

УДК 519.63.4:532.51.5

doi 10.26089/NumMet.v22r207

ЯВНЫЕ СХЕМЫ ВЫСОКИХ ПОРЯДКОВ ТОЧНОСТИ ДЛЯ ЗАДАЧ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Е. В. Ворожцов¹, С. П. Киселев²

Рассмотрены явные симплектические разностные схемы Рунге–Кутты–Нистрема (RKN) с числом стадий от 1 до 5 для численного решения задач молекулярной динамики, описываемых системами с распадающимися гамильтонианами. Для числа стадий 2 и 3 параметры RKN-схем получены с помощью техники базисов Гребнера. Для числа стадий 4 и 5 новые схемы найдены с применением метода численной оптимизации Нелдера–Мида. В частности, для числа стадий 4 получены четыре новые схемы. Для числа стадий 5 получены три новые схемы в дополнение к четырем схемам, известным в литературе. Для каждого конкретного числа стадий найдена схема, являющаяся наилучшей с точки зрения минимума ведущего члена погрешности аппроксимации. Верификация схем осуществлена на задаче, имеющей точное решение. Показано, что симплектическая пятистадийная RKN-схема обеспечивает более точное сохранение баланса полной энергии системы частиц, чем схемы более низких порядков точности. Исследования устойчивости схем выполнены с помощью программного пакета *Mathematica*.

Ключевые слова: молекулярная динамика, уравнения Гамильтона, симплектические разностные схемы, устойчивость.

1. Введение. Одним из актуальных направлений исследований в механике твердого тела в настоящее время является изучение поведения материалов при их ударно-волновом нагружении методами молекулярной динамики (МД). Это направление исследований зародилось в середине 20-го века в связи с созданием новых импульсных технологий, требующих высоких концентраций энергии. Суть метода МД заключается в решении уравнений движения атомов, взаимодействующих через потенциал, зависящий от координат атомов. При использовании данного метода не требуется формулировать уравнения состояния. Как известно, получение этих уравнений является одной из сложнейших задач механики сплошных сред [1].

Еще одним достоинством метода МД по сравнению с классической механикой сплошных сред является то, что метод МД естественным образом учитывает влияние кристаллической структуры твердых тел на процессы их деформации и разрушения под действием динамических нагрузок.

В [2] показано, что в пределе, когда число частиц в объеме стремится к ∞ , МД-уравнения переходят в известные уравнения механики сплошной среды, которые исследовались и решались в [1] с применением программного пакета *Mathematica*.

Уравнения молекулярной динамики представляют собой обыкновенные дифференциальные уравнения Гамильтона для атомов твердого тела. МД-уравнения имеют точное аналитическое решение в очень ограниченном числе случаев [3]. Поэтому в общем случае эти уравнения решаются численно с помощью разностных схем, в которых дифференциальный оператор заменяется разностным.

При решении уравнений Гамильтона естественно использовать разностные схемы, сохраняющие симплектические свойства этих уравнений. Нарушение этого условия приводит к несохранению инвариантов Пуанкаре и появлению нефизической неустойчивости в численных расчетах [4]. Отсюда следует, что разностный оператор численной схемы должен обладать свойствами канонического преобразования. Симплектические разностные схемы строятся операторным методом [5–8] и RKN-методом [7, 9–11].

Как известно, явные разностные схемы накладывают ограничение на шаг интегрирования [2, 12]. С другой стороны, достоинством явных схем является простота их программной реализации. Кроме того,

¹ Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН, ул. Институтская, д. 4/1, 630090, Новосибирск; ведущий науч. сотр., профессор, e-mail: vevg46@mail.ru

² Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН, ул. Институтская, д. 4/1, 630090, Новосибирск; ведущий науч. сотр., профессор, e-mail: kiselev@itam.nsc.ru

возросшее быстродействие настольных компьютеров позволяет решать с помощью явных схем многие важные прикладные задачи за приемлемое время. Поэтому в настоящей работе предпочтение отдается явным разностным схемам.

В настоящее время происходит быстрое развитие численных методов решения задач МД. Несмотря на кажущуюся простоту метода МД, до сих пор недостаточно полно исследованы вопросы точности, устойчивости и дисперсии разностных схем для задач МД.

Согласно теории уравнений Гамильтона, должен выполняться закон сохранения полной энергии системы частиц [3]. Естественно потребовать, чтобы и разностная схема обеспечивала сохранение полной энергии. Однако, как показывает практика расчетов, дисбаланс полной энергии системы оказывается более значительным для симплектических явных разностных RKN-схем низких порядков точности (второго и третьего). В то же время в [12] показано, что трехстадийная RKN-схема четвертого порядка точности обеспечивает меньшую ошибку в дисбалансе энергии, чем схемы 2-го и 3-го порядков точности. Отсюда следует вывод о целесообразности разработки явных симплектических RKN-схем более высоких порядков точности. Как было показано в [12], вывод симплектических трехстадийных RKN-схем сопряжен с большим объемом символьных вычислений. Эти вычисления выполнялись в [12] с помощью программного пакета *Maple 12*.

Для всех RKN-схем ниже получены системы полиномиальных уравнений, которым должны удовлетворять весовые параметры для обеспечения наивысшей точности при заданном числе стадий. Решения полиномиальных систем найдены для чисел стадий 2 и 3 с помощью базисов Гребнера. Необходимо отметить, что в доступных публикациях, посвященных RKN-схемам, дается неполная информация об областях устойчивости. В частности, нам не удалось найти эту информацию в случаях двух-, четырех- и пятистадийных RKN-схем. Этот пробел восполнен в настоящей статье. Верификация схем осуществлена путем сравнения численных решений с точным решением тестовой задачи. Показано, что симплектическая пятистадийная RKN-схема обеспечивает более точное сохранение баланса полной энергии системы частиц, чем схемы более низких порядков точности, описанные в работах [2, 12].

2. Основные уравнения. В методе молекулярной динамики расчет движения N частиц осуществляется путем решения уравнений Гамильтона

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dx_{i\alpha}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_{i\alpha}}, \\ \frac{dp_{i\alpha}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_{i\alpha}}, \\ H(x_{i\alpha}, p_{i\alpha}) = K(p_{i\alpha}) + V(x_{i\alpha}), \\ K(p_{i\alpha}) = \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha=1}^3 \frac{p_{i\alpha}^2}{2m_i}, \end{array} \right. \quad (1)$$

где i — номер частицы, α — номер координаты $x_{i\alpha}$ и импульса $p_{i\alpha}$, m_i — масса частицы, $K(p_{i\alpha})$ — кинетическая энергия, $V(x_{i\alpha})$ — потенциальная энергия взаимодействия частиц, $H(x_{i\alpha}, p_{i\alpha})$ — гамильтониан системы частиц. Решение системы уравнений (1) при заданных начальных условиях $x_{i\alpha}(t=0) = x_{i\alpha}^0$, $p_{i\alpha}(t=0) = p_{i\alpha}^0$ представляет собой каноническое преобразование от начального состояния к конечному состоянию

$$x_{i\alpha} = x_{i\alpha}(x_{i\alpha}^0, p_{i\alpha}^0, t), \quad p_{i\alpha} = p_{i\alpha}(x_{i\alpha}^0, p_{i\alpha}^0, t). \quad (2)$$

Решение (2) уравнений Гамильтона (1) сохраняет фазовый объем (теорема Лиувилля [3]). Условие сохранения фазового объема имеет следующий вид [2]:

$$G^T J G = J, \quad G = \frac{\partial(x_{i\alpha}, p_{i\alpha})}{\partial(x_{i\alpha}^0, p_{i\alpha}^0)}, \quad J = \left\| \begin{array}{cc} 0 & I_N \\ -I_N & 0 \end{array} \right\|, \quad (3)$$

где G — матрица Якоби, J — симплектическая матрица, I_N — единичная матрица размера $N \times N$, верхний индекс T обозначает операцию транспонирования. Из (3) следует равенство единице якобиана преобразования: $|G| = 1$. Для последующего изложения перепишем уравнения Гамильтона (1) для одномерного случая в виде

$$dx_i/dt = p_i(t)/m, \quad dp_i/dt = f_i(x_i), \quad (4)$$

где $f_i(x_i)$ — сила, действующая на i -ю частицу, $f_i(x_i) = -\partial V(x_i)/\partial x_i$, $i = 1, 2, \dots, N$. В дальнейшем будем опускать нижний индекс i при обсуждении разностных схем решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений (4).

3. Симплектические разностные RKN-схемы. K -стадийная RKN-схема для уравнений Гамильтона (4) имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} x^{(i)} &= x^n + h\alpha_i \frac{p^n}{m} + \frac{h^2}{m} \sum_{j=1}^K a_{ij} f(x^{(j)}), \\ x^{n+1} &= x^n + h \frac{p^n}{m} + \frac{h^2}{m} \sum_{j=1}^K \beta_j f(x^{(j)}), \\ p^{n+1} &= p^n + h \sum_{j=1}^K \gamma_j f(x^{(j)}), \end{aligned} \tag{5}$$

где h — временной шаг, n — номер временного слоя, $n = 0, 1, 2, \dots$; $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i, i = 1, \dots, K$ — постоянные параметры, $K \geq 1$.

Потребуем, чтобы схема (5) осуществляла каноническое преобразование $(x^n, p^n) \rightarrow (x^{n+1}, p^{n+1})$ при переходе с временного слоя n на слой $n + 1$. Для этого нужно наложить на матрицу Якоби G^{n+1} в соответствии с (3) условие [3]

$$G^{n+1,T} J G^{n+1} = J, \quad G^{n+1} = \frac{\partial(x^{n+1}, p^{n+1})}{\partial(x^n, p^n)}, \quad J = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{6}$$

Условие (6) порождает класс явных двухпараметрических RKN(α, γ) схем, для которых β_i, a_{ij} в (5) удовлетворяют условиям [11]

$$\beta_i = \gamma_i(1 - \alpha_i), \quad a_{ij} = \begin{cases} 0, & \text{если } 1 \leq i \leq j \leq K, \\ \gamma_j(\alpha_i - \alpha_j), & \text{если } 1 \leq j < i \leq K. \end{cases} \tag{7}$$

Не существует явных схем Рунге–Кутты, сохраняющих каноничность преобразования (6) [11].

Верле [10] предложил одностадийную RKN-схему второго порядка точности для системы (4). Рут [5] впервые доказал, что схема Верле — симплектическая (каноническая), и обнаружил трехстадийный RKN-метод третьего порядка точности. В [7] был получен трехстадийный симплектический RKN-метод четвертого порядка точности; также были получены в аналитическом виде две вещественные симплектические четырехстадийные схемы без использования базисов Гребнера. В [12] были получены аналитические выражения для коэффициентов $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i$ трехстадийного метода с помощью техники базисов Гребнера.

Опишем методику определения порядка точности RKN-схемы на примере RKN-схемы для вычисления импульса p^{n+1} на момент времени $t_{n+1} = t_n + h$. Пусть значение p^n известно. Решение в следующем узле t_{n+1} вычисляется по формуле $p^{n+1} = p^n + \Delta p_{h,n}$. Формула для вычисления $\Delta p_{h,n}$ зависит от количества стадий K рассматриваемого RKN-метода и от $3K$ постоянных $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i, i = 1, \dots, K$. С другой стороны, можно легко получить “точную” формулу для приращения Δp , используя разложение величины p^n в усеченный ряд Тейлора: $\Delta p_n = p(t_n + h) - p(t_n) \approx \sum_{j=1}^{N_T} \frac{h^j}{j!} \frac{d^j p(t_n)}{dt^j}$, где N_T — заданное натуральное число, $N_T \geq K + 1$. Если разность $\delta p_n = \Delta p_n - \Delta p_{h,n}$ удовлетворяет соотношению $\delta p_n/h = O(h^\lambda)$, где $\lambda > 0$, то RKN-схема имеет порядок точности $O(h^\lambda)$. Максимизация степени λ осуществляется путем подбора параметров $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i (i = 1, \dots, K)$ для каждого конкретного K .

3.1. Одностадийная RKN-схема. Положим в (5) $K = 1$ и найдем наибольший возможный порядок точности данной схемы (схемы Верле [10]) в применении к вычислению импульса p^{n+1} за счет варьирования коэффициентов α_1 и γ_1 . Прежде чем приводить соответствующие фрагменты программы на языке пакета *Mathematica*, поясним смысл обозначений, используемых в этой программе:

$$\begin{aligned} \text{ntayl} &= N_T, \quad \text{tn} = t_n, \quad \text{pnew} = p^{n+1}, \quad \text{u[t]} = \dot{x}(t), \quad \text{dp} = \Delta p_n, \\ \text{dph} &= \Delta p_{h,n}, \quad \text{errp} = \delta p_n, \quad \text{a1} = \alpha_1, \quad \text{g1} = \gamma_1. \end{aligned}$$

Сначала вычисляется “точное” разложение Δp_n (переменная dp в приводимом ниже фрагменте нашей программы на языке пакета *Mathematica*):

$$\begin{aligned} \text{pnew} &= \text{Normal}[\text{Series}[\text{p[t]}, \text{t}, \text{tn}, \text{ntayl}]] /. \text{t} \rightarrow \text{tn} + \text{h}; \\ \text{dp} &= \text{pnew} - \text{p[tn]}. \end{aligned}$$

Эти команды дают следующее выражение для Δp_n :

$$\text{dp} = \text{hp}'[\text{tn}] + 1/2\text{h}^2\text{p}''[\text{tn}] + 1/6\text{h}^3\text{p}^{(3)}[\text{tn}].$$

Для того чтобы облегчить приведение подобных в выражении для δp_n , в полученном выражении полезно выполнить достаточно очевидные преобразования с использованием уравнений Гамильтона (4):

$$p'(t_n) = f(x(t)), \quad p''(t_n) = f'(x(t))u(t), \quad p^{(3)}(t_n) = u^2(t)f''(x(t)) + f'(x(t))u'(t).$$

Согласно уравнениям Гамильтона (4), для вычисления p^{n+1} понадобится величина $x^{(1)}$. В нашей *Mathematica*-программе она вычислялась в символьном виде с помощью следующей функции:

$$\text{x1}[t_] := \text{x}[t] + \text{h}^* \text{a1}^* \text{u}[t].$$

После этого величина $\Delta p_{h,n}$ вычислялась в символьном виде с помощью команд

$$\text{ftayl1} = \text{Normal}[\text{Series}[\text{f}[y], y, y0, \text{ntayl}]] /. \{y \rightarrow \text{x1}[t], y0 \rightarrow \text{x}[t]\};$$

$$\text{dph} = \text{h}^* \text{g1}^* \text{ftayl1}.$$

Искомая величина δp_n вычисляется с помощью команды: $\text{errp} = \text{Simplify}[\text{dp} - \text{dph}]$. В результате было получено следующее выражение для погрешности δp_n :

$$\delta p_n = h P_1 f(x) + \frac{h^2}{2} P_2 u(t) f'(x) + \frac{h^3}{6} [f(x) f'(x) / m + P_3 u^2 f''(x)].$$

Здесь P_1, P_2, P_3 — многочлены, зависящие от параметров α_1, γ_1 : $P_1 = 1 - \gamma_1, P_2 = 1 - 2\alpha_1 \gamma_1, P_3 = 1 - 3\alpha_1^2 \gamma_1$. Из этих формул следует, что для обеспечения второго порядка точности схемы Верле необходимо подобрать параметры α_1, γ_1 так, чтобы $P_1 = 0, P_2 = 0$. Из этих условий находим: $\gamma_1 = 1, \alpha_1 = 1/2$. При этих параметрах значение коэффициента P_3 отлично от нуля: $P_3 = 1/4$.

