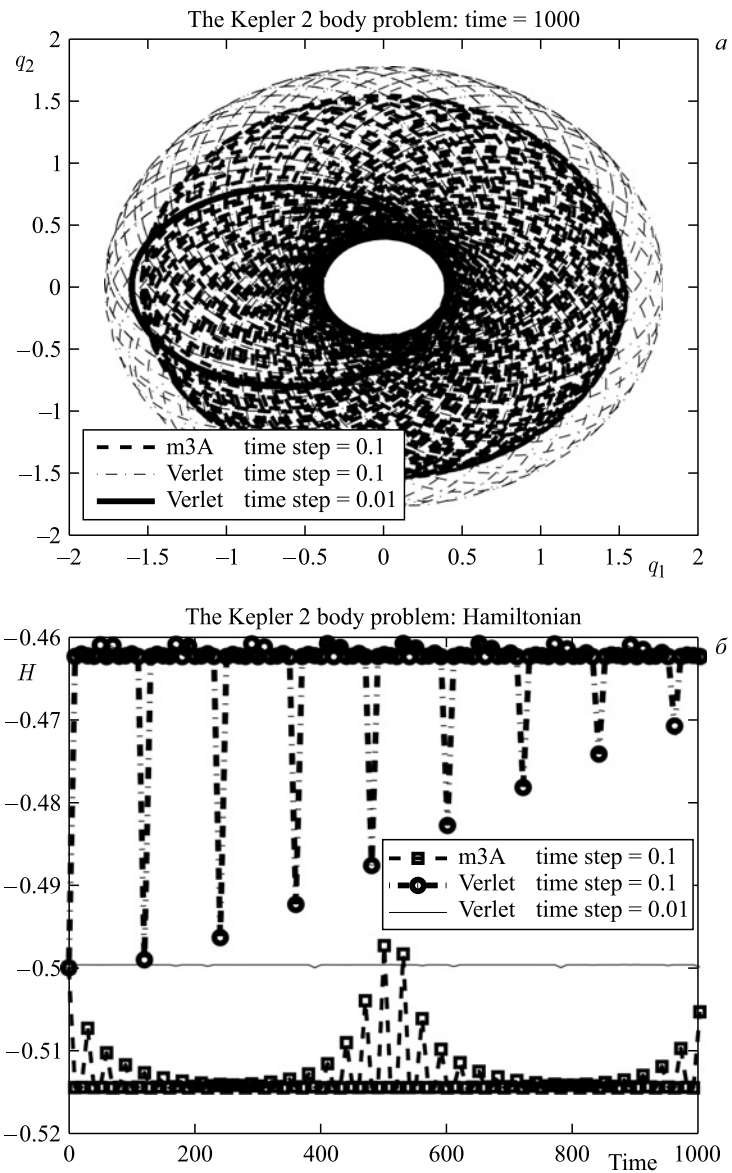


Рис. 3. Явная схема, схема Верле при $h = 0,1$ и $0,01$: а) фазовые траектории; б) зависимость гамильтониана от времени

