

НОВЫЕ СИМПЛЕКТИЧЕСКИЕ ПЯТИСТАДИЙНЫЕ СХЕМЫ ДЛЯ ЗАДАЧ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Е.В. Ворожцов

д.ф.-м.н., профессор, ведущий научный сотрудник, e-mail: vorozh@itam.nsc.ru

Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича
Сибирское отделение РАН, Новосибирск, Россия

Аннотация. Рассматривается семейство Фореста – Рута симплектических пятистадийных схем типа Рунге – Кутты для численного решения задач молекулярной динамики, описываемых системами с распадающимся гамильтонианом. Предложен двухшаговый оптимизационный метод нахождения симплектических схем высокого порядка точности. По сути дела, предложен метод повышения точности симплектических разностных схем с фиксированным числом стадий за счёт получения вещественных схем с наименьшей нормой ведущего члена погрешности аппроксимации разностной схемы. Найдены 146 новых пятистадийных схем четвёртого порядка точности с помощью численной оптимизации. Проведено сравнение условий устойчивости схем Фореста – Рута с числом стадий 3, 4 и 5. Точность новых схем продемонстрирована на примере численного решения задачи Кеплера двух тел. Показано, что новые пятистадийные схемы обеспечивают более высокую точность сохранения энергии частиц, чем лучшие известные четырёхстадийные схемы четвёртого порядка точности и известная схема Верле второго порядка точности.

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

Введение

В настоящее время явные симплектические интеграторы, разработанные в рамках молекулярной динамики, получили широкое распространение при численном моделировании разнообразных явлений и процессов в таких областях естественных наук, как физика плазмы [1], небесная механика [2], биология [3], медицина [4], механика твёрдого тела [5].

Уравнения молекулярной динамики – обыкновенные дифференциальные уравнения Гамильтона, описывающие взаимодействие материальных частиц. Количество N этих уравнений пропорционально количеству частиц, присутствующих в решаемой задаче. Значения N могут достигать величин порядка $\mathcal{O}(10^4)$ – $\mathcal{O}(10^6)$. Преимущество явных схем – простота их программной реализации. Но, с другой стороны, эти схемы накладывают существенные ограничения на временной шаг из требования устойчивости. Даже если счёт происходит устойчиво, может развиваться во времени явление дрейфа полной энергии системы частиц [6, 7]. Суть этого

явления, возникающего при использовании приближенных симплектических интеграторов, состоит в постепенном изменении величины полной энергии в замкнутой системе с течением времени несмотря на то, что теоретически энергия должна быть константой движения и не должна изменяться [8]. В этих случаях приходится делать пробные расчёты задачи с уменьшающимися временными шагами h .

В данной статье рассматриваются методы расщепления типа Рунге – Кутты (РРК). В этих методах ищется решение гамильтоновых уравнений в фазовом пространстве (координаты – импульсы частиц). Эволюция системы частиц в фазовом пространстве может рассматриваться как однопараметрическая группа преобразований, которая даётся эволюционным оператором (пропагатором) [5]. В работе [9] были предложены РРК-схемы второго и третьего порядков точности.

Симплектический четырёхстадийный РРК-интегратор четвёртого порядка точности был впервые предложен в [10], где была получена одна вещественная РРК-схема. Та же схема была вскоре найдена независимо Форестом [11] и Нери [12]. Первые журнальные статьи, описывающие интегратор четвёртого порядка точности, это работы [10, 13], в которых были найдены в аналитическом виде две вещественные РРК-схемы четвёртого порядка точности без использования базисов Грёбнера. Одна из этих схем совпадает со схемой, найденной ранее в [11, 12].

В работах [14–18] имеется подробный обзор методов построения симплектических схем для решения уравнений гамильтоновой механики, в которых гамильтониан взаимодействующих частиц распадается на сумму кинетической и потенциальной энергии. Показано, что задача построения симплектических схем заданного порядка точности с фиксированным количеством стадий сводится к задаче нахождения корней системы полиномиальных уравнений, возникающих из требования обращения в ноль выражений для коэффициентов погрешности аппроксимации схемы. Оказалось, что использование техники базисов Грёбнера [19–21], реализованной в пакете программ *Mathematica* [22], позволяет находить корни больших систем полиномиальных уравнений. В [16, 18] было найдено в семействе четырехстадийных схем Фореста–Рута [13] 97 новых четырёхстадийных схем четвёртого порядка точности с помощью параметрических базисов Грёбнера и результатов Сильвестра. В K -стадийных схемах Фореста – Рута (FR) ($K > 1$) на каждой стадии выполняются однотипные арифметические операции, и их количество одинаково на каждой стадии. Поэтому ясно, что машинное время, потребное для вычислений на всех K стадиях FR-метода, пропорционально числу стадий K . Тем не менее, использование РРК-схем с увеличенным числом стадий может давать значительную экономию машинного времени компьютера за счёт увеличения временного шага без потери точности численного решения благодаря высокому порядку точности метода.

В [15, 17, 23] было проведено сравнение точности явных симплектических схем порядков точности от 2 до 5 на примере задачи Кеплера двух тел, имеющей аналитическое решение. В качестве схемы второго порядка точности использовалась для сравнения известная схема Верле [24]. Было показано, что схемы, имеющие более высокие порядки точности, чем схема Верле, обеспечивают намного меньшие относительные ошибки в полной энергии, чем схема Верле. Например, в случае схем четвёртого и пятого порядков точности эти ошибки на шесть–семь десятичных

порядков точности меньше, чем в случае схемы Верле.

1. Семейство симплектических схем Фореста – Рута

В молекулярной динамике расчёт движения N частиц ($N \geq 1$) осуществляется путем решения уравнений Гамильтона [8]:

$$\frac{dx_{\alpha l}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_{\alpha l}}, \quad \frac{dp_{\alpha l}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_{\alpha l}}, \quad H(x_{\alpha l}, p_{\alpha l}) = \mathcal{K}(p_{\alpha l}) + V(x_{\alpha l}), \quad \mathcal{K}(p_{\alpha l}) = \sum_{l=1}^N \sum_{\alpha=1}^{N_d} \frac{p_{\alpha l}^2}{2m_l}, \quad (1)$$

где t – время, l – номер частицы, N_d – размерность евклидова пространства точек (x_1, \dots, x_{N_d}) , $1 \leq N_d \leq 3$. Например, $N = 1$ и $N_d = 1$ в задаче о гармоническом осцилляторе, т. е. единственная частица может двигаться или осциллировать только вдоль оси x_1 [25,26]. Задача двух тел (задача Кеплера) [8] – пример двух частиц (тел), которые перемещаются в одной и той же плоскости, т. е. $N = 2$, $N_d = 2$. Величина $\mathcal{K}(p_{\alpha l})$ в (1) – кинетическая энергия, где $p_{\alpha l}$ – количество движения вдоль оси x_{α} , m_l – масса l -й частицы; $V(x_{\alpha l})$ – потенциальная энергия взаимодействия частиц, $H(x_{\alpha l}, p_{\alpha l})$ – гамильтониан системы частиц. Решение системы уравнений (1) при заданных начальных условиях $x_{\alpha l}(t = 0) = x_{\alpha l}^0$, $p_{\alpha l}(t = 0) = p_{\alpha l}^0$ представляет собой каноническое преобразование от начального состояния к конечному состоянию

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

Решение (2) уравнений Гамильтона (1) сохраняет фазовый объём (теорема Лиувилля [8]), условие сохранения этого объёма имеет следующий вид [8]:

$$|G| = \left| \frac{\partial(x_{\alpha l}, p_{l\alpha})}{\partial(x_{\alpha l}^0, p_{\alpha l}^0)} \right| = 1, \quad (3)$$

где G – якобиан.

Для удобства дальнейшего изложения перепишем уравнения Гамильтона (1) для одной частицы в виде:

$$dx/dt = p/m, \quad dp/dt = f(x), \quad H = p^2/(2m) + V(x), \quad (4)$$

где $f(x)$ – сила, действующая на частицу, $f(x) = -\partial H(x)/\partial x$.

Предположим, что значения x^n и p^n известны на n -ом временном слое, $n = 0, 1, 2, \dots$. Мы хотим найти решение системы (4) на $(n + 1)$ -м временном слое $t^{n+1} = t^n + h$, где h – временной шаг. С этой целью разобьём переход с t^n к t^{n+1} на K стадий, $K \geq 1$. В семействе схем Фореста – Рута этот переход выполняется следующим образом [9, 13]:

$$p^{(i)} = p^{(i-1)} + c_i h f(x^{(i-1)}), \quad x^{(i)} = x^{(i-1)} + d_i \frac{h}{m} p^{(i)}, \quad i = 1, \dots, K. \quad (5)$$

Легко показать, что условие $|G| = \left| \frac{\partial(p^{(i)}, x^{(i)})}{\partial(p^{(i-1)}, x^{(i-1)})} \right| = 1$ выполняется для любого $i \geq 1$. Действительно,

$$\left| \frac{\partial(p^{(i)}, x^{(i)})}{\partial(p^{(i-1)}, x^{(i-1)})} \right| = \left| \begin{array}{cc} \frac{\partial p^{(i)}}{\partial p^{(i-1)}} & \frac{\partial p^{(i)}}{\partial x^{(i-1)}} \\ \frac{\partial x^{(i)}}{\partial p^{(i-1)}} & \frac{\partial x^{(i)}}{\partial x^{(i-1)}} \end{array} \right| = \left| \begin{array}{cc} 1 & c_i h f'(x^{(i-1)}) \\ 0 & 1 \end{array} \right| = 1.$$

Если уже выполнено n шагов по t ($n > 1$), то, согласно (3), должно выполняться равенство $\left| \frac{\partial(p^{(n)}, x^{(n)})}{\partial(p^{(0)}, x^{(0)})} \right| = 1$. Для доказательства этого равенства воспользуемся формулой

$$\left| \frac{\partial(p^{(n)}, x^{(n)})}{\partial(p^{(0)}, x^{(0)})} \right| = \left| \frac{\partial(p^{(n)}, x^{(n)})}{\partial(p^{(n-1)}, x^{(n-1)})} \right| \times \left| \frac{\partial(p^{(n-1)}, x^{(n-1)})}{\partial(p^{(n-2)}, x^{(n-2)})} \right| \times \cdots \times \left| \frac{\partial(p^{(1)}, x^{(1)})}{\partial(p^{(0)}, x^{(0)})} \right| = 1.$$

Уравнения (5) определяют класс явных симплектических схем, точность которых определяется числом стадий K и коэффициентами c_i, d_i .