С помощью аналогичных символьных вычислений из схемы Верле для вычисления x^{n+1} находится следующее выражение для погрешности $\delta x_n = \Delta x_n - \Delta x_{h,n}$:

$$\delta x_n = (h^2/2) R_2 f(x) / m + (h^3/6) R_3 p(t) f'(x) / m^2. \quad (8)$$

Здесь R_2, R_3 — многочлены, зависящие от параметров α_1, β_1 : $R_2 = 1 - 2\beta_1, R_3 = 1 - 6\alpha_1 \beta_1$. Для того чтобы RKN-схема для вычисления x^{n+1} имела тот же порядок точности, что и RKN-схема для вычисления p^{n+1} , необходимо, чтобы выполнялось равенство $R_2 = 0$ на решениях полиномиальной системы $P_1 = 0, P_2 = 0$. *Mathematica*-функция `PolynomialReduce[...]` позволяет найти выражение для многочлена R_2 в виде линейной комбинации заданных многочленов. В случае многочлена R_2 команда `PolynomialReduce[R2, {P2, P1}]` дает следующий результат: $R_2 = 2P_1 - P_2$. Аналогично находим, что $R_3 = 3P_2 - 2P_3$. Оптимальные значения $\alpha_1 = 1/2$ и $\gamma_1 = 1$ были получены выше из условий $P_1 = 0, P_2 = 0$, которые приводят к равенствам $R_2 = 0, R_3 = -1/2$. Таким образом, и уравнение для $x(t)$ также аппроксимируется схемой Верле со вторым порядком точности.

3.2. Двухстадийная RKN-схема. В рассматриваемом случае нужно положить $K = 2$ в (5). Выполняя символьные вычисления аналогично случаю одностадийной схемы, получим следующее выражение для δp_n :

$$\delta p_n = h P_1 f(x) + \frac{h^2}{2} P_2 u f'(x) + \frac{h^3}{6m} [P_{31} f(x) f'(x) + P_{32} m u^2 f''(x)],$$

где

$$P_1 = 1 - \sum_{j=1}^K \gamma_j, \quad P_2 = 1 - 2 \sum_{j=1}^K \alpha_j \gamma_j, \quad P_{31} = 1 - 6 \sum_{i=1}^K \sum_{j=i+1}^K \gamma_i \gamma_j (\alpha_j - \alpha_i), \quad P_{32} = 1 - 3 \sum_{j=1}^K \alpha_j^2 \gamma_j. \quad (9)$$

Система из четырех нелинейных алгебраических уравнений $P_1 = 0, P_2 = 0, P_{31} = 0, P_{32} = 0$ дает следующие два решения для параметров $\alpha_1, \alpha_2, \gamma_1, \gamma_2$: $\alpha_1 = (3 \pm i\sqrt{3})/12, \alpha_2 = (9 \pm i\sqrt{3})/12, \gamma_1 = (3 \pm i\sqrt{3})/6, \gamma_2 = (3 \mp i\sqrt{3})/6$. Это означает, что в данном случае нет вещественных схем третьего порядка точности. Выбор параметров $\alpha_1, \alpha_2, \gamma_1, \gamma_2$ из условий $P_1 = 0, P_2 = 0$ обеспечивает второй порядок точности рассматриваемой RKN-схемы. Эти два уравнения линейны относительно γ_1, γ_2 . Запишем их в виде системы $V \cdot X = f$, где V — матрица Вандермонда:

$$V = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \alpha_1 & \alpha_2 \end{pmatrix}, \quad X = \begin{pmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_2 \end{pmatrix}, \quad f = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Сначала рассмотрим случай, когда определитель $\text{Det } V = \alpha_2 - \alpha_1 = 0$. В этом случае находим из (10) однопараметрическое решение в виде $\gamma_2 = 1 - \gamma_1, \alpha_1 = \alpha_2 = 1/2$. Кроме того, получаем из (9): $P_{31} = 1, P_{32} = 1/4$, так что $144 \cdot (P_{31}^2 + P_{32}^2) = 144 \cdot \frac{17}{16} = 153$.

Теперь рассмотрим случай, когда $\alpha_1 \neq \alpha_2$. В этом случае легко получить из условий $P_1 = 0$, $P_2 = 0$ следующее двухпараметрическое решение, обеспечивающее второй порядок точности двухстадийной RKN-схемы:

$$\gamma_1 = (1 - 2\alpha_2) / [2(\alpha_1 - \alpha_2)], \quad \gamma_2 = (2\alpha_1 - 1) / [2(\alpha_1 - \alpha_2)]. \quad (11)$$

В теории обычных (несимплектических) многостадийных схем Рунге-Кутты является обычной практикой поиск таких параметров схемы (в рассматриваемом случае параметров α_1, α_2), которые обеспечивают минимум членов погрешности, имеющих в данном случае порядок малости $O(h^3)$ [13]. Так как оба многочлена P_{31} и P_{32} зависят от параметров α_1, α_2 , имеет смысл ввести следующий квадратичный функционал:

$$F(\alpha_1, \alpha_2) = 144 (P_{31}^2 + P_{32}^2) = [(\alpha_1(8 - 12\alpha_2) + 4\alpha_2 - 3)/(\alpha_1 - \alpha_2)]^2 + (\alpha_1(6\alpha_2 - 3) + 2 - 3\alpha_2)^2. \quad (12)$$

Это выражение получается в результате подстановки формул (11) в P_{31} и P_{32} . В точке минимума функции $F(\alpha_1, \alpha_2)$ должны выполняться соотношения $\partial F(\alpha_1, \alpha_2) / \partial \alpha_l = 0$, $l = 1, 2$. Числители полученных дробно-рациональных выражений имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} Q_1 &= -3 + 8\alpha_1 - 2\alpha_1^3 + 3\alpha_1^4 + 16\alpha_2 - 44\alpha_1\alpha_2 + 6\alpha_1^2\alpha_2 - 2\alpha_1^3\alpha_2 - 12\alpha_1^4\alpha_2 - 28\alpha_2^2 + 74\alpha_1\alpha_2^2 - 12\alpha_1^2\alpha_2^2 + \\ &\quad + 30\alpha_1^3\alpha_2^2 + 12\alpha_1^4\alpha_2^2 + 18\alpha_2^3 - 30\alpha_1\alpha_2^3 - 18\alpha_1^2\alpha_2^3 - 36\alpha_1^3\alpha_2^3 - 7\alpha_2^4 - 6\alpha_1\alpha_2^4 + 36\alpha_1^2\alpha_2^4 + 6\alpha_2^5 - 12\alpha_1\alpha_2^5, \\ Q_2 &= 3 - 20\alpha_1 + 44\alpha_1^2 - 34\alpha_1^3 + 7\alpha_1^4 - 6\alpha_1^5 - 4\alpha_2 + 28\alpha_1\alpha_2 - 58\alpha_1^2\alpha_2 + 30\alpha_1^3\alpha_2 + 6\alpha_1^4\alpha_2 + 12\alpha_1^5\alpha_2 - \\ &\quad - 6\alpha_1\alpha_2^2 + 12\alpha_1^2\alpha_2^2 + 18\alpha_1^3\alpha_2^2 - 36\alpha_1^4\alpha_2^2 + 2\alpha_2^3 + 2\alpha_1\alpha_2^3 - 30\alpha_1^2\alpha_2^3 + 36\alpha_1^3\alpha_2^3 - 3\alpha_2^4 + 12\alpha_1\alpha_2^4 - 12\alpha_1^2\alpha_2^4. \end{aligned}$$

Решение системы $Q_1 = 0$, $Q_2 = 0$ было найдено с помощью базиса Гребнера. Для этого мы использовали встроенную функцию `GroebnerBasis[{Q1,Q2}, {a1,a2}]` пакета *Mathematica*. Здесь $a1 = \alpha_1$, $a2 = \alpha_2$. Оказалось, что базис Гребнера состоит из четырех многочленов, из которых первые три являются приводимыми, как это было найдено с помощью встроенной функции `Factor[...]` используемого программного пакета:

$$\begin{aligned} G_1 &= (-1 + 2\alpha_2)^9 (15 + 2\alpha_2) (7 - 18\alpha_2 + 12\alpha_2^2) (-3 + 7\alpha_2 - 9\alpha_2^2 + 6\alpha_2^3), \\ G_2 &= -((-1 + 2\alpha_2)^2 (-782292886326335781 + 84791412129792\alpha_1 + 13518496830811327517\alpha_2 - \\ &\quad - 105687991753500756247\alpha_2^2 + 494822074007590215378\alpha_2^3 - 1547761103857501203524\alpha_2^4 + \\ &\quad + 3413403141608874304288\alpha_2^5 - 5445027180463857323808\alpha_2^6 + 6305466223138181638976\alpha_2^7 - \\ &\quad - 5183080249993946906752\alpha_2^8 + 2828691383728661777664\alpha_2^9 - 855368209356906329856\alpha_2^{10} + \\ &\quad + 51213785868624923136\alpha_2^{11} + 30677230391300103168\alpha_2^{12})), \\ G_3 &= (-1 + 2\alpha_2) (138375335965152699 + 15898389774336\alpha_1 - 31796779548672\alpha_1^2 + \\ &\quad + 21197853032448\alpha_1^3 - 2643993979226915641\alpha_2 + 23052596110039882255\alpha_2^2 - \\ &\quad - 121523546615414976256\alpha_2^3 + 432612502387510859032\alpha_2^4 - 1099597565438948027224\alpha_2^5 + \\ &\quad + 2054466563803837779616\alpha_2^6 - 2852904523255219553920\alpha_2^7 + 2925159692595283888384\alpha_2^8 - \\ &\quad - 2147987507024103404032\alpha_2^9 + 1048555229436013268736\alpha_2^{10} - 279638949859173402624\alpha_2^{11} + \\ &\quad + 10628391427610609664\alpha_2^{12} + 9693762746554238976\alpha_2^{13}), \\ G_4 &= -6378840443102352741 + 105989265162240\alpha_1 - 402759207616512\alpha_1^2 + \\ &\quad + 423957060648960\alpha_1^3 - 42395706064896\alpha_1^4 + 134645083671004390385\alpha_2 + \\ &\quad + 339165648519168\alpha_1\alpha_2 - 339165648519168\alpha_1^2\alpha_2 - 1306553371471540227807\alpha_2^2 + \\ &\quad + 7728385463568967182882\alpha_2^3 - 31152292224976113655272\alpha_2^4 + 90595546230140582933880\alpha_2^5 - \\ &\quad - 196140611828089238849712\alpha_2^6 + 321032661222529636238400\alpha_2^7 - \\ &\quad - 398020598628892865210880\alpha_2^8 + 368863060403416970198016\alpha_2^9 - \\ &\quad - 246489793612098299292928\alpha_2^{10} + 109621999423243454814720\alpha_2^{11} - \\ &\quad - 26287557235123544745984\alpha_2^{12} + 533712029766168066048\alpha_2^{13} + 894285199654734163968\alpha_2^{14}. \end{aligned} \quad (13)$$

Уравнение $G_1 = 0$ имеет в совокупности 15 решений, подсчитываемых с учетом их кратностей. Уравнение $-1 + 2\alpha_2 = 0$ дает корень $\alpha_2 = 1/2$. Подставляя это значение в (13), получаем:

$$G_4 = -2649731629056 (-17 + 2\alpha_1)(-1 + 2\alpha_1)^3.$$

Отсюда находим, что корню $\alpha_2 = 1/2$ соответствуют следующие два корня α_1 : $\alpha_1 = 17/2$ и $\alpha_1 = 1/2$. Пара корней $\alpha_1 = \alpha_2 = 1/2$ уже была получена выше в сингулярном случае, когда определитель Вандермонда $\text{Det } V$ обращается в ноль.