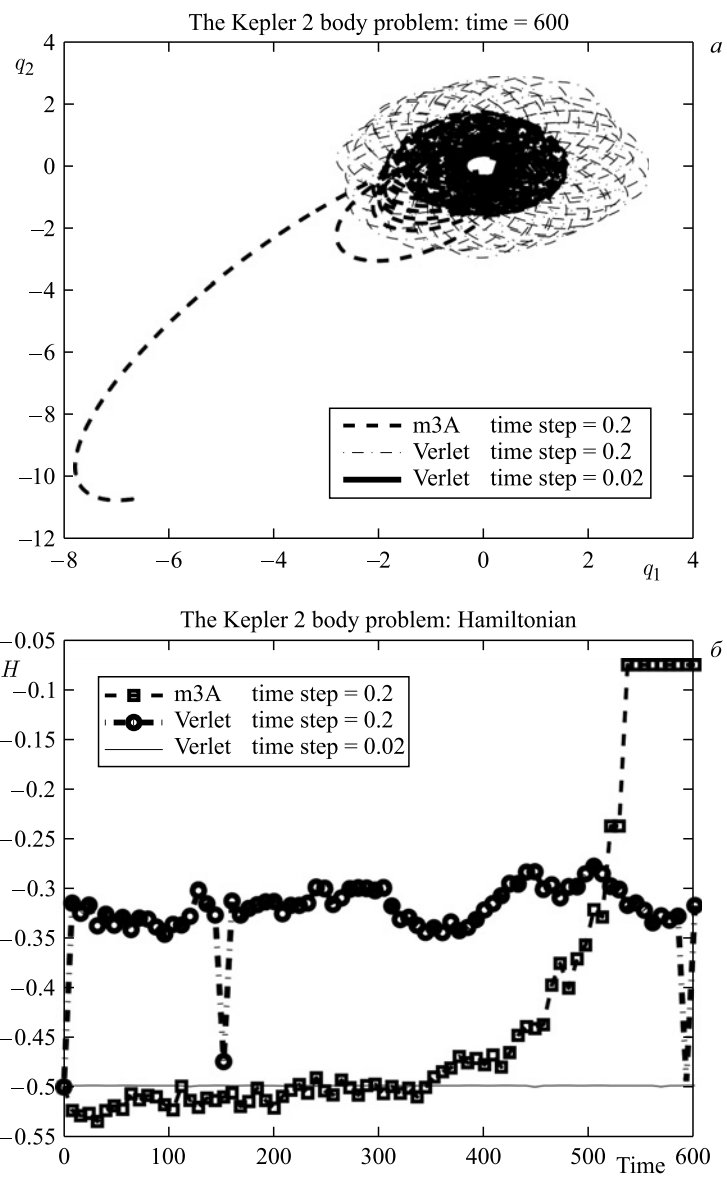


Рис. 4. Явная схема, схема Верле при $h = 0,2$ и $0,02$: а) фазовые траектории; б) зависимость гамильтониана от времени

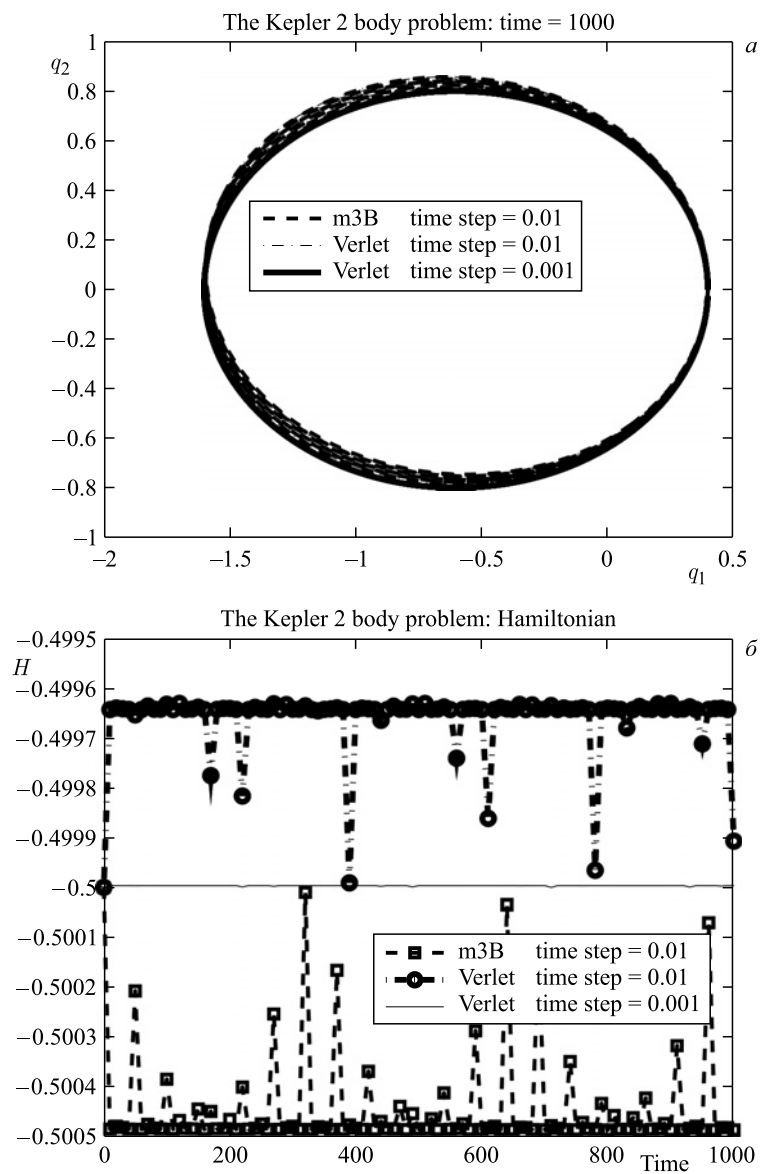


Рис. 5. Неявная схема, схема Верле при $h = 0,01$ и $0,001$: а) фазовые траектории; б) зависимость гамильтониана от времени