Ранее в работах [16, 18] было исследовано семейство (5) при $K = 4$ и были получены 97 новых схем. Ниже мы применяем ту же методологию, что и в [18], для поиска, главным образом, схем четвёртого порядка точности в семействе трёхстадийных схем (5). Рассмотрим схему (5) с $K \geq 1$. Пусть значение количества движения p^n известно. Решение в следующем узле $t^{n+1} = t^n + h$ 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 метода и от $2K$ постоянных $c_i, d_i, i = 1, \dots, K$. С другой стороны, легко получить «точную» формулу для приращения Δp , используя разложение величины p^n в отрезок ряда 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 – целое число, задаваемое пользователем, $N_T \geq K + 1$. Если разность $\delta p_n = \Delta p_n - \Delta p_{h,n}$ удовлетворяет соотношению $\delta p_n/h = \mathcal{O}(h^\lambda)$, где $\lambda > 0$, то схема имеет порядок точности $\mathcal{O}(h^\lambda)$ [25].

В случае интегратора Фореста – Рута (5) нужно разложить $f(x^{(i-1)})$ в ряд Тейлора по степеням временного шага h относительно момента времени t^n . При переходе от вычисления $p^{(i-1)}$ к вычислению $p^{(i)}$ происходит нелинейный рост длин возникающих символьных выражений. Например, выражение для $p^{(2)}$ уже содержит степени h^k с $k = 1, \dots, 11$. В результате происходит нехватка памяти, и компьютер прекращает дальнейшие символьные вычисления с распечаткой соответствующего диагностического сообщения. Это явление называется «разбухание промежуточных выражений» в компьютерной алгебре. Мы успешно реализовали следующие два мероприятия во избежание этого явления: во-первых, мы вводили на каждой стадии новые имена для всех величин, не содержащих шаг h ; во-вторых, мы полагали все степени $h^k = 0$ для $k > 6$ в случаях, когда $K \leq 5$ в (5).

2. Пятистадийные схемы Фореста – Рута

Из формул семейства Фореста – Рута следует, что на каждой стадии выполняются однотипные арифметические операции. Это означает, что на каждом временном шаге пятистадийная FR-схема будет требовать расход машинного времени, который на 25 % больше, чем в случае четырёхстадийной схемы. Авторы работ [27] и [28] полагают, что за счёт минимизации ведущего члена погрешности аппроксимации схемы можно заметно повысить точность схемы, и тогда за счёт вычислений с увеличенным временным шагом можно добиться экономии машинного времени. Четырёхстадийная FR-схема содержит восемь параметров c_i, d_i ($i = 1, \dots, 4$). Число параметров в пятистадийной FR-схеме равно 10. Ясно, что увеличение числа параметров создаёт дополнительные возможности для минимизации погрешности схемы

по сравнению со случаем меньшего числа параметров. В [27] поиск оптимальных многостадийных FR-схем осуществлялся с применением техники пропегаторов. При этом упор делался на обрацаемые во времени (симметричные, палиндромные) схемы.

В [28] были построены симметричные шестистадийные схемы четвёртого порядка точности в семействах RKN и FR, а также FR-методы шестого порядка точности с числом стадий от 7 до 15. При этом наиболее эффективным методом оказался FR-метод с 10 стадиями. В работе [29] были найдены с помощью численной оптимизации четыре пятистадийные RKN-схемы пятого порядка точности. В [17] были найдены еще три пятистадийные RKN-схемы пятого порядка точности с помощью функции численной оптимизации NMinimize[...] пакета программ Mathematica.

По аналогии со случаем пятистадийной RKN-схемы нашим первоначальным намерением было найти пятистадийные схемы пятого порядка точности в семействе FR-схем. Однако это нам не удалось. Мы трижды вывели с помощью символьных вычислений в СКА Mathematica выражения для погрешностей $\delta p_{n,5}$ и $\delta x_{n,5}$, и выражения совпали. Кроме того, была сделана проверка правильности этих выражений ещё одним способом. Из формул (5) следует, что коэффициенты c_5 и d_5 появляются только на пятой стадии FR-метода. Отсюда следует, что если положить в выражениях для ошибки пятистадийного метода $c_5 = 0$, $d_5 = 0$, то эти выражения должны совпасть с формулами для ошибок четырёхстадийного метода, которые были представлены в [18]. Это совпадение было получено.

Семейство пятистадийных схем Фореста – Рута получается из разностных уравнений (5) при $K = 5$. Соответствующая погрешность δp_n имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \delta p_n = & hP_1 f(x) + \frac{h^2}{2} P_2 u(t) f'(x) + \frac{h^3}{6} [P_{31} f(x) f'(x)/m + P_{32} u^2 f''(x)] + \\ & + \frac{h^4 u}{24m} \{ P_{41} \cdot [f'(x)]^2 + 3P_{42} f(x) f''(x) + P_{43} m u^2 f^{(3)}(x) \} + \\ & + \frac{h^5}{120m^2} \{ 3P_{51} f^2(x) f''(x) + P_{52} f(x) [f'(x)]^2 + 6P_{53} m u^2 f^{(3)}(x) + \\ & + 5P_{54} m u^2 f'(x) f''(x) + P_{55} m^2 u^4 f^{(4)}(x) \}, \end{aligned}$$

где $u(t)$ – скорость частицы,

$$\begin{aligned} P_1 = 1 - \sum_{j=1}^5 c_j, \quad P_2 = 1 - 2 \sum_{i=2}^K c_i \sum_{j=1}^{i-1} d_j, \\ P_{31} = 1 - 6 \sum_{i=1}^{K-1} d_i \sum_{j=1}^i c_j \sum_{k=i+1}^K c_k, \quad P_{32} = 1 - 3 \sum_{i=2}^K c_i \left(\sum_{j=1}^{i-1} d_j \right)^2, \\ P_{41} = 1 - 24(c_4 c_5 (d_1 + d_2 + d_3) d_4 + c_3 (d_1 + d_2) ((c_4 + c_5) d_3 + c_5 d_4) + \\ + c_2 d_1 (c_3 d_2 + (c_4 + c_5) (d_2 + d_3) + c_5 d_4)), \\ P_{42} = 1 - 8(c_3 (c_4 + c_5) d_3 (d_1 + d_2 + d_3) + c_5 (c_4 (d_1 + d_2 + d_3) + \\ + c_3 (d_1 + d_2 + 2d_3)) d_4 + (c_3 + c_4) c_5 d_4^2 + c_1 (c_2 d_1^2 + c_3 (d_1 + d_2)^2 + \\ + (c_4 + c_5) (d_1 + d_2 + d_3)^2 + 2c_5 (d_1 + d_2 + d_3) d_4 + c_5 d_4^2) + \\ + c_2 (c_3 d_2 (d_1 + d_2) + c_4 (d_2 + d_3) (d_1 + d_2 + d_3) + \\ + c_5 (d_2 + d_3 + d_4) (d_1 + d_2 + d_3 + d_4))), \\ P_{43} = 1 - 4 \sum_{i=2}^K c_i \left(\sum_{j=1}^{i-1} d_j \right)^3, \end{aligned} \tag{6}$$

$$\begin{aligned}
 P_{51} = & 1 - 20c_3^2c_4d_3^2 - 20c_3^2c_5d_3^2 - 40c_3^2c_5d_3d_4 - 40c_3c_4c_5d_3d_4 - 20c_3^2c_5d_4^2 - \\
 & - 40c_3c_4c_5d_4^2 - 20c_4^2c_5d_4^2 - 20c_1^2(c_2d_1^2 + c_3(d_1 + d_2)^2 + (c_4 + c_5)(d_1 + d_2 + d_3)^2 + \\
 & + 2c_5(d_1 + d_2 + d_3)d_4 + c_5d_4^2) - 20c_2^2(c_3d_2^2 + c_4(d_2 + d_3)^2 + c_5(d_2 + d_3 + d_4)^2) - \\
 & - 40c_2(c_4c_5d_4(d_2 + d_3 + d_4) + c_3(c_4d_3(d_2 + d_3) + c_5(d_3 + d_4)(d_2 + d_3 + d_4))) - \\
 & - 40c_1(c_4c_5d_4(d_1 + d_2 + d_3 + d_4) + c_3(c_4d_3(d_1 + d_2 + d_3) + \\
 & + c_5(d_3 + d_4)(d_1 + d_2 + d_3 + d_4)) + c_2(c_3d_2(d_1 + d_2) + \\
 & + c_4(d_2 + d_3)(d_1 + d_2 + d_3) + c_5(d_2 + d_3 + d_4)(d_1 + d_2 + d_3 + d_4))), \\
 P_{52} = & 1 + 120(-c_1c_2(c_3 + c_4 + c_5)d_1d_2 - (c_4 + c_5)(c_1(c_2 + c_3)d_1 + \\
 & + (c_1 + c_2)c_3d_2)d_3 - c_5(c_2(c_3 + c_4)d_2 + (c_2 + c_3)c_4d_3 + c_1(c_2d_1 + \\
 & + (c_3 + c_4)(d_1 + d_2) + c_4d_3))d_4), \tag{7}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 P_{53} = & 1 - 10c_1(c_2d_1^3 + c_3(d_1 + d_2)^3 + (c_4 + c_5)(d_1 + d_2 + d_3)^3 + \\
 & + 3c_5(d_1 + d_2 + d_3)^2d_4 + 3c_5(d_1 + d_2 + d_3)d_4^2 + c_5d_4^3) - \\
 & - 10c_2(c_3d_2(d_1 + d_2)^2 + c_4(d_2 + d_3)(d_1 + d_2 + d_3)^2 + \\
 & + c_5(d_2 + d_3 + d_4)(d_1 + d_2 + d_3 + d_4)^2) - 10(c_4c_5d_4(d_1 + d_2 + d_3 + d_4)^2 + \\
 & + c_3(c_4d_3(d_1 + d_2 + d_3)^2 + c_5(d_3 + d_4)(d_1 + d_2 + d_3 + d_4)^2)),
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 P_{54} = & 1 - 12(c_4c_5(d_1 + d_2 + d_3)d_4(3(d_1 + d_2 + d_3) + 2d_4) + \\
 & + c_3(d_1 + d_2)(c_4d_3(3(d_1 + d_2) + 2d_3) + c_5(d_3 + d_4)(3d_1 + 3d_2 + 2(d_3 + d_4)))) + \\
 & + c_2d_1(c_3d_2(3d_1 + 2d_2) + c_4(d_2 + d_3)(3d_1 + 2(d_2 + d_3)) + \\
 & + c_5(d_2 + d_3 + d_4)(3d_1 + 2(d_2 + d_3 + d_4))), \quad P_{55} = 1 - 5 \sum_{i=2}^K c_i \left(\sum_{j=1}^{i-1} d_j \right)^4.
 \end{aligned}$$