Второй полиномиальный множитель в G_1 дает единственный корень $\alpha_2 = -15/2$. Подставляя это значение в G_4 , получаем следующий факторизованный многочлен:

$$-2649731629056 (-1 + 2\alpha_1)^2 (-239 - 36\alpha_1 + 4\alpha_1^2).$$

Значение $\alpha_1 = 1/2$ является одним из его корней. Заметим, что $F(1/2, -15/2) = 17/4$. Уравнение $4\alpha_1^2 - 36\alpha_1 - 239 = 0$ имеет два корня: $\alpha_1^{(4),(5)} = \frac{1}{2} (9 \pm 8\sqrt{5})$. Третий полиномиальный множитель в G_1 дает два комплексных корня. Четвертый множитель в G_1 приводит к уравнению $6\alpha_2^3 - 9\alpha_2^2 + 7\alpha_2 - 3 = 0$, которое имеет одно вещественное решение $\alpha_2 = \frac{1}{6} \left(3 - \frac{5}{z} + z \right) \approx 0.8207801830727278$, где $z = (18 + \sqrt{449})^{\frac{1}{3}}$. Подставляя это решение в G_4 , получим уравнение четвертой степени для нахождения α_1 , которое здесь не приводится ввиду его громоздкости. Оно имеет два вещественных корня: $\alpha_1^{(6)} = 0.1792198169272722$ и $\alpha_1^{(7)} = 8.1664593831518564$. Таким образом, мы нашли семь вещественных решений. Значение функции F показано ниже справа от каждой пары значений α_1, α_2 :

$$\begin{aligned} & \left(\alpha_1^{(1)} = \frac{1}{2}, \alpha_2^{(1)} = \frac{1}{2}, 153 \right), \quad \left(\alpha_1^{(2)} = \frac{17}{2}, \alpha_2^{(2)} = \frac{1}{2}, \frac{17}{4} \right), \quad \left(\alpha_1^{(3)} = \frac{1}{2}, \alpha_2^{(3)} = -\frac{15}{2}, \frac{17}{4} \right), \\ & \left(\alpha_1^{(4)} = \frac{1}{2}(9 - 8\sqrt{5}), \alpha_2^{(4)} = -\frac{15}{2}, 80071.2 \right), \quad \left(\alpha_1^{(5)} = \frac{1}{2}(9 + 8\sqrt{5}), \alpha_2^{(5)} = -\frac{15}{2}, 389185 \right), \\ & \left(\alpha_1^{(6)} = 0.1792198169272722, \alpha_2^{(6)} = 0.8207801830727278, 0.019455592 \right), \\ & \left(\alpha_1^{(7)} = 8.1664593831518564, \alpha_2^{(7)} = 0.8207801830727278, 236.8001073 \right). \end{aligned} \quad (14)$$

Отсюда следует, что значения $\alpha_1^{(6)}$ и $\alpha_2^{(6)}$ являются оптимальными значениями, при которых функционал (12) достигает своего минимума. Покажем, что выполняется равенство $\alpha_1^{(6)} + \alpha_2^{(6)} = 1$. Для этого заменим в G_4 величину α_1 по формуле: $\alpha_1 = 1 - \alpha_2$. Получим следующий многочлен от одной переменной:

$$\begin{aligned} G_4(1 - \alpha_2, \alpha_2) = & (-1 + 2\alpha_2)^3 (-3 + 7\alpha_2 - 9\alpha_2^2 + 6\alpha_2^3) (-2126251883896740983 + 27162794604792749766\alpha_2 - \\ & - 147499546183106185992\alpha_2^2 + 440174256113268636584\alpha_2^3 - 775625158741778488992\alpha_2^4 + \\ & + 797031342913409808288\alpha_2^5 - 424250889183899140736\alpha_2^6 + \\ & + 67011825598549386624\alpha_2^7 + 18630941659473628416\alpha_2^8). \end{aligned}$$

Подставив сюда выражение $\alpha_2 = \frac{1}{6} \left(3 - \frac{5}{z} + z \right)$, где $z = (18 + \sqrt{449})^{\frac{1}{3}}$, получим: $G_4(1 - \alpha_2, \alpha_2) = 0$.

С помощью символьных вычислений, аналогичных случаю схемы Верле, находится выражение для погрешности δx_n в виде (8), где $R_2 = 2P_1 - P_2$, $R_3 = 3P_2 - 2P_{32}$. Используем выражения для β_1 и β_2 из (7) и подставим в R_2, R_3 формулы (11), полученные выше из требования второго порядка точности рассматриваемой RKN-схемы для импульса p^{n+1} . В результате получим: $R_2 = 0$, $R_3 = -2 + \alpha_1(3 - 6\alpha_2) + 3\alpha_2$. Теперь подставим в R_3 значения $(\alpha_1^{(l)}, \alpha_2^{(l)})$ из (14), $l = 1, \dots, 7$. Обозначим соответствующие численные значения величины R_3 через $R_3^{(l)}$. Оказалось, что $R_3^{(1)} = R_3^{(2)} = R_3^{(3)} = -\frac{1}{2}$, $R_3^{(4)} = -\frac{49}{2} + 24(9 - 8\sqrt{5}) \approx -237.825$, $R_3^{(5)} = -\frac{49}{2} + 24(9 + 8\sqrt{5}) \approx 620.825$, $R_3^{(6)} = (25 - 13z^2 + z^4)/(6z^2) \approx 0.11740$, где $z = (18 + \sqrt{449})^{\frac{1}{3}}$, $R_3^{(7)} \approx -15.2555$. Отсюда следует, что величина $R_3^{(6)}$ является наименьшей по абсолютной величине среди семи величин $R_3^{(l)}$, $l = 1, \dots, 7$, при этом $|R_3^{(l)}|/R_3^{(6)} = 4.259$ при $l \leq 3$. Таким образом, точка $(\alpha_1^{(6)}, \alpha_2^{(6)})$ является оптимальной с точки зрения точности также и при вычислении x^{n+1} по двухстадийной RKN-схеме. Также заметим, что значения $R_3^{(l)}$ при $l \leq 3$ совпадают со значением R_3 , полученным в предыдущем разделе для одностадийной RKN-схемы. Поэтому при использовании точки $(\alpha_1^{(6)}, \alpha_2^{(6)})$ в двухстадийной схеме следует ожидать более высокую точность численного решения, чем в случае схемы Верле.

Общий вывод: рассматриваемая двухстадийная схема имеет лишь второй порядок точности и ее порядок не может быть повышен до третьего.

3.3. Трехстадийная RKN-схема. Полагая $K = 3$ в (5) и выполняя символичные вычисления аналогично случаю двухстадийной схемы, получим выражение для δp_n в виде

$$\begin{aligned} \delta p_{n,3} = & hP_1f(x) + (h^2/2)P_2uf'(x) + (h^3/(6m))[P_{31}f(x)f'(x) + P_{32}mu^2f''(x)] + \\ & + (h^4u)/(24m)\{P_{41} \cdot [f'(x)]^2 + 3P_{42}f(x)f''(x) + P_{43}mu^2f^{(3)}(x)\} + \\ & + [h^5/(120m^2)](3P_{51}f^2(x)f''(x) + f(x)(P_{52} \cdot [f'(x)]^2 + 6P_{53}mu^2f^{(3)}(x)) + \\ & + mu^2(5P_{54}f'(x)f''(x) + P_{55}mu^2f^{(4)}(x)), \end{aligned} \tag{15}$$

где многочлены P_1, P_2, P_{31}, P_{32} даются формулами (9);

$$\begin{aligned} P_{41} &= 1 - 24 \sum_{i=1}^K \sum_{j=i+1}^K \gamma_i \gamma_j \alpha_i (\alpha_j - \alpha_i), \\ P_{42} &= 1 - 8 \sum_{i=1}^K \sum_{j=i+1}^K \gamma_i \gamma_j \alpha_j (\alpha_j - \alpha_i), \\ P_{43} &= 1 - 4 \sum_{j=1}^K \alpha_j^3 \gamma_j, \\ P_{51} &= 1 - 20 \sum_{i=1}^K \sum_{j=i+1}^K \sum_{l=j+1}^K \gamma_i \gamma_j \gamma_l (\alpha_j - \alpha_i) (\alpha_i - \alpha_l), \\ P_{52} &= 1 - 120 \sum_{i=1}^K \sum_{j=i+1}^K \sum_{l=j+1}^K \gamma_i \gamma_j \gamma_l (\alpha_j - \alpha_i) (\alpha_j - \alpha_l), \\ P_{53} &= 1 - 10 \sum_{i=1}^K \sum_{j=i+1}^K \gamma_i \gamma_j \alpha_i^2 (\alpha_i - \alpha_j), \\ P_{54} &= 1 - 12 \sum_{i=1}^K \sum_{j=i+1}^K \gamma_i \gamma_j \alpha_j^2 (\alpha_i - \alpha_j), \\ P_{55} &= 1 - 5 \sum_{j=1}^K \alpha_j^4 \gamma_j. \end{aligned} \tag{16}$$

Данная RKN-схема была исследована в работе [12] с помощью программного пакета *Maple 12* и базисов Гребнера. В разделе 5 мы сравним трехстадийную схему по точности с остальными четырьмя схемами, поэтому ниже мы приводим три набора параметров $\alpha_l, \gamma_l, l = 1, 2, 3$, которые были получены в [12] из требования обеспечения четвертого порядка точности рассматриваемой трехстадийной схемы:

$$\alpha_1 = \frac{3 \mp z}{6}, \quad \alpha_2 = \frac{3 \pm z}{6}, \quad \alpha_3 = \frac{3 \mp z}{6}, \quad \gamma_1 = \frac{3 \pm 2z}{12}, \quad \gamma_2 = \frac{1}{2}, \quad \gamma_3 = \frac{3 \mp 2z}{12}, \tag{17}$$

где $z = \sqrt{3}$. Назовем схему с верхними знаками “+” и “-” в (17) схемой RKN34A. Схему с нижними знаками “+” и “-” в (17) назовем схемой RKN34B. Третий набор параметров следующий ($\zeta = 2^{1/3}$):

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \frac{\zeta}{6} + \frac{\zeta^2}{12} + \frac{1}{3}, & \alpha_2 &= \frac{1}{2}, & \alpha_3 &= \frac{2}{3} - \frac{\zeta}{6} - \frac{\zeta^2}{12}, \\ \gamma_1 &= \frac{\zeta}{3} + \frac{\zeta^2}{6} + \frac{2}{3}, & \gamma_2 &= -\frac{2\zeta}{3} - \frac{\zeta^2}{3} - \frac{1}{3}, & \gamma_3 &= \frac{\zeta}{3} + \frac{\zeta^2}{6} + \frac{2}{3}. \end{aligned} \tag{18}$$

Назовем эту схему схемой RKN34C.

Выясним вопрос о том, какая из трех RKN-схем RKN34A, RKN34B, RKN34C является наиболее точной. Для этого вычислим взвешенное среднеквадратичное значение пяти полиномов $P_{5j}, j = 1, \dots, 5$:

$$P_{5, \text{rms}} = \sqrt{\frac{1}{5} \sum_{j=1}^5 (\sigma_j P_{5j})^2}. \tag{19}$$

Здесь $\sigma_1, \dots, \sigma_5$ — множители при полиномах P_{5j} в (15), они не зависят от специфики решаемой задачи; $\sigma_1 = 3, \sigma_2 = 1, \sigma_3 = 6, \sigma_4 = 5, \sigma_5 = 1$. Обозначим через $P_{5A,rms}, P_{5B,rms}, P_{5C,rms}$ значения полинома (19) для схем, соответственно, RKN34A, RKN34B, RKN34C. Были получены следующие результаты:

$$P_{5A,rms} = P_{5B,rms} = \frac{1}{72} \sqrt{\frac{5953}{5}} \approx 0.47924, \quad P_{5C,rms} = \frac{1}{288} \left[\frac{5560768}{5} + 886480\zeta + 698117\zeta^2 \right]^{\frac{1}{2}} \approx 6.3431, \quad (20)$$

где $\zeta = 2^{1/3}$. Отсюда следует, что наиболее точными из трех трехстадийных схем четвертого порядка точности являются схемы RKN34A и RKN34B.

Обозначим через $\delta x_{n,3}$ ошибку, получаемую при вычислении координаты x^{n+1} частицы по трехстадийной RKN-схеме. Эта ошибка находится с помощью символьных вычислений, аналогичных случаю двухстадийной RKN-схемы, и имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \delta x_{n,3} = \delta x_n + \frac{h^4}{24m^3} [R_{41}mf(x)f'(x) + R_{42}p^2f''(x)] + \\ + \frac{h^5p(t)}{120m^4} \left\{ R_{51}m[f'(x)]^2 + 3R_{52}mf(x)f''(x) + R_{53}p^2f^{(3)}(x) \right\}. \end{aligned} \quad (21)$$

Здесь δx_n вычисляется по формуле (8), в которой $R_2 = 2P_1 - P_2, R_3 = 3P_2 - 2P_{32}$, и многочлены P_1, P_2, P_{31}, P_{32} вычисляются по формулам (9) с $K = 3$. Далее, $R_{41} = 4P_{31} - 3P_{42}, R_{42} = 4P_{32} - 3P_{43}$. Из формул для R_2, R_3, R_{41}, R_{42} следует, что величина x^{n+1} также находится с четвертым порядком точности по трехстадийной RKN-схеме. Многочлены R_{51}, R_{52}, R_{53} имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} R_{51} &= 1 - 120 \sum_{i=1}^K \sum_{j=i+1}^K (\alpha_j - \alpha_i) \gamma_i \alpha_i \beta_j, \\ R_{52} &= 1 - 40 \sum_{i=1}^K \sum_{j=i+1}^K (\alpha_j - \alpha_i) \gamma_i \alpha_i \beta_j, \\ R_{53} &= 1 - 20 \sum_{i=1}^K \alpha_i^3 \beta_i. \end{aligned} \quad (22)$$

3.4. Четырехстадийная RKN-схема. Полагая $K = 4$ в (5) и выполняя символьные вычисления аналогично случаю трехстадийной схемы, получим выражение для δp_n в виде (15), где выражения для $P_1, P_2, P_{31}, P_{32}, P_{41}, P_{42}, P_{43}, P_{51}, P_{52}, P_{53}, P_{54}, P_{55}$ совпадают с формулами (9), (16) при $K = 4$. Команда `GroebnerBasis[{P1, P2, P31, P32, P41, P42, P43, P51, P52, P53, P54, P55}, {a1, a2, a3, a4, g1, g2, g3, g4}]` выдает следующий результат: $\{1\}$. Согласно теореме Гильберта о нулях [14], если идеал равен $\{1\}$, то 12 многочленов P_1, \dots, P_{55} не имеют ни одного общего нуля. Отсюда следует вывод об отсутствии четырехстадийных схем пятого порядка точности.