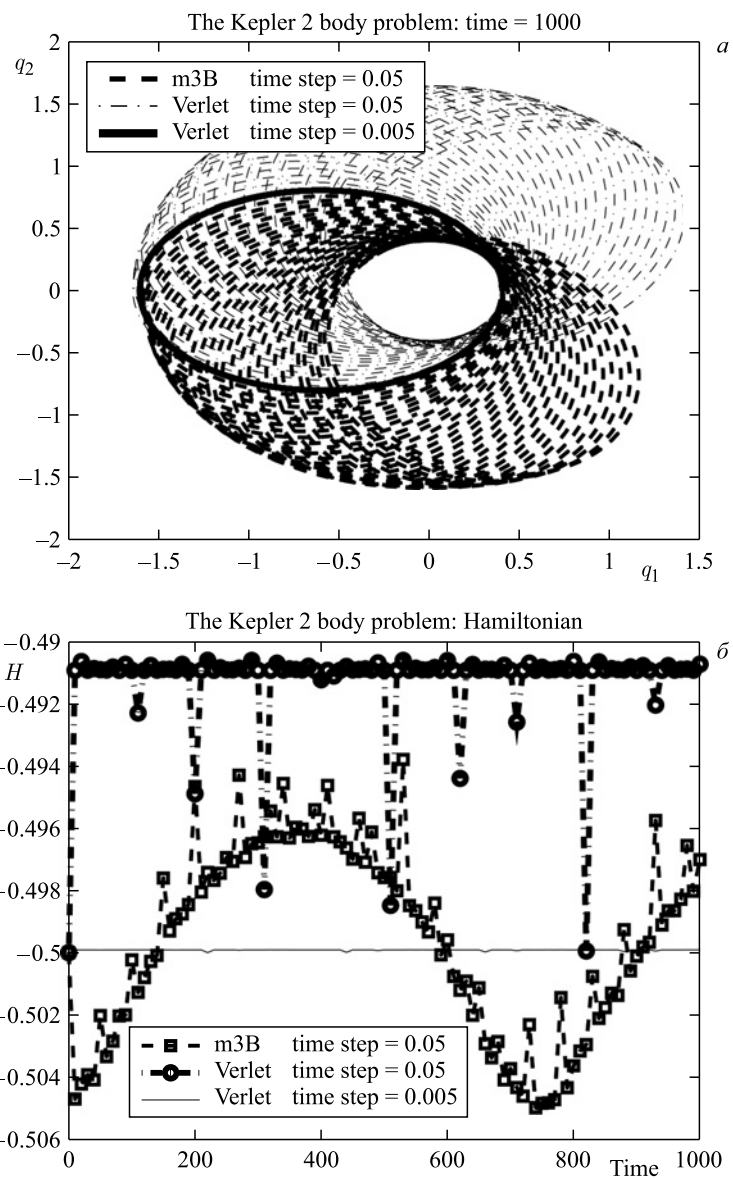


Рис. 6. Неявная схема, схема Верле при $h = 0,05$ и $0,005$: а) фазовые траектории; б) зависимость гамильтониана от времени