Погрешность δx_n , получаемая при вычислении координаты x^{n+1} по рассматриваемой схеме, имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
 \delta x_n = & hu(t)R_1 + \frac{h^2}{2m}R_2f(x) + \frac{h^3}{6m}R_3u(t)f'(x) + \frac{h^4}{24m^2}[R_{41}f(x)f'(x) + \\
 & + R_{42}mu^2f''(x)] + \frac{h^5u(t)}{120m^2}\{R_{51}[f'(x)]^2 + 3R_{52}f(x)f''(x) + R_{53}mu^2f^{(3)}(x)\}, \tag{8}
 \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
 R_1 &= 1 - \sum_{j=1}^K d_j, \quad R_2 = 1 - 2 \sum_{i=1}^K c_i \sum_{j=i}^K d_j, \quad R_3 = 1 - 6 \sum_{i=2}^K c_i \left[\sum_{j=1}^{i-1} d_j - \left(\sum_{j=1}^{i-1} d_j \right)^2 \right], \\
 R_{41} &= 1 - 24c_3c_4d_3d_4 - 24c_3c_4d_3d_5 - 24c_3c_5d_3d_5 - 24c_3c_5d_4d_5 - 24c_4c_5d_4d_5 - \\
 & - 24c_2(c_5(d_2 + d_3 + d_4)d_5 + c_4(d_2 + d_3)(d_4 + d_5) + c_3d_2(d_3 + d_4 + d_5)) - \\
 & - 24c_1(c_4d_1d_4 + c_4d_2d_4 + c_4d_3d_4 + c_4d_1d_5 + c_5d_1d_5 + c_4d_2d_5 + c_5d_2d_5 + c_4d_3d_5 + \\
 & + c_5d_3d_5 + c_5d_4d_5 + c_3(d_1 + d_2)(d_3 + d_4 + d_5) + c_2d_1(d_2 + d_3 + d_4 + d_5)), \\
 R_{42} &= 1 - 12 \sum_{j=2}^K c_j \left(\sum_{k=1}^{j-1} d_k \right)^2 \left(\sum_{l=j}^K d_l \right). \tag{9}
 \end{aligned}$$

Аналогично случаю четырёхстадийной схемы Рунге – Кутты – Нистрёма [17] нетрудно доказать, что многочлены $R_2, R_3, R_{41}, R_{42}, R_{52}, R_{53}$ выражаются через многочлены $P_1, P_2, P_{31}, P_{32}, P_{42}, P_{43}, P_{53}, P_{55}$ по следующим формулам:

$$\begin{aligned} R_2 &= -P_2 - 2P_1, & R_3 &= 3P_2 - 2P_{32}, & R_{41} &= 4P_{31} - 3P_{42}, \\ R_{42} &= 4P_{32} - 3P_{43}, & R_{52} &= 5P_{42} - 4P_{53}, & R_{53} &= 5P_{43} - 4P_{55}. \end{aligned} \quad (10)$$

Многочлен R_{51} имеет следующий вид:

$$R_{51} = 1 - 120 \left[c_4 c_5 (d_1 + d_2 + d_3) d_4 d_5 + c_2 d_1 \sum_{i=3}^K c_i \left(\sum_{j=2}^{i-1} d_j \right) \left(\sum_{j=i}^K d_j \right) \right].$$

Из формул для погрешностей δp_n и δx_n следует, что для обеспечения четвёртого порядка точности схемы (5) с $K = 5$ необходимо, чтобы десять параметров c_i, d_i , $i = 1, \dots, 5$, удовлетворяли следующей полиномиальной системе:

$$\begin{aligned} P_1 = 0, P_2 = 0, P_{31} = 0, P_{32} = 0, P_{41} = 0, P_{42} = 0, P_{43} = 0, \\ R_1 = 0, R_2 = 0, R_3 = 0, R_{41} = 0, R_{42} = 0. \end{aligned} \quad (11)$$

Количество уравнений в (11) больше, чем количество неизвестных $c_1, c_2, c_3, c_4, c_5, d_1, d_2, d_3, d_4, d_5$. С учётом (10) уравнения $R_2 = 0, R_3 = 0, R_{41} = 0, R_{42} = 0$ в (11) избыточны. Таким образом, нужно решить следующую полиномиальную систему:

$$P_1 = 0, P_2 = 0, P_{31} = 0, P_{32} = 0, P_{41} = 0, P_{42} = 0, P_{43} = 0, R_1 = 0. \quad (12)$$

Количество уравнений в (12) меньше, чем количество неизвестных c_i, d_i , $i = 1, \dots, 5$.

Так как мы ищем схемы четвёртого порядка точности, то в качестве ведущих членов погрешности в формулах (6) и (8) должны рассматриваться члены порядка малости $\mathcal{O}(h^5)$. В качестве количественной меры погрешности новых схем будем использовать следующие два функционала:

$$P_{5,rms}^{(l)} = \left[(1/5) \sum_{j=1}^5 (\sigma_j P_{5j})^2 \right]^{\frac{1}{2}}, \quad X_{5,rms}^{(l)} = \{ [R_{51}^2 + (3R_{52})^2 + R_{53}^2] / 3 \}^{\frac{1}{2}}. \quad (13)$$

Здесь $\sigma_1, \dots, \sigma_5$ – множители перед многочленами P_{5j} в (6), $\sigma_1 = 3, \sigma_2 = 1, \sigma_3 = 6, \sigma_4 = 5, \sigma_5 = 1$, они не зависят от специфики решаемой задачи. Формула для $X_{5,rms}^{(l)}$ учитывает множитель «3» перед R_{52} в (8). Наконец, l – номер найденной новой схемы, $l = 1, 2, \dots$.

Ниже описываются некоторые результаты поиска оптимальных пятистадийных FR-схем четвёртого порядка точности. При этом под оптимальной пятистадийной FR-схемой понимается FR-схема, у которой норма ведущего члена погрешности аппроксимации меньше, чем у лучших четырёхстадийных FR-схем четвёртого порядка точности, найденных в [18]. Наилучшими схемами, найденными в [18], являются следующие схемы: FR47, FR50, FR51, FR52. Они имеют следующие

значения функционалов (13): $P_{5,\text{rms}}^{(l)} = 0.0386$, $X_{5,\text{rms}}^{(l)} = 0.0708$, $l = 47, 50, 51, 52$. Теперь дадим определение лучших пятистадийных FR-схем четвёртого порядка точности как схем, удовлетворяющих следующим неравенствам:

$$P_{5,\text{rms}}^{(l)} < 0.0386 \wedge X_{5,\text{rms}}^{(l)} < 0.0708. \quad (14)$$

Заметим, что система уравнений $P_1 = 0$, $P_2 = 0$, $P_{32} = 0$, $P_{43} = 0$, $P_{55} = 0$ линейна относительно c_i , $i = 1, \dots, 5$. Её легко переписать в виде $\mathcal{P}\mathbf{c} = \mathbf{b}$, где $\mathbf{c} = (c_1, c_2, c_3, c_4, c_5)^T$, $\mathbf{b} = (1, \frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{4}, \frac{1}{5})^T$ и

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & d_1 & d_1 + d_2 & d_1 + d_2 + d_3 & d_1 + d_2 + d_3 + d_4 \\ 0 & d_1^2 & (d_1 + d_2)^2 & (d_1 + d_2 + d_3)^2 & (d_1 + d_2 + d_3 + d_4)^2 \\ 0 & d_1^3 & (d_1 + d_2)^3 & (d_1 + d_2 + d_3)^3 & (d_1 + d_2 + d_3 + d_4)^3 \\ 0 & d_1^4 & (d_1 + d_2)^4 & (d_1 + d_2 + d_3)^4 & (d_1 + d_2 + d_3 + d_4)^4 \end{pmatrix}. \quad (15)$$

Определитель этой матрицы имеет следующий вид:

$$\det \mathcal{P} = d_1 d_2 d_3 d_4 (d_1 + d_2) (d_2 + d_3) (d_3 + d_4) (d_1 + d_2 + d_3) (d_2 + d_3 + d_4) (1 - d_5). \quad (16)$$

Если $\det \mathcal{P} = 0$, то нельзя применять правило Крамера для нахождения выражений для c_i . В этой связи нужно рассматривать все десять частных случаев обращения в ноль определителя (16). В пяти случаях, когда $d_1 = 0$, или $d_2 = 0$, или $d_3 = 0$, или $d_4 = 0$, или $d_5 = 1$, фактическое число параметров, которое нужно найти, уменьшается на единицу, т. е. надо найти девять неизвестных. Но и девять параметров – это очень большое количество неизвестных. Ниже мы покажем, что в этих частных случаях можно найти искомые параметры с помощью базисов Грёбнера. По своему построению каждый многочлен G_i , входящий в базис Грёбнера $G = \{G_1, G_2, \dots\}$, является линейной комбинацией многочленов, входящих в левые части уравнений (12). Поэтому корни уравнений $G_i = 0$ являются корнями и исходной системы (12) [19–21]. При этом система уравнений $G_i = 0$ зачастую оказывается настолько проще, чем исходная система, что удаётся найти все корни системы (12).