Система уравнений $P_1 = 0, P_2 = 0, P_{32} = 0, P_{43} = 0$ является линейной относительно $\gamma_i, i = 1, \dots, 4$. Ее матрицей является матрица Вандермонда V размера 4×4 , и

$$\text{Det } V = (\alpha_1 - \alpha_2)(\alpha_1 - \alpha_3)(\alpha_1 - \alpha_4)(\alpha_2 - \alpha_3)(\alpha_2 - \alpha_4)(\alpha_3 - \alpha_4).$$

Были рассмотрены с помощью базисов Гребнера все шесть случаев обращения в ноль этого определителя и была найдена 21 вещественная схема 4-го порядка точности. Для каждой схемы было вычислено аналогично (19) взвешенное среднеквадратичное значение пяти полиномов $P_{5j}, j = 1, \dots, 5$:

$$P_{5,rms}^{(l)} = \sqrt{\frac{1}{5} \sum_{j=1}^5 (\sigma_j P_{5j})^2}, \quad l = 1, \dots, 21.$$

Затем был рассмотрен случай ненулевого определителя Вандермонда. Прикладные задачи молекулярной динамики являются нелинейными, поэтому их приходится решать с применением численных методов, в частности RKN-методов. Для программной реализации этих методов достаточно задавать параметры α_j, γ_j ($j = 1, \dots, K$) в виде машинных чисел с плавающей запятой. Задачу решения полиномиальной системы, которой удовлетворяют указанные параметры, можно сформулировать как задачу

численной минимизации целевой функции, представляющей собой сумму квадратов левых частей решаемой полиномиальной системы.

Прогресс в области численного решения задач оптимизации, достигнутый за последние десятилетия, позволяет находить приближенное численное решение задач оптимизации за приемлемое машинное время с точностью, достаточной для практических приложений. Функция `NMinimize[...]`, имеющаяся в программном пакете *Mathematica*, позволяет находить минимум функции от нескольких переменных.

Пусть $X = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4)$. Введем в рассмотрение неотрицательную целевую функцию

$$P(X) = P_1^2 + P_2^2 + P_{31}^2 + P_{32}^2 + P_{41}^2 + P_{42}^2 + P_{43}^2. \tag{23}$$

Далее, пусть Ω_{8d} — гиперкуб с длиной ребра $2r$ в восьмимерном евклидовом пространстве X -точек, $\Omega_{8d} = \{(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4) \mid -r \leq \alpha_j \leq r, -r \leq \gamma_j \leq r, j = 1, \dots, 4\}$. Будем искать решение следующей задачи численной минимизации: найти $\min_{X \in \Omega_{8d}} P(X)$.

В случае нелинейной целевой функции в *Mathematica*-функции `NMinimize[...]` применяется алгоритм минимизации, предложенный в работе [15]. Будем полагать, что X^* — приближенное решение задачи минимизации функции (23) в гиперкубе Ω_{8d} , если $|P(X^*)| < 10^{-30}$. Тогда среднеквадратичное значение функций P_1, \dots, P_{43} удовлетворяет неравенству $\sqrt{(P_1^2 + \dots + P_{43}^2) / 7} < \frac{10^{-15}}{\sqrt{7}} \approx 0.378 \cdot 10^{-15}$, т.е. оно будет на уровне машинных ошибок округления при счете с двойной точностью по машинной программе, сгенерированной транслятором программы, написанной на языке FORTRAN. Таким образом, обеспечивается точность определения компонент вектора X^* , вполне достаточная для численного решения задач молекулярной динамики с помощью RKN-схем.

Для того чтобы за один запуск *Mathematica*-программы получить несколько решений задачи минимизации функции (23), использовалось задание нескольких начальных X -точек в области Ω_{8d} . Количество этих точек задавалось пользователем программы. Координаты точек задавались с помощью генератора псевдослучайных чисел, имеющегося в пакете *Mathematica*.

При размещении в Ω_{8d} случайным образом 1000 начальных точек было получено 164 численных решения рассматриваемой полиномиальной системы. Из них мы отобрали те решения, на которых величина $P_{5,rms}$ меньше, чем наименьшая из величин, полученных при рассмотрении всех частных случаев обращения в ноль определителя Вандермонда. Количество таких решений 21. Из них мы приводим в табл. 1 четыре решения в порядке возрастания соответствующих значений величины $P_{5,rms}^{(l)}$. Оказалось, что в общем случае, когда $\text{Det}V \neq 0$, удается получить схемы, которые имеют более чем в два раза меньшие значения величины $P_{5,rms}^{(l)}$, чем в случаях, когда $\text{Det}V = 0$.

Таблица 1

Значения параметров схем RKN4- la , $l = 1, \dots, 4$, при $\text{Det}V \neq 0$

Метод	α_j	γ_j	$P_{5,rms}^{(l)}$	κ_{cr}
1a	-0.163552401143382292 0.315379254000269726 0.849651865097469039 0.101814165555907346	0.048726380769174189 0.604671155309221442 0.377059806193216329 -0.030457342271611940	0.1450	2.601107169201
2a	-0.132366908603509081 0.554050453573154522 0.337015545852672127 0.831831238456345323	0.050382034698121490 -0.106956632411513153 0.632484935164970730 0.424089662548420954	0.1659	2.853927732257
3a	0.168126182298635241 0.636979619359235749 0.922878504633673047 0.136094487172141509	0.419065819011724183 0.421942016918863572 0.176843502495841326 -0.017851338426429109	0.1676	2.855254281741
4a	0.073135959738290263 0.757772082233232225 0.377483410023031707 0.831654913466108980	0.179911393946207976 -0.041533676753871755 0.436525266982659255 0.425097015825004532	0.1763	2.8424607874720

Обозначим через $\delta x_{n,4}$ ошибку, получаемую при вычислении координаты x^{n+1} частицы по четырехстадийной RKN-схеме. Эта ошибка находится с помощью символьных вычислений, аналогичных случаю трехстадийной RKN-схемы, и дается формулой (21), в которой нужно положить $K = 4$. Далее, $R_2 = 2P_1 - P_2$, $R_3 = 3P_2 - 2P_{32}$, $R_{41} = 4P_{31} - 3P_{42}$, $R_{42} = 4P_{32} - 3P_{43}$, $R_{52} = 5P_{42} - 4P_{53}$, $R_{53} = 5P_{43} - 4P_{55}$, $R_{51} = 5(1 - \alpha_2)P_{41} + r_1P_2 + r_2P_{32} + r_3$, где $r_1 = 60(\alpha_2\alpha_3\gamma_3 - \alpha_3^2\gamma_3 + \alpha_2\alpha_4\gamma_4 - \alpha_4^2\gamma_4)$, $r_2 = 40(\alpha_2\gamma_3 - \alpha_3\gamma_3 + \alpha_2\gamma_4 - \alpha_4\gamma_4)$, $r_3 = -4 + 5(\alpha_2 + 8\alpha_2\gamma_3 - 8\alpha_3\gamma_3 - 12\alpha_2\alpha_3\gamma_3 + 12\alpha_3^2\gamma_3 - 4((\alpha_2 - \alpha_4)(3\alpha_4 - 2) + 6(\alpha_2 - \alpha_3)\alpha_4(\alpha_4 - \alpha_3)\gamma_3)\gamma_4)$. Если подставить в выражения для R_{51} , R_{52} , R_{53} решение полиномиальной системы $\langle P_1 = 0, P_2 = 0, P_{31} = 0, P_{32} = 0, P_{41} = 0, P_{42} = 0, P_{43} = 0 \rangle$, то получаем: $R_{51} = r_3$, $R_{52} = -4P_{53}$, $R_{53} = -4P_{55}$. Отсюда следует, что и уравнение для $x(t)$ аппроксимируется по схеме RKN4 также с четвертым порядком точности.

3.5. Пятистадийная RKN-схема. При $K = 5$ в (5) выражение для δp_n имеет с учетом (15) следующий вид:

$$\delta p_n = \delta p_{n,3} + [h^6 u / (720m^2)] \left\{ [f'(x)]^3 + 15P_{61}f^2(x)f^{(3)}(x) - f'(x)[P_{62}f(x)f''(x) + P_{63}mu^2f^{(3)}(x)] + mu^2[5P_{64}(f''(x))^2 + 10P_{65}f(x)f^{(4)}(x) + mP_{66}u^2f^{(5)}(x)] \right\}, \quad (24)$$

где многочлены $P_1, P_2, P_{31}, P_{32}, P_{41}, P_{42}, P_{43}, P_{51}-P_{55}$ даются формулами (9) и (16) при $K = 5$. Приведем выражения для полиномов P_{61}, \dots, P_{66} :

$$\begin{aligned} P_{61} &= 1 - 24 \left[\sum_{i=1}^K \sum_{j=i+1}^K \gamma_i^2 \gamma_j \alpha_j (\alpha_i - \alpha_j)^2 + 2 \sum_{i=1}^K \sum_{j=i+1}^K \sum_{l=j+1}^K \gamma_i \gamma_j \gamma_l \alpha_l (\alpha_i - \alpha_l) (\alpha_j - \alpha_l) \right], \\ P_{62} &= 18 - 720 \left[\sum_{i=1}^K \sum_{j=i+1}^K \gamma_i^2 \gamma_j \alpha_i (\alpha_i - \alpha_j)^2 + \sum_{i=1}^K \sum_{j=i+1}^K \sum_{l=j+1}^K \gamma_i \gamma_j \gamma_l (\alpha_j - \alpha_l) [(\alpha_i^2 - \alpha_j^2) + 2\alpha_j(\alpha_i - \alpha_l)] \right], \\ P_{63} &= 11 - 120 \left[\sum_{i=1}^K \sum_{j=i+1}^K \gamma_i \gamma_j \alpha_i (\alpha_j - \alpha_i) (\alpha_i^2 + 3\alpha_j^2) \right], \\ P_{64} &= 1 - 72 \sum_{i=1}^K \sum_{j=i+1}^K \gamma_i \gamma_j \alpha_i^2 \alpha_j (\alpha_j - \alpha_i), \\ P_{65} &= 1 - 12 \sum_{i=1}^K \sum_{j=i+1}^K \alpha_j^3 \gamma_i \gamma_j (\alpha_j - \alpha_i), \\ P_{66} &= 1 - 6 \sum_{j=1}^K \alpha_j^5 \gamma_j. \end{aligned} \quad (25)$$

В работах [16, 17] было показано, что условия $P_{41} = 0$, $P_{52} = 0$ являются избыточными. В [16] численные значения параметров α_i, γ_i ($i = 1, \dots, 5$) были найдены путем численного расчета с погрешностью, не превосходящей 10^{-10} . В результате были получены четыре вещественных метода [16, табл. 1].

Чтобы определить, какой из четырех методов является наиболее точным, мы подсчитали численные значения взвешенной среднеквадратичной величины

$$P_{6, \text{rms}} = \sqrt{\frac{1}{7} \left(1 + \sum_{j=1}^6 (\sigma_j P_{6j})^2 \right)} \quad (26)$$

для всех четырех RKN-методов пятого порядка точности, где $\sigma_1 = 15$, $\sigma_2 = \sigma_3 = -1$, $\sigma_4 = 5$, $\sigma_5 = 10$, $\sigma_6 = 1$ в соответствии с (24). Было найдено, что $P_{6, \text{rms}} \approx 11.33081$ для методов 1 и 3; $P_{6, \text{rms}} \approx 7.11113$ для методов 2 и 4. Совпадение величины (26) для пар методов 1, 3 и 2, 4 не является случайным: в [16] разъяснено, что метод 3 является сопряженным к методу 1, а метод 4 является сопряженным к методу 2 [16, табл. 1]. Сопряженный метод получается заменой h, x^n, u^n , соответственно, на $-h, x^{n+1}, u^{n+1}$.

Выше с помощью *Mathematica*-функции `NMinimize[...]` было найдено большое количество вещественных решений полиномиальной системы, соответствующей схеме RKN4. Используем эту функцию аналогичным образом для поиска новых вещественных решений полиномиальной системы, соответствующей

схеме RKN5. Пусть $X = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4, \gamma_5)$. Введем в рассмотрение неотрицательную целевую функцию $P(X) = P_1^2 + P_2^2 + P_{31}^2 + P_{32}^2 + P_{42}^2 + P_{43}^2 + P_{51}^2 + P_{53}^2 + P_{54}^2 + P_{55}^2$. Далее, пусть Ω_{10d} — прямоугольный параллелепипед в десятимерном евклидовом пространстве X -точек, $\Omega_{10d} = \{(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4, \gamma_5) | -r_1 \leq \alpha_j \leq r_1, -r_2 \leq \gamma_j \leq r_2, j = 1, \dots, 5\}$. Здесь r_1, r_2 — задаваемые пользователем положительные постоянные, определяющие длины ребер параллелепипеда. Будем искать решение следующей задачи численной минимизации: найти $\min_{X \in \Omega_{10d}} P(X)$.

Чем меньше r_1, r_2 , тем меньше количество итераций требуется для получения решения с машинной точностью. С учетом результатов работы [16] мы задавали $r_1 = 1.2, r_2 = 2.0$. Рассматриваемая задача минимизации была решена численно с применением *Mathematica*-функции `NMinimize[...]` вполне аналогично случаю восьмимерного пространства. Как и в случае четырехстадийной RKN-схемы, приближенное решение сформулированной задачи определялось как решение, удовлетворяющее неравенству $|P(X)| < 10^{-30}$.

При размещении в Ω_{10d} случайным образом $2 \cdot 10^4$ начальных точек было получено три численных решения рассматриваемой полиномиальной системы. Они приведены в табл. 2 в порядке возрастания соответствующих значений величины $P_{6,rms}^{(l)}$. Как видно из этой таблицы, значения $P_{6,rms}^{(l)}$ намного меньше, чем в случае методов 1–4 из [16].

Далее, из табл. 3 видно, что величины $|P_1(X)|, |P_2(X)|, \dots, |P_{55}(X)|$ в случаях методов 5, 6, 7 лежат в интервале от 0 до $3.1 \cdot 10^{-15}$, а в случае методов из [16] они лежат, по порядку малости, в диапазоне от $O(10^{-15})$ до $O(10^{-11})$ в соответствии с табл. 4.