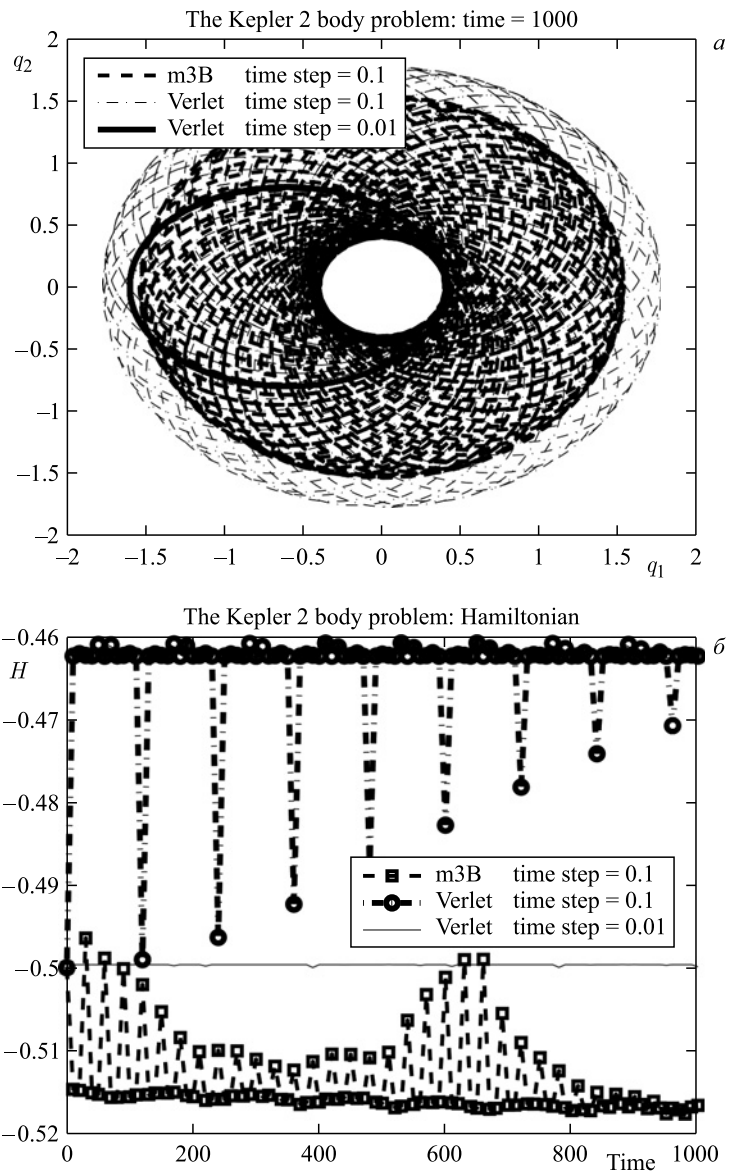


Рис. 7. Неявная схема, схема Верле при $h = 0,1$ и $0,01$: а) фазовые траектории; б) зависимость гамильтониана от времени

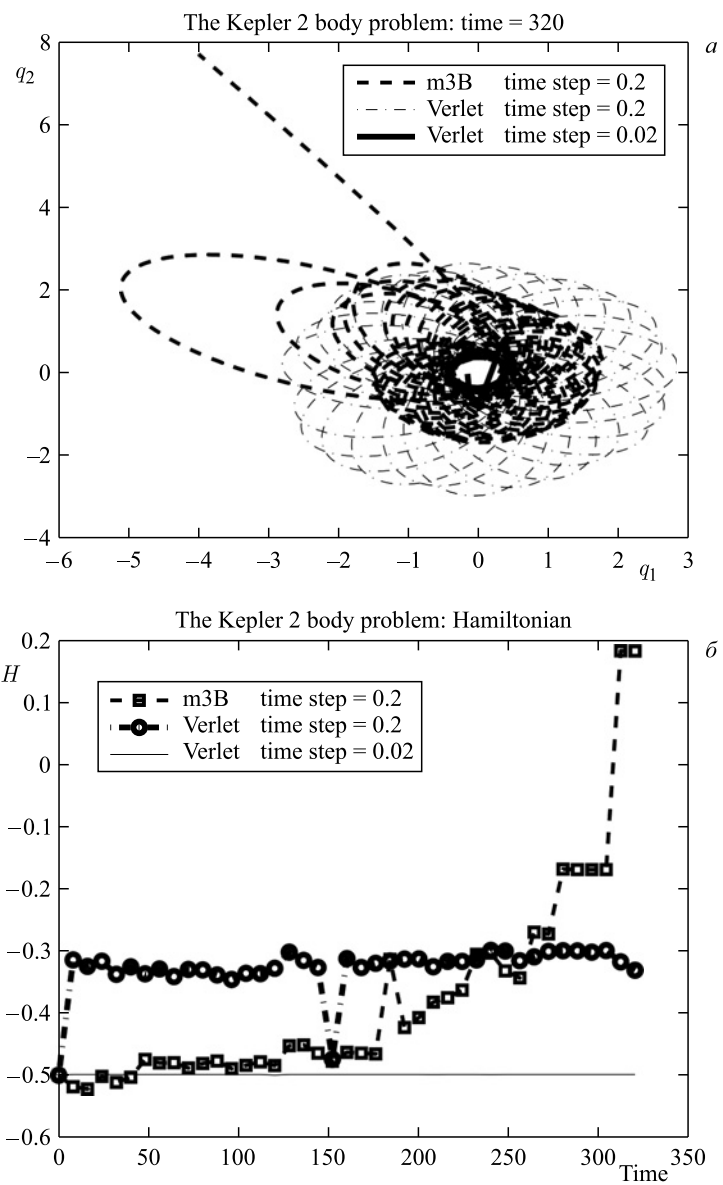


Рис. 8. Неявная схема, схема Верле при $h = 0,2$ и $0,02$: а) фазовые траектории; б) зависимость гамильтониана от времени