Четыре случая, когда $d_1 = 0$, или $d_2 = 0$, или $d_3 = 0$, или $d_4 = 0$, имеют несколько общих черт:

- Соответствующий базис Грёбнера G состоит из восьми многочленов. Введём обозначение $G = \{G_1, G_2, \dots, G_8\}$.
- Многочлен G_1 зависит от одной переменной d_5 или d_1 .
- Базис Грёбнера G является треугольным [19]. Это означает, что базисные многочлены G_i , $i = 1, \dots, 8$, зависят от параметров c_j, d_j , $j = 1, \dots, 5$, следующим образом (на примере случая, когда $d_1 = 0$):

$$\begin{aligned} G_1(d_5), & \quad G_2(d_4, d_5), \quad G_3(d_3, d_5), \quad G_4(d_2, d_5), \\ G_5(c_5, d_5), & \quad G_6(c_4, d_5), \quad G_7(c_3, d_5), \quad G_8(c_1, c_2, d_5). \end{aligned} \quad (17)$$

Из уравнения $G_1(d_5) = 0$ находится корень d_5 . Он подставляется в уравнение $G_2(d_4, d_5) = 0$, которое становится уравнением для определения параметра d_4 . Хотя

многочлен $G_8(c_1, c_2, d_5)$ зависит от двух переменных c_1 и c_2 , параметр c_2 легко исключить с помощью равенства $c_2 = 1 - c_1 - c_3 - c_4 - c_5$.

- Степень многочлена G_1 равна 11.
- Уравнение $G_1 = 0$ имеет три вещественных корня. Остальные корни – это четыре пары комплексно-сопряжённых корней.
- Во всех четырёх случаях полиномы $P_1, P_2, \dots, P_{43}, R_1$ удовлетворяют следующим неравенствам после подстановки найденных решений в систему (12):

$$\mathcal{O}(10^{-97}) \leq |P_1|, |P_2|, |P_{31}|, |P_{32}|, |P_{41}|, |P_{42}|, |P_{43}|, |R_1| \leq \mathcal{O}(10^{-96}).$$

- В случаях, когда $d_1 = 0$, или $d_2 = 0$, или $d_4 = 0$, пара функционалов (13), полученная на первом вещественном корне уравнения $G_1 = 0$, одна и та же: $(P_{5,\text{rms}}^{(l)}, X_{5,\text{rms}}^{(l)}) = (0.0738, 0.1224)$. В случае $d_3 = 0$ была получена пара $(P_{5,\text{rms}}^{(l)}, X_{5,\text{rms}}^{(l)}) = (0.1253, 0.2996)$. Для сравнения заметим, что в случае 99 четырёхстадийных FR-схем, найденных в [18], только семь схем удовлетворяли неравенствам $P_{5,\text{rms}}^{(l)} < 0.126$, $X_{5,\text{rms}}^{(l)} < 0.30$. Так что найденные пятистадийные схемы весьма неплохие в терминах функционалов погрешности по сравнению с четырёхстадийными FR-схемами.

В случае, когда $d_5 = 1$, был получен базис Грёбнера $\{G_1, g_2, \dots\}$, состоящий из 25 многочленов, при этом $G_1 = \mathcal{F}_1(d_3, d_4)$ и $G_2 = \mathcal{F}_2(d_2, d_3, d_4)$. Это означает, что данный базис Грёбнера не является треугольным. Это не является неожиданным фактом, так как исходная система (12) содержит только восемь уравнений. При этом количество неизвестных $c_1, c_2, c_3, c_4, c_5, d_1, d_2, d_3, d_4$ равно девяти. В этом случае базис Грёбнера должен отражать тот факт, что одно из перечисленных выше девяти неизвестных должно рассматриваться как свободный параметр, который может принимать любые вещественные значения. Вид функциональных зависимостей для G_1 и G_2 даёт подсказку, какое из упомянутых выше девяти неизвестных можно взять в качестве свободного параметра: либо d_4 , либо d_3 . Выберем для определённости, d_4 в качестве свободного параметра. Нашей целью является определение такого значения $d_4 = d_4^*$, при котором функция $P_{5,\text{rms}}^{(l)} = P_{5,\text{rms}}^{(l)}(d_4)$ принимает наименьшее значение в промежутке $I = \{-1 \leq d_4 \leq 1\}$. Функция $P_{5,\text{rms}}^{(l)}(d_4)$ может иметь несколько локальных минимумов в I . Поэтому желательно использовать метод равномерного поиска [30] минимизации функции одной переменной в промежутке. Согласно алгоритму этого метода, введём в I сравнительно грубую равномерную сетку с узлами $d_{4,k} = -1 + \frac{k}{10}$, где $k = 0, 1, \dots, 20$. Возьмём для определённости узел $d_{4,15} = \frac{1}{2}$. Подставляя в систему (12) значения $d_4 = \frac{1}{2}$ и $d_5 = 1$, получаем треугольный базис Грёбнера G из восьми многочленов G_j . В этом базисе многочлен G_1 зависит от одной переменной, это многочлен 12-й степени от переменной d_3 . Он имеет четыре вещественных корня: $d_3 \approx -273.16$, $d_3 \approx -1.427$, $d_3 \approx -1.271$, $d_3 \approx -0.5898$.

Многочлены G_2, \dots, G_8 линейны относительно $d_2, d_1, c_5, c_4, c_3, c_2, c_1$ соответственно. Поэтому легко находятся численные значения этих семи неизвестных из уравнений $G_j = 0, j = 2, \dots, 8$, при заданных значениях параметров d_3, d_4 . Значение $d_3 \approx -273.16$ слишком велико. Наилучшим подходящим значением является $d_3 \approx -0.5898$. Подставляя его, наряду с $d_4 = \frac{1}{2}$, в многочлены G_2, \dots, G_8 , получаем

численное решение для всех неизвестных $c_i, d_i, i = 1, \dots, 5$. Поскольку полученное решение является приближённым, его подстановка в левые части уравнений (12) приводит к ненулевым невязкам. Эти невязки имеют следующие порядки малости:

$$\mathcal{O}(10^{-75}) \leq |P_1|, |P_2|, |P_{31}|, |P_{32}|, |P_{41}|, |P_{42}|, |P_{43}|, |R_1| \leq \mathcal{O}(10^{-73}).$$

Полученные значения функционалов (13) таковы: $P_{5,\text{rms}}^{(l)} \approx 2.0573, X_{5,\text{rms}}^{(l)} \approx 2.3832$. Они не удовлетворяют условию (14), поэтому мы не приводим здесь полное решение для c_i и d_i . Аналогичные символьно-численные вычисления выполняются для остальных 20 узлов $d_{4,k} = -1 + \frac{k}{10}$. Затем находится узел $d_{4,k}^*$, в котором достигается минимум функции $P_{5,\text{rms}}^{(l)}(d_4)$ в I . С целью уточнения найденного решения для d_4 вводится равномерная сетка, скажем, из 10 узлов в промежутке $d_{4,k}^* - \Delta d_4 \leq d_{4,k}^* \leq d_{4,k}^* + \Delta d_4$, где $\Delta d_4 = \frac{1}{10}$ – шаг сетки в I . Этот процесс продолжается до получения желаемой точности определения параметра d_4 , см. детали в [30].

Более простым способом получения нескольких дальнейших вещественных корней системы (12) является использование функций численной минимизации, имеющихся в пакете программ *Mathematica*. Мы использовали двухшаговую оптимизационную процедуру, описанную ранее в [18]. Она позволяет уменьшать машинное время, требуемое для решения оптимизационной задачи с высокой точностью, в 10 раз. Ниже мы очень кратко описываем эту процедуру.

На первом шаге вводится следующий квадратичный функционал:

$$F_1(X) = P_1^2 + P_2^2 + P_{31}^2 + P_{32}^2 + \sum_{j=1}^3 P_{4j}^2 + \sum_{j=1}^5 P_{5j}^2 + R_1^2 + \sum_{j=1}^3 R_{5j}^2, \quad (18)$$

где $X = (c_1, c_2, c_3, c_4, c_5, d_1, d_2, d_3, d_4, d_5)$. На этом шаге ищется решение задачи минимизации с низкой точностью. Используется *Mathematica*-функция `NMinimize[...]`, в которой задаётся опция `WorkingPrecision -> 17`. Это означает, что используется арифметика машинных чисел с плавающей запятой и длиной мантииссы из 17 десятичных цифр. Полиномы P_{5j} и R_{5j} включены в (18) в стремлении получить малые значения величин $|P_{5j}|$ и $|R_{5j}|$ при подстановке решения оптимизационной задачи. Количество точек поиска минимума функционала (18) задавалось равным 3000. Но в список решений, полученных на первом шаге, включаются только те точки X , в которых $|F_1(X)| < 10^{-4}$.