Обозначим через $\delta x_{n,5}$ ошибку, получаемую при вычислении координаты x^{n+1} частицы по пятистадийной RKN-схеме. Эта ошибка находится с помощью символьных вычислений, аналогичных слу-

Таблица 2

Значения параметров схем RKN5- $l, l = 5, 6, 7$, при $\text{Det } V \neq 0$

Метод	α_j	γ_j	$P_{6,rms}^{(l)}$	κ_{cr}
5	0.2180137428269302846130	0.6820219126111968233062	0.7781	2.296717145585
	-0.6630941900724356408148	0.0016344908811675544491		
	0.9162815210519267283829	0.1913562866884614688257		
	0.2754877361702176563618	-0.2702137971750414591199		
	0.6363798707383668817883	0.3952011069942156229473		
6	0.2196475212048931979769	0.6943833404764609973370	0.8707	1.637899789244
	0.9267747775526675724223	0.1788491925494029854970		
	0.2634969208444160604365	-0.2803713165469455814716		
	-0.3745890710865884543078	0.0051231201077848427874		
	0.6405808696031580762309	0.4020156634132967532480		
7	0.1426544325995554307606	0.3426149230052762950649	1.5344	2.760588329702
	0.4972289919220082565765	0.4755156268306003353175		
	0.9805992092388250425116	0.1230187470009109773628		
	0.4948837279995942362020	-0.2975707328892313041635		
	0.6770500031205852753402	0.3564214360524436964184		

Таблица 3

Невязки $P_1(X), P_2(X), \dots, P_{55}(X)$ новых RKN-методов пятого порядка точности

Метод	P_1	P_2	P_{31}	P_{32}	P_{41}	P_{42}
5	-5.6E-17	0.0	0.0	0.0	3.1E-15	0.0
6	2.8E-17	1.1E-16	1.1E-16	2.2E-16	-1.8E-15	-2.2E-16
7	0.0	1.1E-16	-2.2E-16	2.2E-16	2.2E-16	2.8E-16
Метод	P_{43}	P_{51}	P_{52}	P_{53}	P_{54}	P_{55}
5	2.2E-16	-4.4E-16	2.1E-15	1.2E-16	5.6E-17	0.0
6	0.0	0.0	3.1E-15	-3.0E-16	-3.3E-16	0.0
7	1.1E-16	2.2E-16	-2.2E-16	-1.1E-16	1.7E-16	1.1E-16

Таблица 4

Значения многочленов R_{51}, R_{52}, R_{53} на четырех численных решениях, полученных в [16]

Метод	R_{51}	R_{52}	R_{53}
1	-3.672E-11	-9.812E-12	3.007E-12
2	7.073E-12	1.287E-12	-5.633E-14
3	2.174E-13	6.882E-14	-1.930E-16
4	3.810E-13	1.162E-13	3.719E-16

чаю трехстадийной RKN-схемы, и имеет следующий вид: $\delta x_{n,5} = \delta x_{n,3} + \frac{h^6}{720m^5} \{m^2 R_{61} f(x) [f'(x)]^2 + 3R_{62} m^2 f^2(x) f''(x) + 5R_{63} m p^2 f'(x) f''(x) + 6R_{64} m f(x) p^2 f^{(3)}(x) + R_{65} p^4 f^{(4)}(x)\}$, где $\delta x_{n,3}$ дается формулой (21), в которой нужно положить $K = 5$. При этом выражения для R_2, R_3, R_{41}, R_{42} в терминах многочленов $P_1, P_2, P_{31}, P_{32}, P_{42}, P_{43}$ те же, что и в случае погрешности (21), а R_{51}, R_{52}, R_{53} даются формулами (22). Далее,

$$R_{61} = 1 - 720 \sum_{i=1}^K \sum_{j=i+1}^K \sum_{l=j+1}^K (\alpha_j - \alpha_i)(\alpha_l - \alpha_j) \beta_l \gamma_i \gamma_j,$$

$$R_{62} = 1 - 120 \sum_{i=1}^K \sum_{j=i+1}^K \left[(\alpha_j - \alpha_i)^2 \beta_j \gamma_i^2 + 2 \sum_{l=j+1}^K (\alpha_l - \alpha_i)(\alpha_l - \alpha_j) \beta_l \gamma_i \gamma_j \right],$$

$$R_{63} = 1 - 72 \sum_{i=1}^{K-1} \sum_{j=i+1}^K (\alpha_j - \alpha_i)(\alpha_i + 2\alpha_j) \alpha_i \beta_j \gamma_i,$$

$$R_{64} = 1 - 60 \sum_{i=1}^K \sum_{j=i+1}^K (\alpha_j - \alpha_i) \alpha_j^2 \beta_j \gamma_i,$$

$$R_{65} = 1 - 30 \sum_{i=1}^K \alpha_i^4 \beta_i.$$

В табл. 4 приводятся значения полиномов R_{51}, R_{52}, R_{53} , полученные после подстановки в них четырех численных решений, полученных в [16]. Эти значения находятся на уровне машинных ошибок округления, откуда следует, что и уравнение для $x(t)$ аппроксимируется по схеме RKN5 также с пятым порядком точности. Видно, что методы 2 и 4 обладают несколько меньшими значениями невязок вида $R_{5l}(X)$, $l = 1, 2, 3$, где X — вектор приближенного решения из [16].

4. Условия устойчивости RKN-схем. Известно, что если симплектическая схема устойчива, то все корни ее характеристического уравнения лежат на единичной окружности комплексной плоскости. В качестве физической модели рассмотрим осциллятор с квадратичным потенциалом $V(x) = m\omega^2 x^2/2$, для которого положение равновесия находится при $x = 0$, $p = 0$. Подставляя данное выражение $V(x)$ в уравнения (4), получим линейные уравнения движения

$$dx/dt = p/m, \quad dp/dt = -m\omega^2 x. \quad (27)$$

Введем в рассмотрение векторы $\vec{X}^n = (x^n, p^n)^T$ и $\vec{X}^{n+1} = (x^{n+1}, p^{n+1})^T$. В матричной записи уравнения (5), примененные к системе (27), имеют вид: $\vec{X}^{n+1} = G\vec{X}^n$, где G — матрица размера 2×2 . Пусть g_{ij} , $i, j = 1, 2$ — элементы этой матрицы. Характеристическое уравнение матрицы G имеет вид: $|G - \lambda E| = \lambda^2 + \text{Tr}(G)\lambda + 1 = 0$, где $\text{Tr}(G)$ — след матрицы G , $\text{Tr}(G) = -g_{11} - g_{22}$; E — единичная матрица размера 2×2 . Величина $\text{Tr}(G)$ является функцией параметров α_j, γ_j , $j = 1, \dots, K$, и числа Куранта $\kappa = \omega h$. Условием устойчивости схемы (5) являются условия $|\lambda_i| \leq 1$, где λ_i , $i = 1, 2$ — собственные значения матрицы G , т.е. корни характеристического уравнения. Если дискриминант этого уравнения $D = [\text{Tr}(G)/2]^2 - 1$ отрицателен, то по теореме Виета оно имеет два комплексно-сопряженных корня λ_1, λ_2 , такие, что $|\lambda_1| = |\lambda_2| = 1$. В этом случае существует ненулевая область устойчивости $|\kappa| \leq \kappa_{\text{cr}}$, где κ_{cr} — критическое число Куранта. Введем обозначение $D_2(\kappa) = |\text{Tr}(G)| - 2$. Для рассматриваемых RKN-схем κ_{cr} является решением уравнения $D_2(\kappa) = 0$, а искомое условие устойчивости получается из неравенства $D_2 < 0$, вытекающего из неравенства $D < 0$.

Как известно, симплектические схемы сохраняют фазовый объем $|G| = 1$. Это соотношение использовалось для проверки правильности формул для коэффициентов характеристического уравнения. Определитель $|G|$ вычислялся в аналитическом виде для всех схем с помощью команд `Simplify[Expand[Det[G]]]` пакета *Mathematica*, и всегда получалось равенство $|G| = 1$.

4.1. Одностадийная RKN-схема. В применении к линейным уравнениям (27) схема Верле (5), $K = 1$, принимает следующий вид:

$$x^{(1)} = x^n + \frac{h}{2} \frac{p^n}{m}, \quad x^{n+1} = x^n + h \frac{p^n}{m} - \frac{h^2 \omega^2}{2} x^{(1)}, \quad p^{n+1} = p^n - hm \omega^2 x^{(1)}. \quad (28)$$

Характеристическое уравнение $|G - \lambda E| = 0$ имеет вид $1 - 2\lambda + \kappa^2 \lambda + \lambda^2 = 0$. Отсюда находится дискриминант $D = \kappa^2(\kappa^2/4 - 1)$. Условие устойчивости выполняется, если $D \leq 0$. В области положительных κ это приводит к условию устойчивости вида $0 < \kappa \leq 2$ (рис. 1).

Как известно, уравнения Гамильтона обратимы во времени при одновременном обращении времени и скоростей частиц [2]. Отсюда следует, что разностные симплектические схемы так же обратимы во времени, как и уравнения Гамильтона. Как следует из рис. 1, $D \leq 0$ также в промежутке $[-2, 0]$, т.е. схема Верле устойчива и в этом промежутке. Поэтому условие устойчивости этой схемы следует записывать в виде $0 < |\kappa| \leq 2$.

4.2. Двухстадийная RKN-схема. Здесь не будем приводить характеристическое уравнение ввиду его громоздкости. В соответствующем дискриминанте D выразим параметры γ_1, γ_2 через α_1, α_2 по формулам (11). В итоге дискриминант получается в виде $D = \varphi(\kappa, \alpha_1, \alpha_2)[8(\alpha_1 - \alpha_2)]^{-2} - 1$, где $\varphi(\kappa, \alpha_1, \alpha_2) = (2\alpha_2^2 \kappa^4 + 2\alpha_1^2(2\alpha_2 - 1)\kappa^4 + \alpha_2(-3\kappa^4 + 4\kappa^2 - 8) - \alpha_1(4\alpha_2^2 \kappa^4 - 4\alpha_2 \kappa^4 + \kappa^4 + 4\kappa^2 - 8) + \kappa^4)^2$. При $l = 6$ в (14) получено следующее выражение для дискриминанта D : $D = 0.00082628 (\kappa^4 - 17.3943\kappa^2 + 34.7886)^2 - 1$. Обозначим корни уравнения $D = 0$ через $\kappa_1, \dots, \kappa_8$. Они имеют следующий вид: $\kappa_1 = -\kappa_8, \kappa_2 = -\kappa_7, \kappa_3 = -\kappa_6, \kappa_4 = \kappa_5 = 0, \kappa_6 = 2.496957971257, \kappa_7 = 3.340580819059, \kappa_8 = 4.170644952389$. Из рис. 1 (штриховая линия) с учетом интервалов, где $D \leq 0$, получаем следующие условия устойчивости двухстадийной RKN-схемы: $0 < |\kappa| \leq \kappa_6, \kappa_7 \leq |\kappa| \leq \kappa_8$.

4.3. Трехстадийная RKN-схема. Символьное вычисление элементов матрицы перехода G , соответствующей трехстадийной схеме, выполняется по разработанной *Mathematica*-программе аналогично случаю двухстадийной схемы. Заметим, что независимо от количества стадий RKN-метода матрица перехода G — всегда матрица размера 2×2 . Для упрощения выражений для элементов $g_{ij}, i, j = 1, 2$ матрицы G использовались соотношения $P_1 = 0, P_2 = 0, P_{32} = 0$.

С учетом ограничений $P_1 = 0, P_2 = 0, P_{32} = 0$ след $\text{Tr}(G) = -(g_{11} + g_{22}) = -2 + \kappa^2 - \kappa^4/12 + Z\kappa^6$, где $Z = \gamma_1\gamma_2\gamma_3(\alpha_3 - \alpha_2)(\alpha_2 - \alpha_1)(1 - \alpha_3 + \alpha_1)$; кроме того, $|G| = 1$.

Найдем область устойчивости схемы RKN34A. Эта схема определяется параметрами (17) с верхними знаками. На рис. 2 а приведен график функции $D_2(\kappa) = |\text{Tr}(G(\kappa))| - 2$ для случая, когда $\text{Tr}(G) > 0$. В этом случае уравнение $D_2(\kappa) = 0$ имеет два вещественных корня $\kappa = \pm\kappa_{\text{cr}}$, где $\kappa_{\text{cr}} = 2\sqrt{2 + 2^{1/3} - 2^{2/3}} \approx 2.5865189$. Из рис. 2 а видно, что в промежутках $[-\kappa_{\text{cr}}, 0]$ и $[0, \kappa_{\text{cr}}]$ нет интервалов, где $D_2(\kappa) > 0$, поэтому

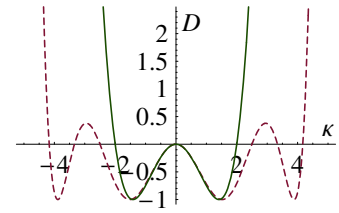


Рис. 1. Дискриминанты $D = D(\kappa)$ для случая схемы Верле (сплошная линия) и оптимальной двухстадийной схемы (штриховая линия)

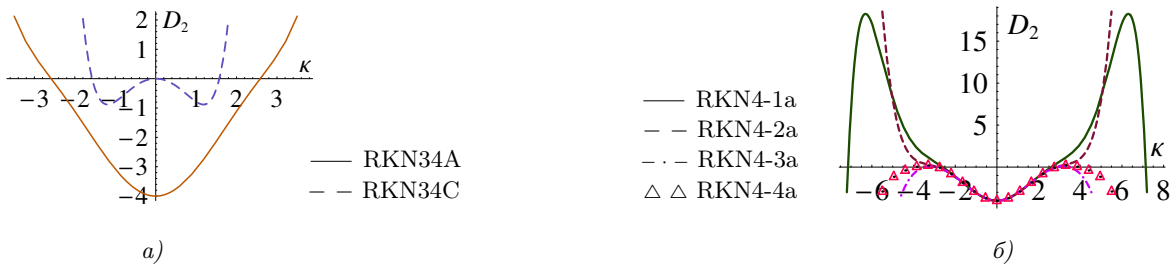


Рис. 2. Графики кривых $D_2 = D_2(\kappa)$: а) для схем RKN34A и RKN34C; б) для схем RKN4-1a, RKN4-2a, RKN4-3a, RKN4-4a

область устойчивости схемы RKN34A имеет вид $0 < |\kappa| \leq \kappa_{\text{cr}}$. Аналогичные вычисления для схемы RKN34B дают такое же условие устойчивости.