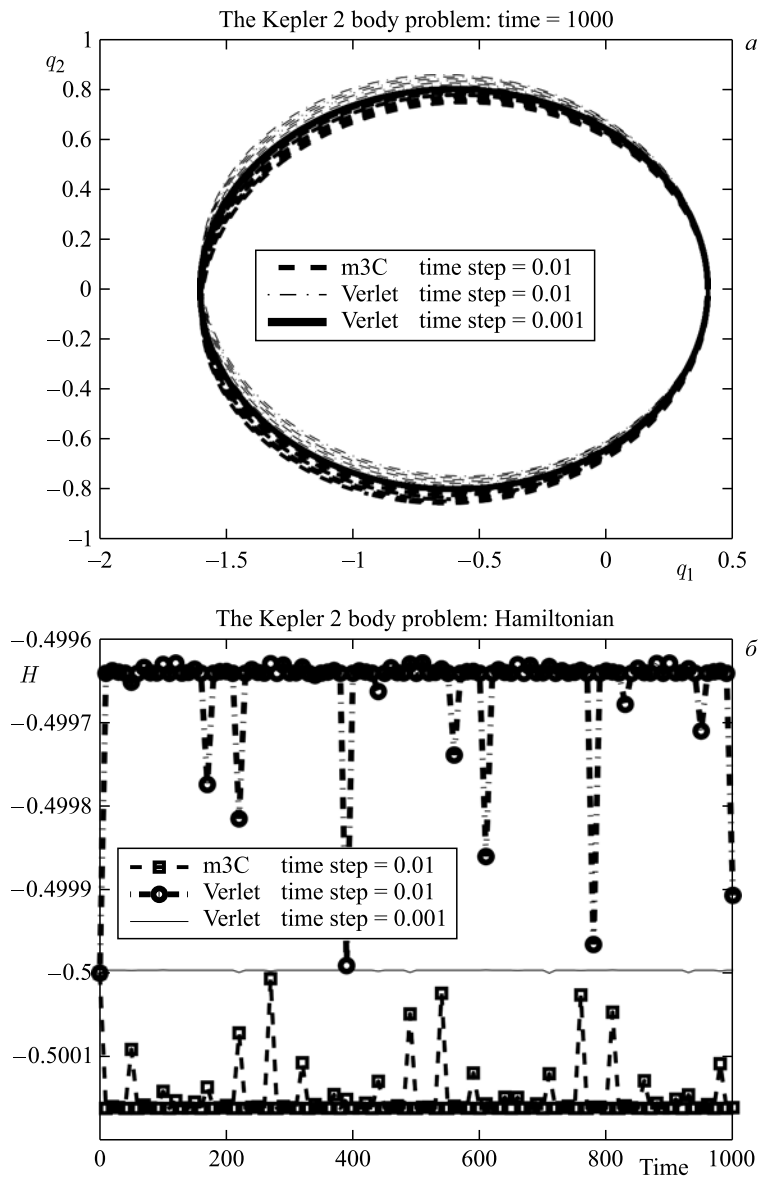


Рис. 9. Симметричная схема, схема Верле при $h = 0,01$ и $0,001$: а) фазовые траектории; б) зависимость гамильтониана от времени