На втором шаге точность решений, найденных на первом шаге, повышается до четверной точности. Для этого задается `WorkingPrecision -> 80` в вызове *Mathematica*-функции `FindMinimum[...]`. Используется укороченный функционал

$$F_2(X) = P_1^2 + P_2^2 + P_{31}^2 + P_{32}^2 + \sum_{j=1}^3 P_{4j}^2 + R_1^2. \quad (19)$$

После уточнения 146 решений, найденных на первом шаге, оказалось, что все эти решения удовлетворяют условию (14). Так как новые решения являются приближенными, то при их подстановке в левые части уравнений (12) получаются ненулевые невязки. С целью проверки правильности полученных решений мы

Таблица 1. Значения параметров приближенных пятистадийных схем семейства Фореста – Рута $FR_{5,l}$ ($l = 1, \dots, 5$)

| l | c_i | d_i | $P_{4,rms}^{(l)}$ | $X_{4,rms}^{(l)}$ |
|-----|-----------------------|-----------------------|-------------------|-------------------|
| 1 | 0.114708370543397234 | 0.329073852375988954 | 0.0107 | 0.0174 |
| | 0.734134202640520034 | -0.054966376109499292 | | |
| | -0.229529385681249533 | 0.554350211298705965 | | |
| | 0.995523041962284969 | -0.009674826825454959 | | |
| | -0.614836229464952705 | 0.181217139260259332 | | |
| 2 | 0.115014897478607712 | 0.331159922546512897 | 0.0111 | 0.0183 |
| | 0.767955057325819579 | -0.047775148593238103 | | |
| | -0.261165814488949832 | 0.546154665357935268 | | |
| | 0.963836421552595425 | -0.010187300873597520 | | |
| | -0.585640561868072884 | 0.180647861562387458 | | |
| 3 | 0.115114271084472133 | 0.331232169838587736 | 0.0112 | 0.0184 |
| | 0.763488481826150878 | -0.048748625362975296 | | |
| | -0.256593762170024001 | 0.546599135075668547 | | |
| | 0.927016367150885175 | -0.011303248663834809 | | |
| | -0.549025357891484185 | 0.182220569112553822 | | |
| 4 | 0.115234767372571914 | 0.331996378133286170 | 0.0113 | 0.0186 |
| | 0.774855957772089103 | -0.046626005112929035 | | |
| | -0.267120602099105694 | 0.543795587468122763 | | |
| | 0.895182197171311066 | -0.012271669934171567 | | |
| | -0.518152320216866388 | 0.183105709445691670 | | |
| 5 | 0.113183170010790785 | 0.333134453982853897 | 0.0117 | 0.0180 |
| | 0.957704220572055191 | -0.024920522098163402 | | |
| | -0.448808414442811870 | 0.551977319826554641 | | |
| | -0.892650324217786421 | -0.004564580406969805 | | |
| | 1.270571348077752315 | 0.144373328695724669 | | |

подставляли их в рассматриваемую систему (12). Определим невязки r_{\min} и r_{\max} следующим образом:

$$\begin{aligned}
 r_{\min} &= \min(|R_1|, |P_1|, |P_2|, |P_{31}|, |P_{32}|, |P_{41}|, |P_{42}|, |P_{43}|), \\
 r_{\max} &= \max(|R_1|, |P_1|, |P_2|, |P_{31}|, |P_{32}|, |P_{41}|, |P_{42}|, |P_{43}|).
 \end{aligned}
 \tag{20}$$

Полиномы, входящие в (19), имеют на всех 146 решениях невязки следующих порядков малости: $r_{\min} = \mathcal{O}(10^{-47})$, $r_{\max} = \mathcal{O}(10^{-42})$. Из найденных решений мы отобрали пять решений с наименьшими значениями функционалов (13), решения

приводятся в табл. 1. Видно, что погрешности лучших четырёхстадийных FR-схем четвертого порядка точности, найденных в [18], в три раза больше, чем значения функционалов (13), соответствующих пятистадийным FR-схемам, представленным в табл. 1. Иными словами, точность схем из [18] ниже, чем точность схем, полученных в данной статье.

3. Анализ устойчивости схем

Исследование устойчивости симплектических схем типа Рунге – Кутты обычно проводится на примере задачи о гармоническом осцилляторе. В этой задаче фигурирует только одна частица, которая осциллирует вдоль оси x_1 с ростом времени t . Поэтому аналитические вычисления с целью получения условия устойчивости сравнительно простые. Однако с увеличением числа стадий K РК-метода требуемый объем вычислений возрастает нелинейно. В этой связи целесообразно выполнять эти вычисления на компьютере с использованием одного из пакетов программ общего назначения, в которых заложены аналитические вычисления на компьютере; в отличие от человека компьютер не ошибается при выполнении аналитических вычислений. В [17, 23] эти вычисления были выполнены для схем Рунге – Кутты – Нистрёма с помощью пакета программ *Mathematica* для числа стадий $K = 2, 3, 4, 5$. Было показано, что размер области устойчивости возрастает с увеличением числа стадий. Как известно, схема Верле принадлежит к классу одностадийных РКН-схем [5]. Авторы работ [5, 31] и [32, р. 140] приводят условие устойчивости схемы Верле в виде $0 < \kappa \leq 2$, где κ – число Куранта (определение будет дано ниже в данном разделе). Однако в [17, 23] с помощью изучения поведения дискриминанта характеристического уравнения было показано, что условие устойчивости схемы Верле имеет следующий вид: $0 < |\kappa| \leq 2$. Это существенное уточнение, оно показывает, что возможен устойчивый счёт по схеме Верле от настоящего времени к прошлому с отрицательным шагом во времени. Этот результат не является неожиданным или удивительным. Дело в том, что уравнения Гамильтона обратимы во времени при одновременном обращении времени и скоростей частиц [5]. Отсюда следует, что разностные симплектические схемы так же обратимы во времени, как и уравнения Гамильтона.

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

$$dx/dt = p/m, \quad dp/dt = -m\omega^2 x. \quad (21)$$

Пусть $\vec{X}^n = (x^n, p^n)^T$ и $\vec{X}^{n+1} = (x^{n+1}, p^{n+1})^T$, где верхний индекс T обозначает операцию транспонирования. В матричной записи уравнения (5), применённые к системе (21), 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 $c_j, d_j, j = 1, \dots, K$, и числа Куранта $\kappa = \omega h$. Условиями устойчивости схемы (5) являются условия $|\lambda_i| \leq 1$, где $\lambda_i, i = 1, 2$, – собственные значения матрицы G , т. е. корни характеристического уравнения. Если дискриминант этого уравнения $D = [\text{Tr}(G)/2]^2 - 1 < 0$, то оно имеет два комплексно-сопряжённых корня λ_1, λ_2 такие, что $|\lambda_1| = |\lambda_2| = 1$ по теореме Виета. В этом случае существует ненулевая область устойчивости $|\kappa| \leq \kappa_{cr}$, где κ_{cr} – критическое число Куранта. Введём обозначение $D_2(\kappa) = |\text{Tr}(G)| - 2$. Для рассматриваемых FR-схем κ_{cr} является решением уравнения $D_2(\kappa) = 0$, а искомое условие устойчивости получается из неравенства $D_2 < 0$, вытекающего из неравенства $D < 0$.

Соотношение $|G| = 1$ использовалось для проверки правильности формул для коэффициентов характеристического уравнения.

Ниже мы будем рассматривать условия устойчивости некоторых FR-схем с числами стадий $K = 3, 4, 5$ и сравнивать их с условием устойчивости схемы Верле [24]. Эта схема в применении к линейным уравнениям (21) имеет следующий вид:

$$x^{(1)} = x^n + \frac{h}{2} \frac{p^n}{m}, \quad x^{n+1} = x^n + h \frac{p^n}{m} - \frac{h^2 \omega^2}{2} x^{(1)}, \quad p^{n+1} = p^n - hm \omega^2 x^{(1)}. \quad (22)$$

Приведём программу на языке пакета программ *Mathematica* для вычисления элементов матрицы G :

```
x1 = xn + h*pn/(2m); xnew = xn + h*pn/m - h^2*omega^2*x1/2;
pnew = pn - h*m*omega^2*x1; xnew = xnew; g11 = Coefficient[xnew, xn];
g12 = Coefficient[xnew, pn]; g21 = Coefficient[pnew, xn];
g22 = Coefficient[pnew, pn]; G = {{g11, g12}, {g21, g22}};
G = G /. omega -> kappa/h;
```

В последней строке этой программы введена величина $\kappa = \omega h$. В работах [5, 31] она названа числом Куранта. Матрица G получается в виде

$$G = \begin{pmatrix} 1 - \kappa^2/2 & h/m - h\kappa^2/(4m) \\ -m\kappa^2/h & 1 - \kappa^2/2 \end{pmatrix}.$$

Коэффициенты характеристического уравнения вычисляются с помощью команды $\text{Det}[G - \lambda * \text{IdentityMatrix}[2]]$, и искомое уравнение имеет следующий вид: $1 - 2\lambda + \kappa^2\lambda + \lambda^2 = 0$. Дискриминант $D = \kappa^2(\kappa^2/4 - 1)$. Условие устойчивости выполняется, если $D \leq 0$. В области положительных κ это приводит к условию устойчивости в виде $0 < \kappa \leq 2$. Так как κ входит в D только в чётной степени, то $D \leq 0$ также в интервале $[-2, 0]$, т. е. схема Верле устойчива также в этом интервале. Поэтому условие устойчивости данной схемы должно записываться в виде $0 < |\kappa| \leq 2$.