Схема RKN34C определяется параметрами (18). В этом случае уравнение для определения κ_{cr} имеет следующий вид: $(1/144)\kappa^2((6+5\sqrt[3]{2}+4\cdot 2^{2/3})\kappa^4+12\kappa^2-144) = 0$. Это уравнение имеет четыре вещественных корня и два комплексно-сопряженных корня. Вещественные корни: $\kappa = 0$ (корень кратности 2) и $\kappa = \pm\kappa_{\text{cr}}$, где $\kappa_{\text{cr}} = \sqrt{6(2-2^{2/3})} \approx 1.573401947435$. Как видно из рис. 2 а, в промежутках $[-\kappa_{\text{cr}}, 0]$ и $[0, \kappa_{\text{cr}}]$ нет интервалов, где $|\text{Tr}(G)| - 2 > 0$, поэтому область устойчивости схемы RKN34C имеет вид $0 < |\kappa| \leq \kappa_{\text{cr}}$. Схема RKN34A имеет больший запас устойчивости, чем схема RKN34C, поэтому схема RKN34A более предпочтительна для применения при решении задач молекулярной динамики.

4.4. Четырехстадийная RKN-схема. Ввиду громоздкости формул для элементов матрицы G не будем приводить их здесь и сразу приведем выражение для следа матрицы G : $\text{Tr}(G) = -2 + \kappa^2 - \kappa^4/12 + Z_6\kappa^6 + Z_8\kappa^8$, где

$$\begin{aligned} Z_6 &= (\alpha_1 - \alpha_3)(1 + \alpha_1 - \alpha_4)(\alpha_3 - \alpha_4)(\gamma_1 + \gamma_2)\gamma_3\gamma_4 + \\ &\quad + (\alpha_1 - \alpha_2)\gamma_2\{\alpha_4(-1 - \alpha_1 + \alpha_4)(\gamma_1 - \gamma_3)\gamma_4 - (1 + \alpha_1)\alpha_3\gamma_3(\gamma_1 + \gamma_4) + \alpha_3^2\gamma_3(\gamma_1 + \gamma_4) + \\ &\quad + \alpha_2[(\alpha_4 - \alpha_3)\gamma_3\gamma_4 + \gamma_1(\gamma_3 + \alpha_1\gamma_3 - \alpha_3\gamma_3 + \gamma_4 + \alpha_1\gamma_4 - \alpha_4\gamma_4)]\}, \\ Z_8 &= (\alpha_1 - \alpha_2)(\alpha_2 - \alpha_3)(1 + \alpha_1 - \alpha_4)(\alpha_3 - \alpha_4)\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4. \end{aligned}$$

В общем случае, когда $\text{Det } V \neq 0$ (табл. 1), были найдены RKN4-схемы, обладающие намного меньшим ведущим членом погрешности, чем схемы, получаемые в частных случаях обращения в ноль определителя Вандермонда. Мы нашли значения κ_{cr} для всех схем, перечисленных в табл. 1. Соответствующие графики величины $D_2 = D_2(\kappa) = \text{Tr}(G(\kappa)) - 2$ приведены на рис. 2 б. Из этого рисунка следует, что для всех четырех схем область устойчивости описывается неравенствами $0 < |\kappa| \leq \kappa_{\text{cr}}$. Ведущий член погрешности каждой из четырех схем табл. 1 почти в три раза меньше, чем в случае схем, получаемых в частных случаях обращения в ноль определителя Вандермонда. Поэтому схемы, представленные в табл. 1, предпочтительны при решении прикладных задач.

4.5. Пятистадийная RKN-схема. В рассматриваемом случае след $\text{Tr}(G) = -2 + \kappa^2 - \kappa^4/12 + 0.002777777778\kappa^6 + Z_8\kappa^8 + Z_{10}\kappa^{10}$. Выражения для Z_8, Z_{10} здесь не приводим ввиду их громоздкости. В [16] даны таблицы значений параметров α_j, γ_j ($j = 1, \dots, 5$) для четырех методов, которые назовем RKN5-1, RKN5-2, RKN5-3, RKN5-4. Ниже приведен вид уравнений $D_2(\kappa) = 0$ и соответствующие условия устойчивости, которые мы получили для каждого из четырех методов. При этом учитывалось поведение кривых $D_2(\kappa) = |\text{Tr}(G(\kappa))| - 2$ при $\text{Tr}(G) > 0$ (рис. 3).

RKN5-1, RKN5-3, $\text{Tr}(G) > 0$:

$$-4 + \kappa^2 - \kappa^4/12 + 0.002777777778\kappa^6 + 0.019206667644\kappa^8 + 0.001488249575\kappa^{10} = 0,$$

область устойчивости: $0 < |\kappa| \leq 1.709678742327$.

RKN5-2, RKN5-4, $\text{Tr}(G) > 0$:

$$-4 + \kappa^2 - \kappa^4/12 + 0.002777777778\kappa^6 + 0.009374405183\kappa^8 + 0.000595080910\kappa^{10} = 0,$$

область устойчивости: $0 < |\kappa| \leq 1.836026193724$.

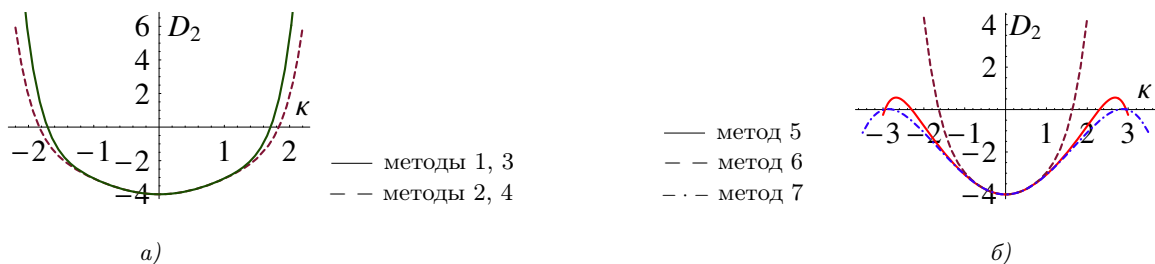


Рис. 3. Графики кривых $D = D(\kappa)$ для схем RKN5, рассмотренных в [16]: а) для методов 1–4; б) для методов 5–7

При $\text{Tr}(G) < 0$ корни уравнения $-\text{Tr}(G) - 2 = 0$ группируются одинаково для всех четырех методов: имеется корень $\kappa = 0$ кратности 2, четыре чисто мнимых корня и две пары комплексно-сопряженных корней.

Из проведенного рассмотрения следует вывод, что методы RKN5-2 и RKN5-4 обладают несколько большей областью устойчивости, чем методы RKN5-1 и RKN5-3. Кроме того, как было показано в п. 3.5, взвешенное среднеквадратичное значение полиномов $1, P_{61}, \dots, P_{66}$ в случае методов RKN5-2 и RKN5-4 меньше, чем в случае методов RKN5-1 и RKN5-3. Поэтому методы RKN5-2 и RKN5-4 предпочтительнее для их использования при решении задач молекулярной динамики, чем методы RKN5-1 и RKN5-3.

Для методов 5, 6, 7 (табл. 2) уравнения $D_2(\kappa) = |\text{Tr}(G(\kappa))| - 2 = 0$ имеют следующий вид при $\text{Tr}(G) > 0$:

Метод 5:

$$-4 + \kappa^2 - \kappa^4/12 + 0.014070112667\kappa^6 - 0.001296648123\kappa^8 + 4.263921514569 \cdot 10^{-6}\kappa^{10} = 0,$$

область устойчивости: $0 < |\kappa| \leq 2.296717145585$.

Метод 6:

$$-4 + \kappa^2 - \kappa^4/12 + 0.120356465194\kappa^6 - 0.007649609920\kappa^8 + 0.000075698663\kappa^{10} = 0,$$

область устойчивости: $0 < |\kappa| \leq 1.637899789244$.

Метод 7:

$$-4 + \kappa^2 - \kappa^4/12 + 0.005858440103\kappa^6 - 0.000521738767\kappa^8 + 0.000015008970\kappa^{10} = 0,$$

область устойчивости: $0 < |\kappa| \leq 2.760588329702$.

Согласно табл. 2, метод 5 является наилучшим с точки зрения малости ведущего члена погрешности; кроме того, этот метод имеет значение κ_{cr} , которое в 1.25 раза больше, чем в случае методов 2 и 4 из [16].

4.6. Сравнение эффективности рассмотренных RKN-схем. Основная вычислительная трудоемкость RKN-схем связана с вычислением функции $f(x)$, входящей в (4). Для вычисления значений x^{n+1}, p^{n+1} с помощью K -стадийной RKN-схемы необходимо вычислить K значений функции $f(x)$. На первый взгляд, требуемое машинное время должно возрастать линейно с ростом числа стадий. Но здесь необходимо также учитывать и величину критического числа Куранта κ_{cr} , которая различна для различных RKN-схем. В случае применения обычных (несимплектических) схем Рунге–Кутты для численного решения задач аэродинамики в [18, 19] было показано, что с увеличением числа стадий явной схемы Рунге–Кутты значение критического числа Куранта увеличивается. Поэтому можно проводить устойчивые расчеты с большими значениями числа Куранта, чем в случае схем Рунге–Кутты с малым числом стадий. Это в итоге может привести к уменьшению машинного времени, требуемого для решения задачи. В этой связи в работе [18] была впервые введена количественная характеристика эффективности схем Рунге–Кутты, которая будет обозначаться через ef : $ef = \kappa_{\text{cr}}/K$. В работах [18, 19] были приведены значения параметра эффективности ef для ряда явных схем Рунге–Кутты, которые и в настоящее время широко применяются в аэродинамических расчетах.

Таблица 5

Показатель эффективности ef для ряда RKN-схем

RKN-схема	K	κ_{cr}	ef
Верле	1	2	2
$\alpha_1 = 0.17922, \alpha_2 = 0.82078$	2	4.17064	2.08532
схема RKN34A	3	2.58652	0.86217
схема RKN34C	3	1.57340	0.52447
схема RKN4-1a	4	2.60111	0.65028
схема RKN5, методы 1, 3	5	1.70968	0.34193
схема RKN5, методы 2, 4	5	1.83603	0.36721
схема RKN5, метод 5	5	2.29672	0.45934

Величину ef можно также подсчитать и для каждой из рассмотренных выше RKN-схем. Результаты этих вычислений приводятся в табл. 5. В частности, у схемы RKN34A величина ef больше в 1.56 раза, чем у схемы RKN34C.

Из табл. 5 видно, что с увеличением числа стадий K величина ef уменьшается. В этом состоит существенное отличие явных симплектических RKN-схем от явных несимплектических схем Рунге–Кутты.

5. Задача Кеплера. Задача о движении системы, состоящей из двух взаимодействующих частиц (задача двух тел, задача Кеплера), допускает полное аналитическое решение в общем виде [3]. Потенциальная энергия U взаимодействия двух частиц зависит лишь от расстояния между ними, т.е. от абсолют-

ной величины разности их радиус-векторов. Рассмотрим частный случай, когда обе частицы движутся в плоскости (x, y) . Гамильтониан такой системы имеет следующий вид:

$$H = |\mathbf{p}_1|^2/(2m_1) + |\mathbf{p}_2|^2/(2m_2) + U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|),$$

где $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ — векторы импульсов первой и второй частицы, $\mathbf{p}_j = (m_j u_j, m_j v_j)$, $\mathbf{r}_j = (x_j, y_j)$, $j = 1, 2$, m_j — масса j -ой частицы, u_j, v_j — составляющие вектора скорости j -ой частицы вдоль осей x, y соответственно; $|\mathbf{p}_j|^2/(2m_j) = m_j(u_j^2 + v_j^2)/2$ — кинетическая энергия j -ой частицы. Потенциальная энергия задается в виде

$$U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = -\tilde{G}m_1m_2/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|,$$

где \tilde{G} — гравитационная постоянная.

Ниже рассмотрим частный случай, когда $m_1 = m_2 = 1$, $\tilde{G} = 1$. Введем обозначения $\mathbf{p}_j = (p_{jx}, p_{jy})$, $j = 1, 2$. Тогда решение рассматриваемой задачи сводится к решению следующей системы обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{dp_{1x}}{dt} &= -\frac{(x_1 - x_2)}{r^3}, & \frac{dx_1}{dt} &= p_{1x}, & \frac{dp_{1y}}{dt} &= -\frac{(y_1 - y_2)}{r^3}, & \frac{dy_1}{dt} &= p_{1y}, \\ \frac{dp_{2x}}{dt} &= \frac{(x_1 - x_2)}{r^3}, & \frac{dx_2}{dt} &= p_{2x}, & \frac{dp_{2y}}{dt} &= \frac{(y_1 - y_2)}{r^3}, & \frac{dy_2}{dt} &= p_{2y}. \end{aligned} \quad (29)$$

Здесь r — расстояние между двумя частицами, $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2}$ и предполагается, что $x_1, y_1, x_2, y_2, p_{1x}, p_{1y}, p_{2x}, p_{2y}$ — функции, зависящие от времени t .

Система (29) решается при следующих начальных условиях, задаваемых при $t = 0$ (рис. 4 а):

$$\begin{aligned} x_1(0) &= a_0, & y_1(0) &= 0, & x_2(0) &= -a_0, & y_2(0) &= 0, \\ p_{1x}(0) &= 0, & p_{1y}(0) &= v_0, & p_{2x}(0) &= 0, & p_{2y}(0) &= -v_0, \end{aligned} \quad (30)$$

где a_0 — заданное положительное число, v_0 — абсолютная величина начального значения скорости каждой частицы в направлении оси y ; значение $v_0 > 0$ является заданной величиной.

Согласно теореме Нетер [3], при $t > 0$ должна сохраняться постоянной полная энергия E системы из двух частиц. С учетом (30) получаем:

$$|E| = |H| = |v_0^2 - 1/(2a_0)|. \quad (31)$$

Как показано в [3], при $E < 0$ движение системы из двух тел является финитным, а при $E > 0$ — инфинитным. Ниже мы рассматриваем случай финитного движения. Для обеспечения финитности постоянные v_0 и a_0 должны удовлетворять неравенству $v_0^2 - 1/(2a_0) < 0$. В этом случае движение каждой частицы при $t > 0$ происходит по своему эллипсу. Введем вектор взаимного расстояния обеих точек $\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$ и поместим начало координат в центре инерции, что приводит к равенству $m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2 = 0$. Из двух последних равенств находим:

$$\mathbf{r}_1 = -\frac{m_2}{m_1 + m_2} \mathbf{r}, \quad \mathbf{r}_2 = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \mathbf{r}. \quad (32)$$



Рис. 4. Траектории частиц: а) начальные векторы скоростей для системы (29); б) результат численного решения всеми RKN-методами при $e = 0$

Величина $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ называется приведенной массой; поскольку в нашем случае $m_1 = m_2 = 1$, то $m = 1/2$. Для того чтобы получить полное решение задачи двух тел, нужно, согласно (32), найти формулу для $\mathbf{r} = (x(t), y(t))$. Эта формула приводится в [3]:

$$x = a(\cos \xi - e), \quad y = a\sqrt{1 - e^2} \sin \xi. \tag{33}$$

Здесь a — большая полуось эллипса, e — эксцентриситет эллиптической орбиты,

$$a = \alpha / (2|E|), \quad e = \sqrt{1 + 2EM^2 / (m\alpha^2)}. \tag{34}$$

Здесь $\alpha = \tilde{G}m_1 m_2 = 1$ в соответствии с выбранными выше значениями величин \tilde{G} , m_1 , m_2 ; M — величина вектора момента, направленного по нормали к плоскости (x, y) . Имеет место закон сохранения момента [3]: $M = \text{const} \forall t \geq 0$. Из начальных условий (30) получаем: $M = 2a_0 v_0$, где $2a_0$ — начальное расстояние между частицами.