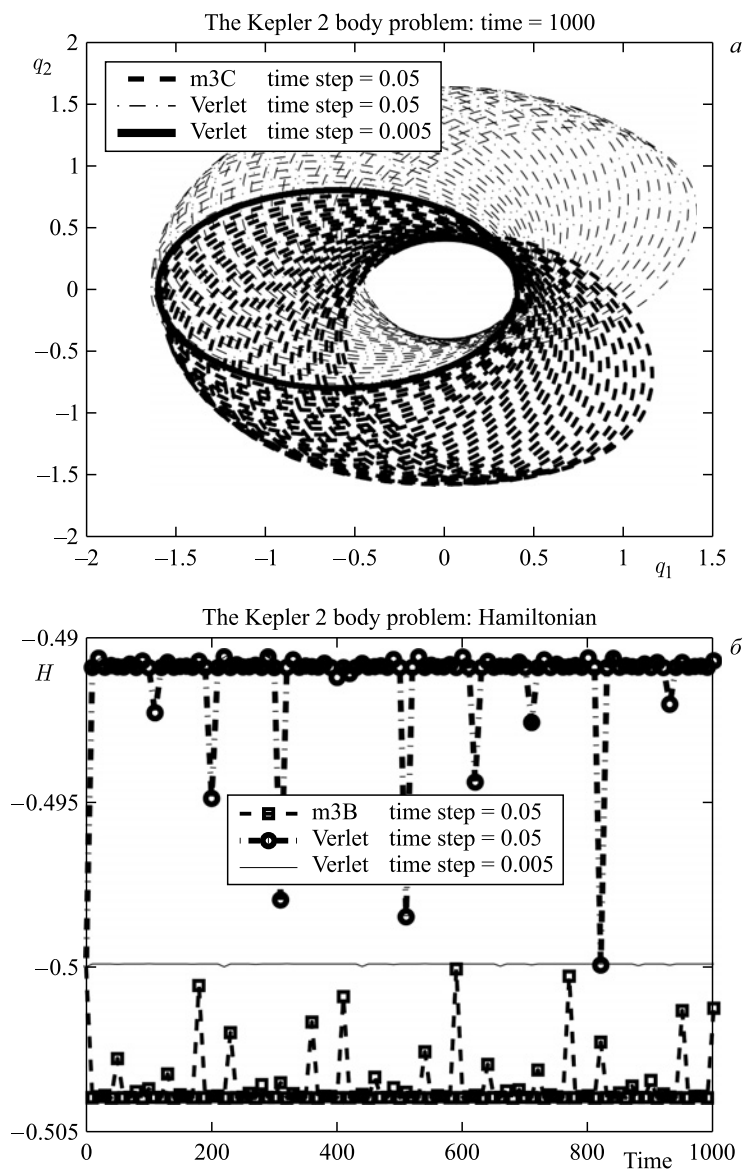


Рис. 10. Симметричная схема, схема Верле при $h = 0,05$ и $0,005$: а) фазовые траектории; б) зависимость гамильтониана от времени

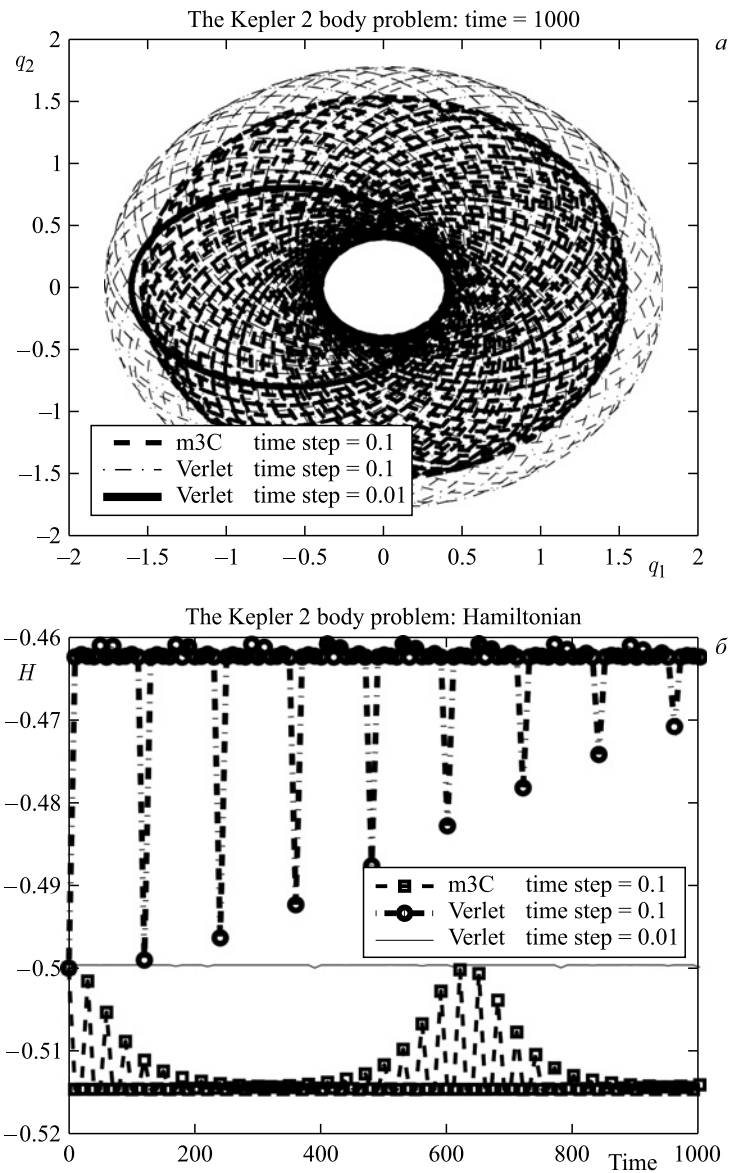


Рис. 11. Симметричная схема, схема Верле при $h = 0,1$ и $0,01$: а) фазовые траектории; б) зависимость гамильтониана от времени