Программа на языке пакета *Mathematica* для вычисления элементов матрицы G в случае схемы Верле (22) легко обобщается на случай любых пятистадийных FR-схем, поэтому здесь не приводится для краткости. Элементы g_{ij} матрицы G имеют

следующий вид:

$$\begin{aligned} g_{11} &= 1 + \sum_{j=1}^5 (-1)^j \alpha_j^{(1,1)} \kappa^{2j}, & g_{12} &= (h/m) \left(1 + \sum_{j=1}^4 (-1)^j \alpha_j^{(1,2)} \kappa^{2j} \right), \\ g_{21} &= (m/h) \left(-\kappa^2 + \sum_{j=2}^5 (-1)^j \alpha_j^{(2,1)} \kappa^{2j} \right), & g_{22} &= 1 + \sum_{j=1}^4 (-1)^j \alpha_j^{(2,2)} \kappa^{2j}, \end{aligned} \quad (23)$$

где

$$\begin{aligned} \alpha_1^{(1,1)} &= c_3 d_3 + c_3 d_4 + c_4 d_4 + (c_3 + c_4 + c_5) d_5 + c_2 (d_2 + d_3 + d_4 + d_5) + c_1, \\ \alpha_2^{(1,1)} &= c_2 c_3 d_2 d_3 + c_2 c_3 d_2 d_4 + c_2 c_4 d_2 d_4 + c_2 c_4 d_3 d_4 + c_3 c_4 d_3 d_4 + (c_3 (c_4 + c_5) d_3 + \\ &+ (c_3 + c_4) c_5 d_4 + c_2 (c_3 d_2 + (c_4 + c_5) (d_2 + d_3) + c_5 d_4)) d_5 + c_1 (c_4 (d_1 + d_2 + d_3) d_4 + \\ &+ ((c_4 + c_5) (d_1 + d_2 + d_3) + c_5 d_4) d_5 + c_3 (d_1 + d_2) (d_3 + d_4 + d_5) + \\ &+ c_2 d_1 (d_2 + d_3 + d_4 + d_5)), \\ \alpha_3^{(1,1)} &= c_2 c_3 c_4 d_2 d_3 d_4 + (c_2 c_3 (c_4 + c_5) d_2 d_3 + c_5 (c_2 (c_3 + c_4) d_2 + (c_2 + c_3) c_4 d_3) d_4) d_5 + \\ &+ c_1 (c_4 c_5 (d_1 + d_2 + d_3) d_4 d_5 + c_3 (d_1 + d_2) (c_5 (d_3 + d_4) d_5 + c_4 d_3 (d_4 + d_5)) + \\ &+ c_2 d_1 (c_5 (d_2 + d_3 + d_4) d_5 + c_4 (d_2 + d_3) (d_4 + d_5) + c_3 d_2 (d_3 + d_4 + d_5))), \\ \alpha_4^{(1,1)} &= c_1 c_2 c_3 c_4 d_1 d_2 d_3 d_4 + (c_1 c_2 c_3 (c_4 + c_5) d_1 d_2 d_3 + c_5 (c_1 c_2 (c_3 + c_4) d_1 d_2 + \\ &+ c_4 (c_1 (c_2 + c_3) d_1 + (c_1 + c_2) c_3 d_2) d_3) d_4) d_5, \\ \alpha_5^{(1,1)} &= c_1 c_2 c_3 c_4 c_5 d_1 d_2 d_3 d_4 d_5, \\ \alpha_1^{(1,2)} &= c_4 (d_1 + d_2 + d_3) d_4 + ((c_4 + c_5) (d_1 + d_2 + d_3) + c_5 d_4) d_5 + \\ &+ c_3 (d_1 + d_2) (d_3 + d_4 + d_5) + c_2 d_1 (d_2 + d_3 + d_4 + d_5), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \alpha_2^{(1,2)} &= (c_4 c_5 (d_1 + d_2 + d_3) d_4 d_5 + c_3 (d_1 + d_2) (c_5 (d_3 + d_4) d_5 + c_4 d_3 (d_4 + d_5)) + \\ &+ c_2 d_1 (c_5 (d_2 + d_3 + d_4) d_5 + c_4 (d_2 + d_3) (d_4 + d_5) + c_3 d_2 (d_3 + d_4 + d_5))), \\ \alpha_3^{(1,2)} &= c_3 c_4 c_5 (d_1 + d_2) d_3 d_4 d_5 + c_2 d_1 (c_4 c_5 (d_2 + d_3) d_4 d_5 + \\ &+ c_3 d_2 (c_5 (d_3 + d_4) d_5 + c_4 d_3 (d_4 + d_5))), \\ \alpha_4^{(1,2)} &= c_2 c_3 c_4 c_5 d_1 d_2 d_3 d_4 d_5, \\ \alpha_2^{(2,1)} &= c_3 (c_4 + c_5) d_3 + (c_3 + c_4) c_5 d_4 + c_2 (c_3 d_2 + (c_4 + c_5) (d_2 + d_3) + c_5 d_4) + \\ &+ c_1 (c_2 d_1 + c_3 (d_1 + d_2) + (c_4 + c_5) (d_1 + d_2 + d_3) + c_5 d_4), \end{aligned}$$

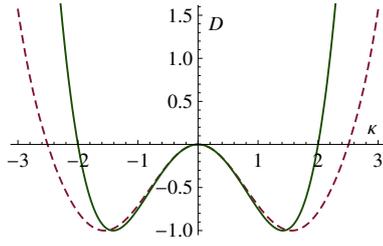


Рис. 1. Дискриминанты $D = D(\kappa)$ для случая схемы Верле (—) и трёхстадийной FR-схемы (---)

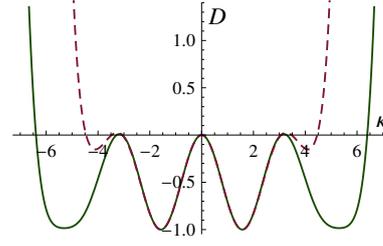


Рис. 2. Дискриминанты $D = D(\kappa)$ для случая схемы FR50 (---) и пятистадийной схемы $FR_{5,1}$ (—)

$$\begin{aligned}
 \alpha_3^{(2,1)} &= c_2c_3(c_4 + c_5)d_2d_3 + c_5(c_2(c_3 + c_4)d_2 + (c_2 + c_3)c_4d_3)d_4 + \\
 &+ c_1(c_4c_5(d_1 + d_2 + d_3)d_4 + c_3(d_1 + d_2)((c_4 + c_5)d_3 + c_5d_4) + \\
 &+ c_2d_1(c_3d_2 + (c_4 + c_5)(d_2 + d_3) + c_5d_4)), \\
 \alpha_4^{(2,1)} &= (c_1c_2c_3(c_4 + c_5)d_1d_2d_3 + c_5(c_1c_2(c_3 + c_4)d_1d_2 + \\
 &+ c_4(c_1(c_2 + c_3)d_1 + (c_1 + c_2)c_3d_2)d_3)d_4), \\
 \alpha_5^{(2,1)} &= c_1c_2c_3c_4c_5d_1d_2d_3d_4, \\
 \alpha_1^{(2,2)} &= c_2d_1 + c_3(d_1 + d_2) + (c_4 + c_5)(d_1 + d_2 + d_3) + c_5d_4, \\
 \alpha_2^{(2,2)} &= c_4c_5(d_1 + d_2 + d_3)d_4 + c_3(d_1 + d_2)((c_4 + c_5)d_3 + c_5d_4) + \\
 &+ c_2d_1(c_3d_2 + (c_4 + c_5)(d_2 + d_3) + c_5d_4), \\
 \alpha_3^{(2,2)} &= c_3c_4c_5(d_1 + d_2)d_3d_4 + c_2d_1(c_4c_5(d_2 + d_3)d_4 + c_3d_2((c_4 + c_5)d_3 + c_5d_4)), \\
 \alpha_4^{(2,2)} &= c_2c_3c_4c_5d_1d_2d_3d_4.
 \end{aligned} \tag{24}$$

Равенства $P_1 = 0$, $R_1 = 0$, входящие в систему (13), являются условиями первого порядка точности FR-схемы. Из них получаются соотношения $\sum_{j=1}^5 c_j = 1$, $\sum_{j=1}^5 d_j = 1$. Эти соотношения были использованы для некоторого уменьшения длин выражений для $\alpha_k^{(i,j)}$, $i, j = 1, 2$. Так как число Куранта κ входит в g_{ij} только в чётных степенях, то ясно, что $D(\kappa)$ – чётная функция, и условие устойчивости будет иметь вид $0 < |\kappa| \leq \kappa_{cr}$.

Докажем, что формулы (23), (24) применимы для анализа устойчивости FR-схем с числом стадий $K = 1, 2, 3, 4, 5$. Действительно, из структуры разностных уравнений (5) видно, что параметры c_i, d_i появляются только на i -й стадии FR-метода ($i = 1, \dots, K$). Поэтому, например, в трёхстадийном FR-методе нет параметров c_4, d_4, c_5, d_5 . То есть можно применить формулы (23) и (24) для получения условия устойчивости трёхстадийной FR-схемы, положив в них $c_4 = 0, d_4 = 0, c_5 = 0, d_5 = 0$.