Из (32) и (33) следует, что при $e = 0$ частицы движутся по окружностям. Этот факт можно использовать для дополнительной проверки компьютерной программы, реализующей RKN-метод для решения задачи двух тел. Найдем условие на параметры a_0, v_0 , при котором $e = 0$. Подставляя в (34) выражения для E, M, α , получаем:

$$e^2 = 1 + 2EM^2 / (m\alpha^2) = 1 + 4(v_0^2 - 1/(2a_0))4a_0^2 v_0^2 = (4a_0 v_0^2 - 1)^2 = 0. \tag{35}$$

Отсюда следует, что для обеспечения нулевого эксцентриситета достаточно положить $v_0 = 0.5/\sqrt{a_0}$. В частности, при $a_0 = 2$ имеем: $v_0 = 0.5/\sqrt{2} \approx 0.35355$. Далее, эксцентриситет $e > 0$, если выполняются следующие неравенства: либо $4a_0 v_0^2 < 1$, либо $\frac{1}{4} < a_0 v_0^2 < \frac{1}{2}$. Неравенство $a_0 v_0^2 < \frac{1}{2}$ обеспечивает финитность движения обеих частиц с учетом (31).

В случае задачи двух тел мы имеем следующий вектор-столбец искомых величин: $\mathbf{X} = (x_1, p_{1x}, y_1, p_{1y}, x_2, p_{2x}, y_2, p_{2y})^T$, где индекс T обозначает операцию транспонирования. Для того чтобы применить K -стадийный RKN-метод для решения рассматриваемой задачи, нужно заменить в (5) вектор-столбец $(x, p)^T$ на \mathbf{X} . В результате приходим к необходимости решения системы из восьми обыкновенных дифференциальных уравнений (29).

С целью верификации разработанной FORTRAN-программы мы провели расчеты задачи двух тел по всем рассмотренным в предыдущих разделах RKN-схемам с числами стадий $K = 1, 2, 3, 4, 5$ для случаев нулевого и ненулевого эксцентриситета e в (34). Численное решение для координат обеих частиц, полученное при $e = 0$ по всем рассмотренным RKN-методам после выполнения 7140 временных шагов с постоянным шагом $h = 0.005$, представлено на рис. 4 б. Координаты частиц запоминались через каждые 80 шагов по t . Видно, что обе частицы движутся по одной и той же круглой орбите. Используя формулу (15,8) из [3], нетрудно найти период времени T , необходимый для того, чтобы частица совершила полный оборот по круговой орбите в случае нулевого эксцентриситета: $T = \pi\sqrt{a}$, где a — радиус круга, по которому движется каждая частица; в нашем случае $a = 2$. Отсюда легко найти, что за время $t = 35.7$ каждая из двух частиц совершила по 8 полных оборотов по кругу.

В табл. 6 представлены результаты расчетов задачи движения двух частиц по круглой орбите по всем пяти RKN-схемам, рассмотренным в предыдущих разделах. Величины δE_{mean} и $|\delta E|_{\text{mean}}$ вычислялись как средние арифметические значения величин δE^n и $|\delta E^n|$, где $\delta E^n = (E^n - E_0)/E_0$, $E^n = (1/2)[(p_{1x}^n)^2 + (p_{1y}^n)^2 + (p_{2x}^n)^2 + (p_{2y}^n)^2] - 1/r^n$, $E_0 = v_0^2 - 1/(2a_0)$ согласно (31), $r^n = [(x_1^n - x_2^n)^2 + (y_1^n - y_2^n)^2]^{1/2}$. Кроме того, $\delta r_{m, \text{max}}$ — максимальное относительное отклонение величины радиус-вектора r^n m -й частицы ($m = 1, 2$)

Таблица 6

Погрешности δE_{mean} , $|\delta E|_{\text{mean}}$ и $\delta r_{m, \text{max}}$ при $e = 0$ для различных RKN-методов

K	RKN-схема	Погрешность схемы	δE_{mean}	$ \delta E _{\text{mean}}$	$\delta r_{1, \text{max}}$
1	Верле	$O(h^2)$	-1.783E-14	1.783E-14	1.953E-7
2	$\alpha_1 = \alpha_1^{(6)}, \alpha_2 = \alpha_2^{(6)}$	$O(h^2)$	-7.879E-15	7.889E-15	9.605E-8
3	RKN34A	$O(h^4)$	-3.918E-15	4.048E-15	5.684E-14
4	RKN4-1a	$O(h^4)$	1.703E-15	3.663E-15	6.706E-14
5	RKN5-2	$O(h^5)$	-5.876E-15	5.957E-15	1.510E-14

Таблица 7

Погрешности δE_{mean} , $|\delta E|_{\text{mean}}$ и $\delta r_{m,\text{max}}$ при $e = 0$ для методов 4-го порядка точности из табл. 1

RKN-схема	δE_{mean}	$ \delta E _{\text{mean}}$	$\delta r_{1,\text{max}}$
RKN4-1a	1.703E-15	3.663E-15	6.706E-14
RKN4-2a	-3.378E-15	3.462E-15	2.243E-14
RKN4-3a	-4.781E-15	5.126E-15	3.331E-14
RKN4-4a	-2.504E-15	2.609E-15	1.954E-14

Таблица 8

Погрешности δE_{mean} , $|\delta E|_{\text{mean}}$ и $\delta r_{m,\text{max}}$ при $e = 0$ для методов пятого порядка точности из табл. 3

RKN-схема	δE_{mean}	$ \delta E _{\text{mean}}$	$\delta r_{1,\text{max}}$
RKN5-5	-4.270E-15	4.407E-15	6.128E-14
RKN5-6	-5.679E-15	5.785E-15	5.973E-14
RKN5-7	2.598E-15	2.710E-15	2.087E-14

от точного радиуса $a = 2$ круглой орбиты, т.е. $\delta r_{m,\text{max}} = \max_j (\sqrt{x_{mj}^2 + y_{mj}^2} - a)/a$. Оказалось, что по меньшей мере первые 14 цифр десятичной мантиссы чисел $\delta r_{1,\text{max}}$ и $\delta r_{2,\text{max}}$ совпадают. Поэтому в табл. 6 приводится только величина $\delta r_{1,\text{max}}$. С точки зрения практических приложений наиболее важной является точность вычисления координат точек (x_m^n, y_m^n) . Из табл. 6 видно, что наилучшая точность вычисления этих координат достигается при использовании пятистадийной RKN-схемы.

Из сравнения таблиц 6 и 7 видно, что новая схема RKN4-4a обеспечивает меньшие погрешности в энергии δE_{mean} , $|\delta E|_{\text{mean}}$, чем метод RKN4-2. Далее, из сравнения таблиц 6 и 8 видно, что новые RKN-схемы пятого порядка точности обеспечивают меньшие погрешности в энергии δE_{mean} , $|\delta E|_{\text{mean}}$, чем метод 2 из работы [16].

Для того чтобы рассмотреть случай движения каждой частицы по своей эллиптической орбите, положим в (30) $v_0 = 0.2$, $a_0 = 2$. Тогда выполняется неравенство $4a_0v_0^2 < 1$, поэтому эксцентриситет $e \neq 0$ и $E < 0$. Каждая частица совершает один полный оборот по эллиптической орбите за период времени [3] $T = \pi\alpha\sqrt{m/(2|E|^3)}$. Подставляя сюда значения $\alpha = 1$, $m = 1/2$, $E = v_0^2 - 1/(2a_0)$, получаем $T = 16.3227$. Если задать физическое время $t = 164$, то каждая частица совершит 10 полных оборотов по своей эллиптической орбите. Численное решение для координат обеих частиц, полученное по всем рассмотренным RKN-методам на момент времени $t = 164$ после выполнения 82000 временных шагов с шагом $h = 0.002$, представлено на рис. 5. Координаты частиц записывались через каждые 100 шагов по t . Видно, что каждая частица движется по своей эллиптической орбите и положения частиц очень хорошо согласуются с точными эллиптическими орбитами.

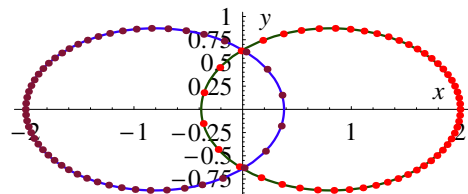


Рис. 5. Эллиптические орбиты частицы 1 (правый эллипс) и частицы 2 (левый эллипс) в интервале $0 < t \leq 164$. Сплошные линии — точные эллипсы, пунктирные — численное решение по RKN-методу

В табл. 9 представлены значения относительных погрешностей δE_{mean} и $|\delta E|_{\text{mean}}$, полученные при численном решении задачи движения двух частиц по эллиптическим орбитам по всем пяти RKN-схемам,

Таблица 9

Погрешности δE_{mean} , $|\delta E|_{\text{mean}}$ и $\delta y_{1,\text{mean}}$ при $v_0 = 0.2$ для различных RKN-методов

K	δE_{mean}	$ \delta E _{\text{mean}}$	$\delta y_{1,\text{mean}}$
1	2.749E-7	2.749E-7	-3.384E-5
2	8.754E-8	8.838E-8	-1.067E-5
3	5.438E-13	6.230E-13	-2.762E-7
4	6.047E-13	5.753E-13	-2.762E-7
5	-5.512E-15	9.388E-15	-2.761E-7

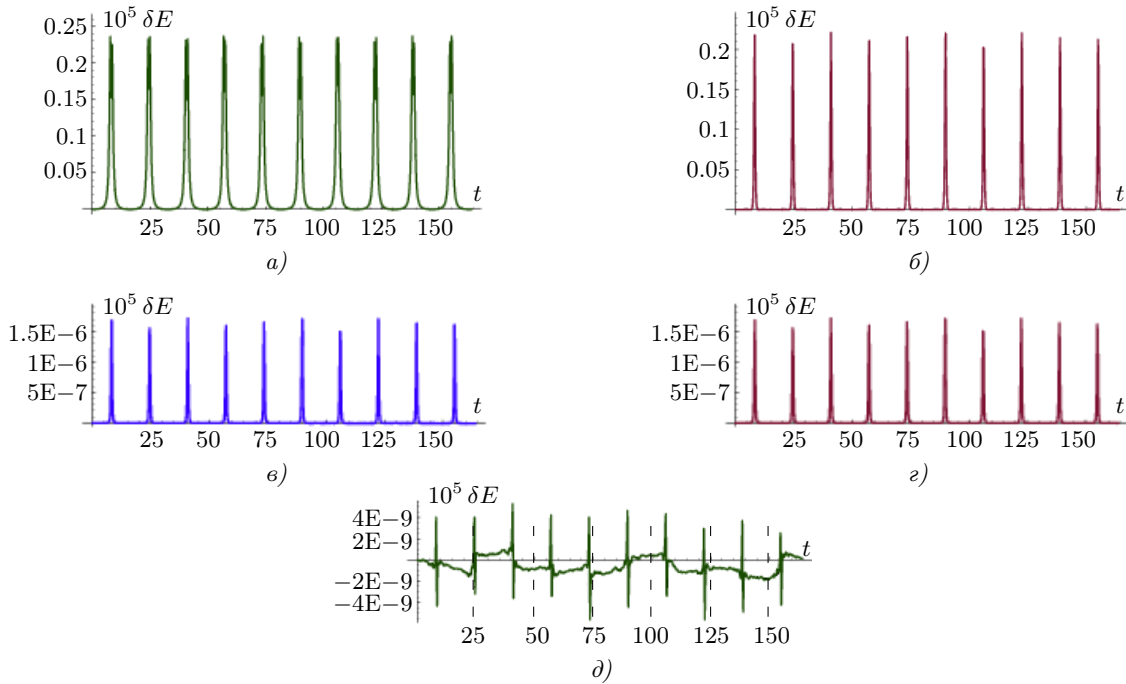


Рис. 6. Задача Кеплера, случай ненулевого эксцентриситета. Величины $10^5 \delta E$ как функции времени при различном числе стадий K RKN-методов: а) $K = 1$, б) $K = 2$, в) $K = 3$, г) $K = 4$, д) $K = 5$

рассмотренным в предыдущих разделах. Отметим, что в случае RKN-схемы пятого порядка точности эти погрешности на два десятичных порядка меньше, чем в случае схемы четвертого порядка точности (рис. 6).

Величина $\delta y_{1, \text{mean}}$ вычислялась как среднее арифметическое значение величин $\delta y_{1j} = y_{1j} - y_{1, \text{ex}}$. Здесь $y_{1, \text{ex}}$ — точное значение координаты y в точке пересечения линии $x = x_{1j}$ с эллипсом первой частицы (см. правый эллипс на рис. 5). При заданном значении x из точного уравнения для координаты $x = -0.5a(\cos \xi - e)$ эллипса первой частицы находится аргумент $\xi_j = \arccos[e - (2x_{1j}/a)]$. После этого точное значение координаты y точки, лежащей на эллипсе, находится по формуле: $y_{1, \text{ex}} = 0.5b \cdot \text{sign}(y_{1j}) \sin \xi_j$. Величина $\delta y_{2, \text{mean}}$ вычисляется аналогично с использованием точных формул для эллипса второй частицы. Оказалось, что имеет место совпадение первых десяти цифр мантисс машинных чисел $\delta y_{1, \text{mean}}$ и $\delta y_{2, \text{mean}}$, но знаки этих чисел противоположны. Например, при $K = 5$ было получено значение $\delta y_{2, \text{mean}} = +2.761e - 7$.