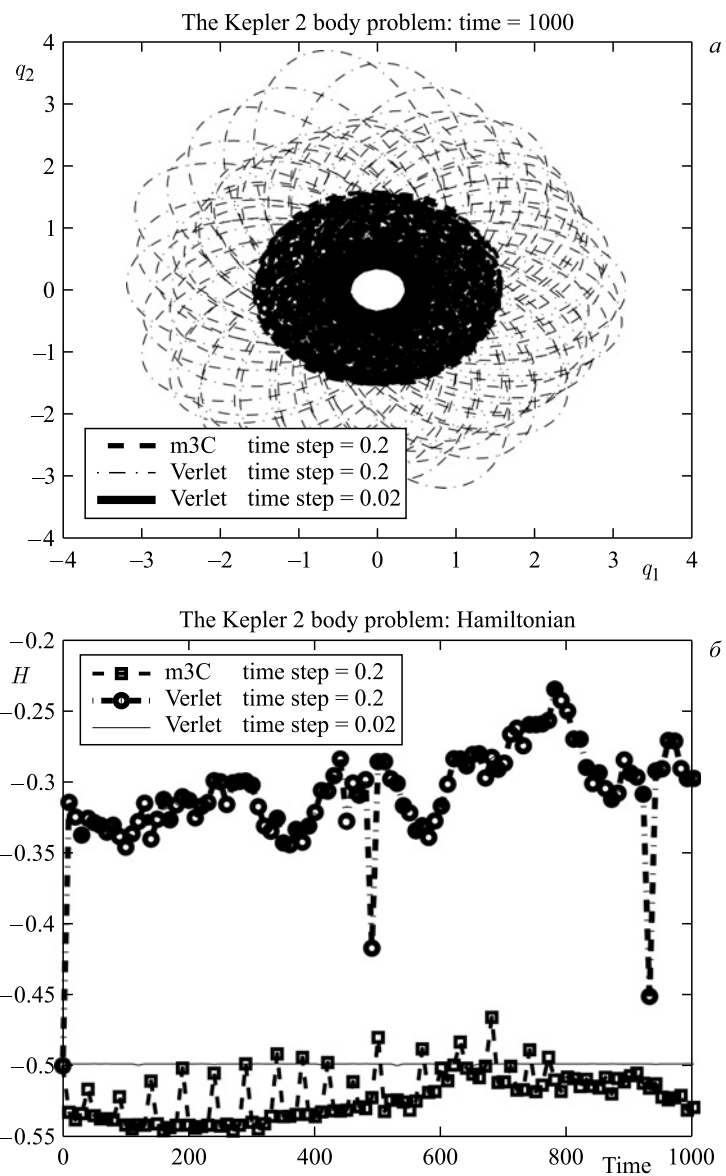


Рис. 12. Симметричная схема, схема Верле при $h = 0,2$ и $0,02$: а) фазовые траектории; б) зависимость гамильтониана от времени

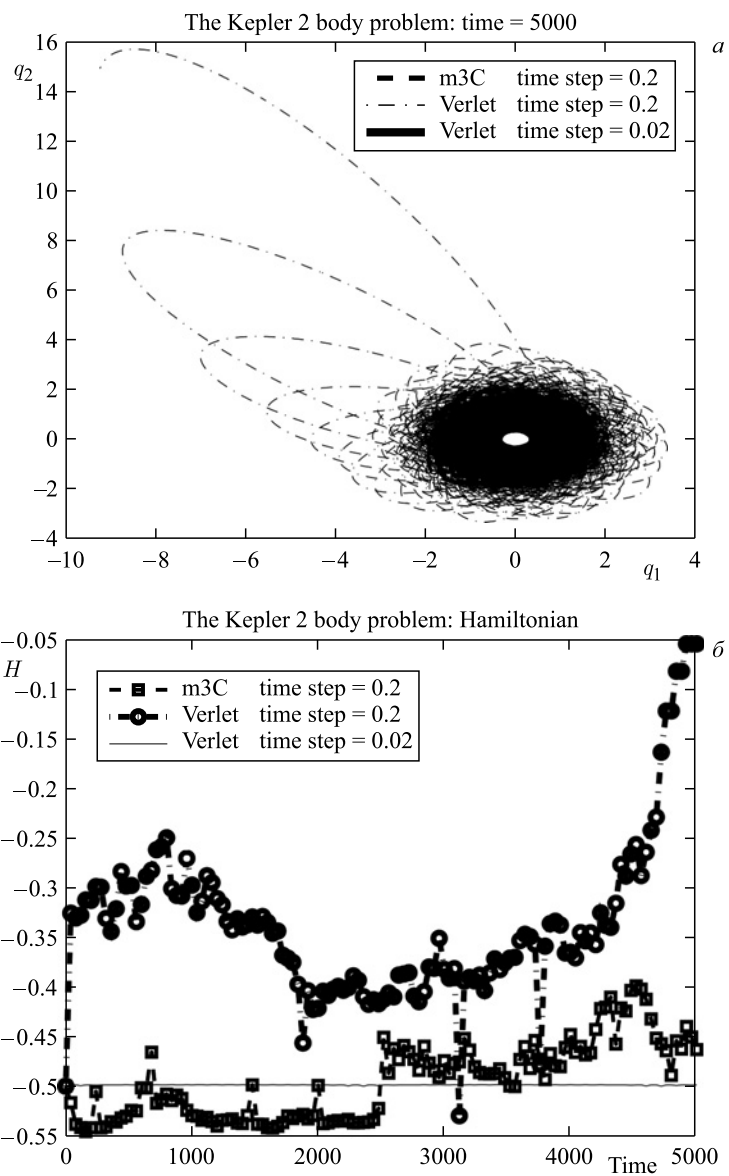


Рис. 13. Симметричная схема, схема Верле при $h = 0,2$ и $0,02$: а) фазовые траектории; б) зависимость гамильтониана от времени