Легко показать, что при числах стадий $K \leq 5$ кривая $D = D(\kappa)$ всегда проходит

через начало координат. Действительно, используя формулы (24), получаем:

$$D(\kappa) = \frac{1}{4}\kappa^2(\alpha_1^{(1,1)} + \alpha_1^{(2,2)} - \alpha_2^{(1,1)}\kappa^2 - \alpha_2^{(2,2)}\kappa^2 + \alpha_4^{(1,1)}\kappa^4 + \alpha_3^{(2,2)}\kappa^4 - \alpha_4^{(1,1)}\kappa^6 - \alpha_4^{(2,2)}\kappa^6 + \alpha_5^{(1,1)}\kappa^8)(-4 + \alpha_1^{(1,1)}\kappa^2 + \alpha_1^{(2,2)}\kappa^2 - \alpha_2^{(1,1)}\kappa^4 - \alpha_2^{(2,2)}\kappa^4 + \alpha_4^{(1,1)}\kappa^6 + \alpha_3^{(2,2)}\kappa^6 - \alpha_4^{(1,1)}\kappa^8 - \alpha_4^{(2,2)}\kappa^8 + \alpha_5^{(1,1)}\kappa^{10}). \quad (25)$$

Из (25) следует, что $D(\kappa) = 0$ при $\kappa = 0$, причём корень $\kappa = 0$ имеет кратность 2.

В частности, в работе [9] была представлена единственная трёхстадийная схема, имеющая следующие значения шести параметров:

$$c_1 = \frac{7}{24}, \quad c_2 = \frac{3}{4}, \quad c_3 = -\frac{1}{24}, \quad d_1 = \frac{2}{3}, \quad d_2 = -\frac{2}{3}, \quad d_3 = 1. \quad (26)$$

Подставляя эти значения в формулы (23) и (24), получаем следующую матрицу G :

$$G = \begin{pmatrix} -\frac{7\kappa^6}{1728} + \frac{5\kappa^4}{72} - \frac{\kappa^2}{2} + 1 & \frac{h}{m}(\frac{\kappa^4}{72} - \frac{\kappa^2}{6} + 1) \\ \frac{m}{h}(-\frac{7\kappa^6}{1728} + \frac{\kappa^4}{6} - \kappa^2) & \frac{\kappa^4}{72} - \frac{\kappa^2}{2} + 1 \end{pmatrix}.$$

Характеристическое уравнение имеет следующий вид:

$$\lambda^2 + \lambda\left(-2 + \kappa^2 - \frac{\kappa^4}{12} + \frac{7\kappa^6}{1728}\right) + 1 = 0.$$

Отсюда находится дискриминант в виде $D(\kappa) = \frac{1}{4}\left(\frac{7\kappa^6}{1728} - \frac{\kappa^4}{12} + \kappa^2 - 2\right)^2 - 1$. Уравнение $D(\kappa) = 0$ имеет 12 корней, из которых четыре корня являются вещественными. На рис. 1 показан график функции $D(\kappa)$. Итоговое условие устойчивости имеет следующий вид:

$$0 < |\kappa| \leq 2\sqrt{\frac{3}{7}(4 - 2 \cdot 6^{1/3} + 6^{2/3})} \approx 2.50748. \quad (27)$$

Заметим, что интервал устойчивости трёхстадийной FR-схемы вдоль оси κ примерно на 25 % больше, чем в случае схемы Верле (см. также рис. 1).

Среди пятистадийных FR-схем, приведённых в табл. 1, наименьшие значения функционалов ошибок (13) имеет схема $FR_{5,1}$. На рис. 2 сравниваются области устойчивости этой схемы и лучшей четырёхстадийной схемы $FR50$, найденной в [18]. Параметры схемы $FR50$ даны в табл. 2; дискриминант даётся формулой:

$$D(\kappa) = -1 + (1/4)[2 - \kappa^2 + (1/12)\kappa^4 - 0.002536488904\kappa^6 + 0.000018395117\kappa^8]^2.$$

Область устойчивости схемы $FR50$ состоит из нескольких интервалов:

$$9.82669 \leq |\kappa| \leq 9.84599; \quad 3.47141 \leq |\kappa| \leq 4.45764; \quad 0 < |\kappa| \leq 3.06662.$$

Эти интервалы устойчивости разделены интервалами неустойчивости (см. рис. 2). Интервалами устойчивости $9.82669 \leq \kappa \leq 9.84599$ и $-9.84599 \leq \kappa \leq -9.82669$ можно пренебречь ввиду их малости, поэтому они не показаны на рис. 2.

Таблица 2. Значения параметров схемы FR50 в семействе четырёхстадийных схем Фореста – Рута

| c_i | d_i | $P_{5,rms}^{(l)}$ | $X_{5,rms}^{(l)}$ |
|-----------------------|-----------------------|-------------------|-------------------|
| 0.136825942475053071 | 1/2 | 0.0386 | 0.0708 |
| -0.295364245574992759 | -0.062976137694193308 | | |
| 0.837926908632179149 | 0.440948891327570560 | | |
| 0.320611394467760539 | 0.122027246366622748 | | |

В случае схемы $FR_{5,1}$ из табл. 1 дискриминант имеет следующий вид:

$$D(\kappa) = -1 + (1/4)[2 - \kappa^2 + (1/12)\kappa^4 - 0.002702663921\kappa^6 + 0.000037953855\kappa^8 - 2.079872909348 \cdot 10^{-7}\kappa^{10}]^2.$$

С целью проверки правильности вычисления величин g_{ij} по формулам (24) и (25) мы подсчитывали определитель $|G|$ для каждой из рассматриваемых FR-схем. Например, в случае схемы $FR_{5,1}$ мы получили $|G| = \underbrace{1.0000 \dots 0}_{78 \text{ нулей}}$. Область устойчивости

схемы $FR_{5,1}$ также состоит из нескольких интервалов:

$$3.28026 \leq |\kappa| \leq 6.39298; \quad 0 < |\kappa| \leq 3.06393.$$

Суммарные длины интервалов устойчивости схем FR50 и $FR_{5,1}$ равны соответственно 8.1 и 12.35. То есть запас устойчивости схемы $FR_{5,1}$ больше, чем в случае схемы FR50. Кроме того, из сравнения рис. 1 и 2 видно, что размеры областей устойчивости растут с увеличением числа стадий FR-схем.

В работе [33] рассматривались вопросы построения явных несимплектических схем Рунге – Кутты (РК) высоких порядков точности. Отмечалось, что заметное нарушение неравенств

$$0 \leq c_i, d_i \leq 1 \tag{28}$$

может существенно увеличивать коэффициенты в остаточных членах, т. е. ухудшать точность. При этом в [33] предполагалось численное интегрирование только в направлении возрастания времени. Как было отмечено выше, уравнения Гамильтона обратимы во времени. В условиях устойчивости рассмотренных симплектических FR-схем это свойство отражается в том, что число Куранта κ входит в эти условия только в виде $|\kappa|$. Поэтому нужно обобщить условия (28) на случай FR-схем следующим образом: $0 \leq |c_i|, |d_i| \leq 1$. В табл. 1 этим условиям удовлетворяют первые четыре схемы $FR_{5,l}$, $l = 1, 2, 3, 4$.

4. Задача Кеплера

Задача о движении системы, состоящей из двух взаимодействующих частиц (задача двух тел, задача Кеплера), допускает полное аналитическое решение в общем виде [8]. Эта задача описывается системой из восьми обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ), в которой четыре уравнения описывают эволюцию во времени координат (x_k, y_k) каждого из двух тел, а величины (p_{kx}, p_{ky}) ,

$k = 1, 2$, описывают эволюцию количеств движения тел. Подробный вид этой системы имеется в [23]. Указанная ОДУ-система решается с использованием заданных начальных положений тел и их количеств движения. При одинаковых массах тел $m_1 = m_2 = 1$ суммарная начальная энергия E_0 обоих тел $|E_0| = |v_0^2 - 1/(2a_0)|$, где $2a_0$ – заданное начальное расстояние между телами ($a_0 = 2$), v_0 – заданное абсолютное значение начальной скорости каждого тела [23].

Таблица 3. Погрешности δE_{mean} и $|\delta E|_{\text{mean}}$ при $v_0 = 0.15, t = 300$

| Метод | K | Порядок схемы | δE_{mean} | $ \delta E _{\text{mean}}$ |
|-------------------|-----|--------------------|--------------------------|----------------------------|
| Верле | 1 | $\mathcal{O}(h^2)$ | $8.361e - 6$ | $8.361e - 6$ |
| FR50 | 4 | $\mathcal{O}(h^4)$ | $1.645e - 11$ | $1.708e - 11$ |
| FR _{5,1} | 5 | $\mathcal{O}(h^4)$ | $1.028e - 11$ | $1.034e - 11$ |
| FR _{5,2} | 5 | $\mathcal{O}(h^4)$ | $1.009e - 11$ | $1.011e - 11$ |
| FR _{5,3} | 5 | $\mathcal{O}(h^4)$ | $1.006e - 11$ | $1.018e - 11$ |
| FR _{5,4} | 5 | $\mathcal{O}(h^4)$ | $1.001e - 11$ | $1.012e - 11$ |
| FR _{5,5} | 5 | $\mathcal{O}(h^4)$ | $9.375e - 12$ | $9.454e - 12$ |

При численном решении задачи Кеплера с использованием симплектических разностных схем энергия E^n при $t = t^n > 0$ вычисляется с ошибкой. Пусть $\delta E^n = (E^n - E_0)/E_0$, где $E^n = (1/2)[(p_{1x}^n)^2 + (p_{1y}^n)^2 + (p_{2x}^n)^2 + (p_{2y}^n)^2] - 1/r^n$, $r^n = [(x_1^n - x_2^n)^2 + (y_1^n - y_2^n)^2]^{1/2}$. В [17, 23] было показано, что для обеспечения нулевого эксцентриситета e орбит частиц достаточно положить $v_0 = 0.5/\sqrt{a_0}$.