В целом погрешность δy_{1j} намного больше, чем погрешность δE_{mean} . Детальное рассмотрение локальных погрешностей δy_{1j} в случае пятистадийной схемы при каждом значении $x = x_{1j}$ показало, что данная погрешность увеличивается по абсолютной величине до значения порядка 10^{-5} вблизи оси x при $|y_{1j}| < 0.1$, т.е. там, где кривизна эллипса наибольшая. В случае, когда частицы (при $e = 0$) движутся по окружности, такая проблема не возникает, так как кривизна круга постоянна (см. табл. 6).

Как легко видеть на рис. 6, при каждом K количество всплесков равно 10, т.е. равно числу периодов движения каждой частицы по своей эллиптической орбите. Чтобы объяснить это явление, обратимся к рис. 7. На этом рисунке $r = r(t) = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$. Форма кривой, изображенной на этом рисунке, одинаковая для всех рассмотренных RKN-схем. Видно, что кривая $r(t)$ имеет 10 минимумов. В каждой точке минимума радиус кривизны очень мал. Кривизна обратно пропорциональна радиусу кривизны, поэтому ясно, что она максимальна в точках минимума функции $r(t)$. В свою очередь, кривизна пропорциональна второй производной этой функции. Поэтому эта производная максимальна по моду-

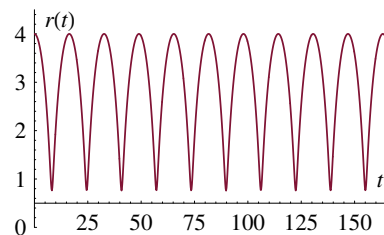


Рис. 7. График кривой $r(t) = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ при ненулевом эксцентриситете e

лю в точках минимума функции $r(t)$. Производные второго и более высоких порядков функций $x(t), y(t)$ входят в ведущие члены погрешностей RKN-методов. Отсюда следует, что погрешность схемы должна увеличиваться в точках минимума функции $r(t)$, что и наблюдается на рис. 6.

Из (35) следует, что эксцентриситет $e = |4a_0v_0^2 - 1|$ растет с уменьшением v_0 . В табл. 10 представлены значения относительных погрешностей δE_{mean} и $|\delta E|_{\text{mean}}$, полученные при $v_0 = 0.15$, $h = 0.005$. Расчеты были проведены до момента времени $T = 500$; было сделано 10^5 шагов по времени. За это время каждая из двух частиц сделала более 34 полных оборотов по эллиптической орбите. Сравнивая таблицы 9 и 10, можно заметить, что относительные погрешности выполнения закона сохранения энергии выросли на два – три десятичных порядка по сравнению со случаем, когда $v_0 = 0.2$. Можно указать следующие причины снижения точности: во-первых, расчеты были выполнены до момента времени $T = 500$, который в три раза больше, чем момент времени $T = 164$. Во-вторых, использовался шаг $h = 0.005$, который в 2.5 раза больше шага, с которым были сделаны расчеты для табл. 9. В-третьих, при $v_0 = 0.15$ малые полуоси эллипсов меньше, чем при $v_0 = 0.2$. Это привело к увеличению кривизны эллипсов в окрестности оси x . Как и в случае табл. 9, RKN-схема пятого порядка точности обеспечивает наилучшую точность по сравнению со схемами более низких порядков точности.

6. Заключение. Рассмотрены явные симплектические разностные схемы Рунге–Кутты–Нистрема (RKN) с числом стадий от 1 до 5 для численного решения задач молекулярной динамики, описываемых системами с распадающимися гамильтонианами. Для числа стадий 2 и 3 параметры RKN-схем получены с помощью техники базисов Гребнера. Для числа стадий 4 и 5 новые схемы найдены с применением метода численной оптимизации Нелдера–Мида. В частности, для числа стадий 4 получены четыре новые схемы. Для числа стадий 5 получены три новые схемы в дополнение к четырем схемам, известным в литературе. Для каждого конкретного числа стадий найдена схема, являющаяся наилучшей с точки зрения минимума ведущего члена погрешности аппроксимации. Получены условия устойчивости для всех рассмотренных схем, включая новые схемы.

Предложено обобщение понятия эффективности ef многостадийной несимплектической схемы Рунге–Кутты на случай многостадийных симплектических RKN-схем. Показано, что с увеличением числа стадий K величина ef уменьшается. В этом состоит существенное отличие симплектических RKN-схем от явных несимплектических схем Рунге–Кутты, широко применяемых в настоящее время в вычислительной гидродинамике.

Путем применения рассмотренных RKN-методов для численного решения задачи Кеплера, имеющей точное решение, установлено, что увеличение числа стадий K приводит к повышению точности выполнения закона сохранения энергии частиц. Это делает RKN-схемы высоких порядков точности предпочтительными в тех случаях, когда требуется решать прикладную задачу в большом временном промежутке.

Рассмотренные RKN-схемы являются явными, что делает особенно удобным распараллеливание счета по этим схемам.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант № 19–01–00292-а) и программы фундаментальных исследований государственных академий наук на 2013–2020 годы (проекты АААА-А17-117030610134-9, АААА-А17-117030610124-0).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Kiselev S.P., Vorozhtsov E.V., Fomin V.M.* Foundations of fluid mechanics with applications: problem solving using Mathematica. Boston: Birkhäuser, 1999.
2. *Годунов С.К., Киселёв С.П., Куликов И.М., Мали В.И.* Моделирование ударно-волновых процессов в упруго-пластических материалах на различных (атомный, мезо и термодинамический) структурных уровнях. Москва–Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2014.
3. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. Т. 1. Механика. М.: Наука, 1973.
4. *Lewis H., Barnes D., Melendes K.* The Liouville theorem and accurate plasma simulation // J. Comput. Phys. 1987. **69**, N 2. 267–282.

Таблица 10

Погрешности δE_{mean} , $|\delta E|_{\text{mean}}$ и $\delta y_{1, \text{mean}}$ при $v_0 = 0.15$ для различных RKN-методов

K	δE_{mean}	$ \delta E _{\text{mean}}$	$\delta y_{1, \text{mean}}$
1	8.361E–6	8.361E–6	–5.053E–3
2	2.954E–6	3.174E–6	–1.581E–3
3	9.686E–10	9.686E–10	–1.630E–7
4	9.686E–10	9.686E–10	–1.630E–7
5	4.157E–12	2.292E–11	+1.023E–6

5. *Ruth R.D.* A canonical integration technique // IEEE Trans. Nucl. Sci. **NS-30**, N 4. 2669–2671, 1983.
6. *Tuckerman M., Berne B.J.* Reversible multiple time scale molecular dynamics // J. Chem. Phys. 1992. **97**, N 3. 1990–2001.
7. *Forest E., Ruth R.D.* Fourth-order symplectic integration // Physica D. 1990. **43**, N 1. 105–117.
8. *Omelyan I.P., Mryglod I.M., Folk R.* Optimized Verlet-like algorithms for molecular dynamics simulations // Phys. Rev. E. **65**. 2002. doi 10.1103/PhysRevE.65.056706.
9. *Nyström E.J.* Über die numerische Integration von Differentialgleichungen. Helsingfors: Acta Soc. Sci. Fenn., 1925.
10. *Verlet L.* Computer “experiments” on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard–Jones molecules // Phys. Rev. 1967. **159**, N 1. 98–103.
11. *Сурис Ю.Б.* О каноничности отображений, порождаемых методами Рунге–Кутты при интегрировании систем $\ddot{x} = -\partial U/\partial x$ // ЖВМ и МФ. 1989. **29**, № 2. 202–211.
12. *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 // ЖВМ и МФ. 2016. **56**, № 4. 551–571.
13. *Хайпер Э., Нёрсетт С., Ваннер Г.* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. М.: Мир, 1990.
14. *Adams A.L., Loustauau P.* An introduction to Gröbner bases. Graduate studies in mathematics. Vol. 3. Providence: Amer. Math. Soc., 1996.
15. *Nelder J.A., Mead R.* A simplex method for function minimization // Computer J. 1965. **7**, N 4. 308–313.
16. *Okunbor D.I., Skeel R.D.* Canonical Runge–Kutta–Nyström methods of orders five and six // J. Comput. Appl. Math. 1994. **51**, N 3. 375–382.
17. *Okunbor D.I., Skeel R.D.* Explicit canonical methods for Hamiltonian systems // Math. Comput. 1992. **59**, № 200. 439–455.
18. *Schmidt W., Jameson A.* Euler solvers as an analysis tool for aircraft aerodynamics // Advances in Computational Transonics. Swansea: Pineridge Press, 1985. 371–404.
19. *Ganzha V.G., Vorozhtsov E.V.* Computer-aided analysis of difference schemes for partial differential equations. New York: Wiley, 2012.

Поступила в редакцию
16 февраля 2021

EXPLICIT HIGHER-ORDER SCHEMES FOR MOLECULAR DYNAMICS PROBLEMS

E. V. Vorozhtsov¹ and S. P. Kiselev²

¹ *Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences; Institutskaya ulitsa 4/1, Novosibirsk, 630090, Russia; Dr. Sci., Professor, Leading Scientist, e-mail: vevg@mail.ru*

² *Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences; Institutskaya ulitsa 4/1, Novosibirsk, 630090, Russia; Dr. Sci., Professor, Leading Scientist, e-mail: kiselev@itam.nsc.ru*

Received February 16, 2021

Abstract: The Runge–Kutta–Nyström (RKN) explicit symplectic difference schemes are considered with a number of stages from 1 to 5 for the numerical solution of molecular dynamics problems described by systems with separable Hamiltonians. For the numbers of stages 2 and 3, the parameters of the RKN schemes are obtained using the Gröbner basis technique. For the number of stages 4 and 5, new schemes were found using the Nelder–Mead numerical optimization method. In particular, four new schemes are obtained for the number of stages 4. For the number of stages 5, three new schemes are obtained in addition to the four schemes, which are well-known in the literature. For each specific number of stages, a scheme is found being the best in terms of the minimum of the leading term of the approximation error. Verification of the schemes is carried out on a problem that has an exact solution. It is shown that the symplectic five-stage RKN scheme provides a more accurate conservation of the total energy balance of the particle system than schemes of lower orders of accuracy. The stability studies of the schemes were performed using the *Mathematica* software package.

Keywords: molecular dynamics, Hamilton equations, symplectic difference schemes, stability.

References

1. S. P. Kiselev, E. V. Vorozhtsov, and V. M. Fomin, *Foundations of Fluid Mechanics with Applications: Problem Solving Using Mathematica* (Birkhäuser, Boston, 1999).
2. S. K. Godunov, S. P. Kiselev, I. M. Kulikov, and V. I. Mali, *Modeling of Shockwave Processes in Elastic-plastic Materials at Different (Atomic, Meso and Thermodynamic) Structural Levels* (Inst. Komp'yut. Issled., Moscow–Izhevsk, 2014) [in Russian].
3. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Course of Theoretical Physics*, Vol. 1: *Mechanics* (Nauka, Moscow, 1973; Pergamon, Oxford, 1977).
4. H. R. Lewis, D. C. Barnes, and K. J. Melendez, “The Liouville Theorem and Accurate Plasma Simulation,” *J. Comput. Phys.* **69** (2), 267–282 (1987).
5. R. D. Ruth, “A Canonical Integration Technique,” *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **NS-30** (4), 2669–2671 (1983).
6. M. Tuckerman and B. J. Berne, “Reversible Multiple Time Scale Molecular Dynamics,” *J. Chem. Phys.* **97** (3), 1990–2001 (1992).
7. E. Forest and R. D. Ruth, “Fourth-Order Symplectic Integration,” *Physica D* **43** (1), 105–117 (1990).
8. I. P. Omelyan, I. M. Mryglod, and R. Folk, “Optimized Verlet-like Algorithms for Molecular Dynamics Simulations,” *Phys. Rev. E* **65** (2002). doi 10.1103/PhysRevE.65.056706
9. E. J. Nyström, *Über die numerische Integration von Differentialgleichungen* (Acta Soc. Sci. Fenn., Helsingfors, 1925) [in German].
10. L. Verlet, “Computer ‘Experiments’ on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard–Jones Molecules,” *Phys. Rev.* **159** (1), 98–103 (1967).
11. Yu. B. Suris, “The Canonicity of Mappings Generated by Runge–Kutta Type Methods when Integrating the Systems $\ddot{x} = -\partial U/\partial x$,” *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.* **29** (2), 202–211 (1989) [*USSR Comput. Math. Math. Phys.* **29** (1), 138–144 (1989)].
12. V. N. Sofronov and V. E. Shemarulin, “Classification of Explicit Three-Stage Symplectic Difference Schemes for the Numerical Solution of Natural Hamiltonian Systems: A Comparative Study of the Accuracy of High-Order Schemes on Molecular Dynamics Problems,” *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.* **56** (4), 551–571 (2016) [*Comput. Math. Math. Phys.* **56** (4), 541–560 (2016)].
13. E. Hairer, S. P. Nørsett, and G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems* (Springer, Berlin, 1993; Mir, Moscow, 1990).
14. W. W. Adams and P. Loustaunau, *An Introduction to Gröbner Bases. Graduate Studies in Mathematics. Vol. 3.* (Amer. Math. Soc., Providence, 1996).
15. J. A. Nelder and R. Mead, “A Simplex Method for Function Minimization,” *Computer J.* **7** (4), 308–313 (1965).
16. D. I. Okunbor and R. D. Skeel, “Canonical Runge–Kutta–Nyström Methods of Orders Five and Six,” *J. Comput. Appl. Math.* **51** (3), 375–382 (1994).
17. D. Okunbor and R. D. Skeel, “Explicit Canonical Methods for Hamiltonian Systems,” *Math. Comput.* **59** (200), 439–455 (1992).
18. W. Schmidt and A. Jameson, “Euler Solvers as an Analysis Tool for Aircraft Aerodynamics,” in *Advances in Computational Transonics* (Pineridge Press, Swansea, 1985), pp. 371–404.
19. V. G. Ganzha and E. V. Vorozhtsov, *Computer-Aided Analysis of Difference Schemes for Partial Differential Equations* (Wiley, New York, 2012).