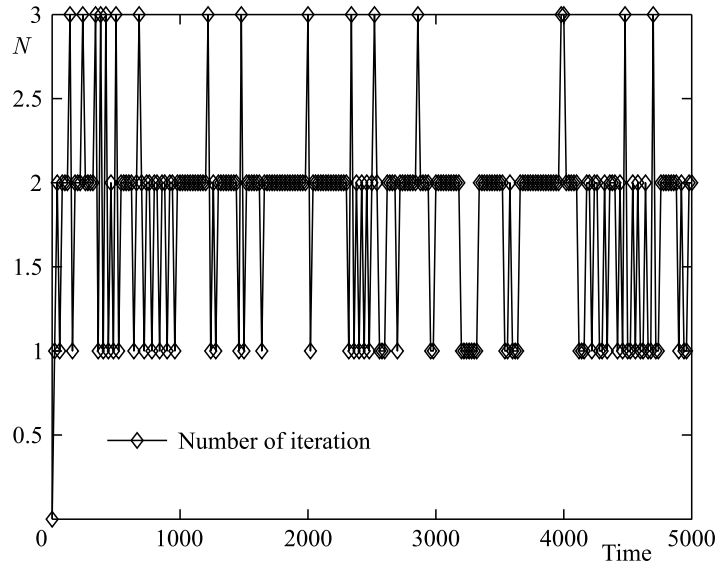


Рис. 14. Количество итераций метода Ньютона на каждом шаге по времени при $\epsilon = 10^{-10}$

Задача Кеплера. Симметричная схема ($T = 5000$):

И, наконец, в численных расчетах, которые проводились на большем интервале эволюции системы $T = 5000$, симметричная симплектическая численная схема 3-го порядка продемонстрировала существенно большую точность и устойчивость при величине шага $h = 0,2$. При этом схема Верле становится неустойчивой, начиная уже с интервалов порядка $T = 4000$ (см. рис. 13). А вычислительные затраты в методе Ньютона при вычислениях для неявной части симметричной схемы не превышают трех итераций при точности вычислений $\epsilon = 10^{-10}$ (см. рис. 14).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Предложен новый подход к построению симметричных симплектических численных схем интегрирования уравнений движения метода молекулярной динамики в гамильтоновой формулировке.
2. Описан алгоритм получения симметричных симплектических разностных схем заданного порядка аппроксимации с использованием аппарата производящих функций.
3. Приведены симметричные симплектические разностные схемы до 4-го порядка аппроксимации включительно. Схемы более высокого порядка ап-

проксимации требуют более сложного вывода и в дальнейшем могут быть получены с использованием аналитических вычислений.

4. Проведенные численные эксперименты показали, что полученные на основе разработанного подхода разностные схемы 3-го порядка аппроксимации сохраняют устойчивость для достаточно больших значений шага и интервала интегрирования, в отличие от схем по методу Верле. Они с более высокой точностью сохраняют гамильтониан системы на всем интервале интегрирования.

Работа поддержана грантом РФФИ 15-01-06055а.

ЛИТЕРАТУРА

1. Hairer E., Lubich C., Wanner G. Geometric Numerical Integration. Second ed. Springer, 2006.
2. Холмуродов Х. Т. и др. Методы молекулярной динамики для моделирования физических и биологических процессов // ЭЧАЯ. 2003. Т. 34, № 2. С. 472–515.
3. Ohmura I. et al. 2014 MDGRAPE-4: A Special-Purpose Computer System for Molecular Dynamics Simulations // Phil. Trans. R. Soc. A. V. 372. 20130387.
4. Akishin P. G., Puzynin I. V., Vinitsky S. I. A Hybrid Numerical Method for Analysis of Dynamics of the Classical Hamiltonian Systems // Comp. Math. Appl. 1997. V. 34, Nos. 2–4. P. 45–73.
5. Davis S. et al. Las Palmas Molecular Dynamics: Flexible and Modular Molecular Dynamics // Comp. Phys. Commun. 2010. V. 181, No. 12. P. 2126–2139.
6. Гантмахер Ф. Р. Лекции по аналитической механике. М.: Физматлит, 2001. 264 с.

Получено 2 марта 2016 г.

Редактор *Е. В. Григорьева*

Подписано в печать 11.05.2016.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 2,0. Уч.-изд. л. 2,4. Тираж 215 экз. Заказ № 58814.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: publish@jinr.ru

www.jinr.ru/publish/