Таблица 4. Погрешности δE_{mean} и $|\delta E|_{\text{mean}}$ при $v_0 = 0.15, t = 500$

| Метод | K | Порядок схемы | δE_{mean} | $ \delta E _{\text{mean}}$ |
|-------------------|-----|--------------------|--------------------------|----------------------------|
| Верле | 1 | $\mathcal{O}(h^2)$ | $8.361e - 6$ | $8.361e - 6$ |
| FR50 | 4 | $\mathcal{O}(h^4)$ | $1.226e - 10$ | $1.284e - 10$ |
| FR _{5,1} | 5 | $\mathcal{O}(h^4)$ | $8.951e - 11$ | $8.978e - 11$ |
| FR _{5,2} | 5 | $\mathcal{O}(h^4)$ | $8.706e - 11$ | $8.725e - 11$ |
| FR _{5,3} | 5 | $\mathcal{O}(h^4)$ | $8.749e - 11$ | $8.775e - 11$ |
| FR _{5,4} | 5 | $\mathcal{O}(h^4)$ | $8.684e - 11$ | $8.714e - 11$ |
| FR _{5,5} | 5 | $\mathcal{O}(h^4)$ | $8.158e - 11$ | $8.189e - 11$ |

Численные результаты, представленные в табл. 3 и 4, были получены при одном и том же эксцентриситете каждой орбиты $e = 0.82$ согласно точному решению. При этом значении e каждая частица совершает полный оборот за период времени $T = 16.3227$. Таким образом, за время $t = 300$ каждая частица совершила 18 полных оборотов. При расчётах, представленных в табл. 3, использовался один и тот же временной шаг $h = 0.003$ для всех схем (было выполнено 10^5 шагов во времени). Величины δE_{mean} и $|\delta E|_{\text{mean}}$ вычислялись как средние арифметические

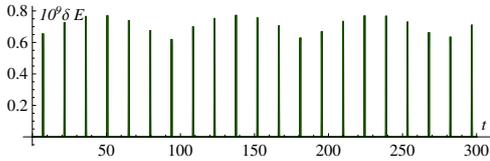


Рис. 3. Задача Кеплера, эксцентриситет $e = 0.82$. Величина $10^9 \delta E$ для случая метода $FR_{5,1}$ как функция времени

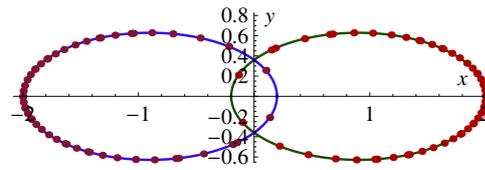


Рис. 4. Эллиптические орбиты частицы 1 (правый эллипс) и частицы 2 (левый эллипс) в плоскости (x, y) , $0 \leq t \leq 300$. Сплошные линии – точные эллипсы, тёмные кружки – численное решение по методу $FR_{5,1}$

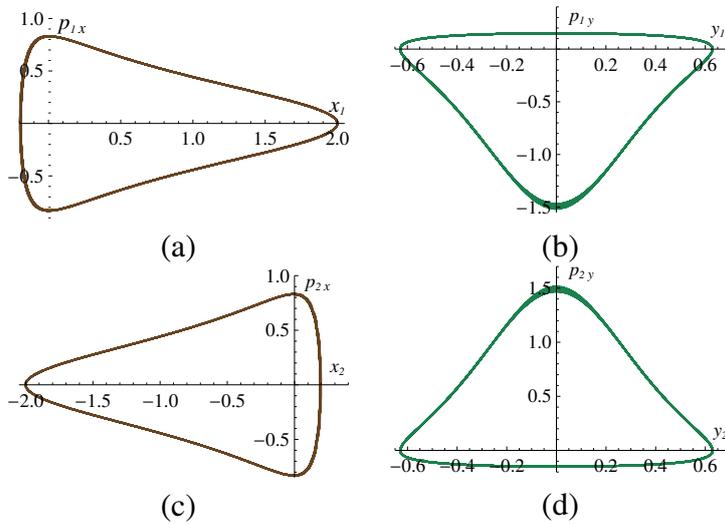


Рис. 5. Задача Кеплера, эксцентриситет $e = 0.82$. Расчёт по методу $FR_{5,1}$. Вид фазовых траекторий в различных фазовых плоскостях: (a), (b) – частица 1, (c), (d) – частица 2

значения величин δE^n и $|\delta E^n|$. Погрешности в энергии, полученные по наилучшей четырёхстадийной схеме FR_{50} , найденной в [18], примерно в 1.6 раза больше, чем при использовании пятистадийных схем четвёртого порядка точности $FR_{5,l}$, $l = 1, \dots, 5$.

Численные результаты, представленные в табл. 4, были получены при временном шаге $h = 0.005$ для всех схем (было выполнено 10^5 шагов во времени). Из сравнения табл. 3 и 4 следует, что при увеличении размера шага h уменьшается отличие результатов, полученных по схеме FR_{50} , от результатов, полученных по пятистадийным схемам. При этом погрешности в энергии, полученные при использовании пятистадийных схем четвёртого порядка точности $FR_{5,l}$, $l = 1, \dots, 5$, на 34–40 % меньше, чем в случае четырёхстадийной схемы FR_{50} .

Результаты численных расчётов, представленные на рис. 3–5, были получены при эксцентриситете $e = 0.82$ и шаге $h = 0.003$. Как видно из рис. 3, дрейфа полной энергии системы из двух частиц нет. Вместо этого имеются локальные пики колебаний, огибающая которых может быть аппроксимирована синусоидальной кривой вида $\delta E_{\max}(t) = A + B \sin(\omega_1 t + \psi)$, где A, B, ω_1, ψ – некоторые постоянные.

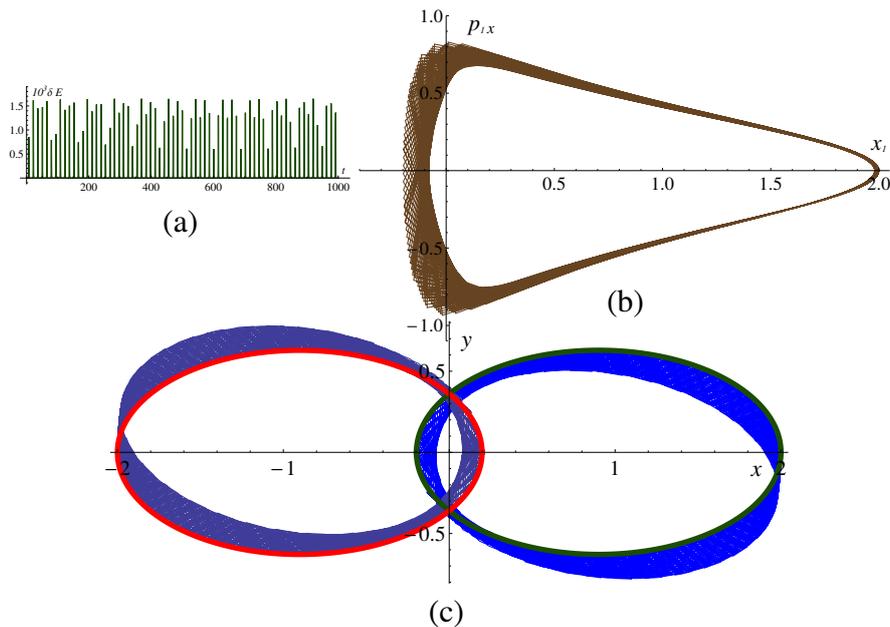


Рис. 6. Задача Кеплера, эксцентриситет $e = 0.82$. Расчёт по схеме Верле с $h = 0.015$ в промежутке $0 \leq t \leq 1000$: (a) – величина $10^3 \delta E$ как функция времени, (b) – фазовая траектория первой частицы в фазовой плоскости (x_1, p_{1x}) , (c) – орбиты частицы 1 (правый эллипс) и частицы 2 (левый эллипс) в плоскости (x, y) , (—) – точные эллипсы, (---) – численное решение по методу Верле

Численное решение для координат обеих частиц, полученное по методу $FR_{5,1}$ на момент времени $t = 300$ после выполнения 10^5 временных шагов с шагом $h = 0.003$, представлено на рис. 4. Видно, что каждая частица движется по своей эллиптической орбите и положения частиц очень хорошо согласуются с точными орбитами.

На рис. 5 показаны фазовые траектории обеих частиц в четырёх фазовых плоскостях. Орбиты обеих частиц стационарные в пространстве точек (x, y) . Поэтому после каждого полного оборота по эллиптической орбите каждая частица должна вернуться в исходную точку, если расчёт проводится по устойчивой схеме достаточно высокой точности. Так что во всех четырёх рассмотренных фазовых плоскостях фазовые траектории должны быть замкнутыми кривыми, что и видно на рис. 5.

В заключение этого раздела рассмотрим вопрос об оптимальном выборе временного шага h численного интегрирования методом молекулярной динамики. Представленные выше новые пятистадийные FR-схемы обладают более высокой точностью, чем схема Верле. Но K -стадийная FR-схема требует при $K > 1$ в K раз больших расходов машинного времени, чем схема Верле. С другой стороны, в [34] было показано, что четырёхстадийная схема FR_{50} (параметры этой схемы приведены выше в табл. 2) позволяет существенно сократить расход машинного времени при численном решении задачи о высокоскоростном ударе медной наночастицы по медной пластине. В итоге расход машинного времени по схеме FR_{50} составил только 37.5 % от машинного времени, понадобившегося при расчёте той же задачи по схеме Верле. Это было достигнуто за счёт подбора оптимального размера

временного шага h . Благодаря повышенной точности, а также большему размеру области устойчивости схема FR50 позволяет применять большие шаги h , при этом дрейф полной энергии системы ударник-преграда появляется при гораздо большем временном шаге, чем в случае схемы Верле. Именно это и позволило существенно снизить расход машинного времени при численном решении трёхмерной задачи о соударении медной наночастицы с медной пластиной.

В задаче Кеплера используется гравитационный потенциал, который намного проще, чем ЕАМ-потенциал, применённый в [34] (ЕАМ – аббревиатура английских слов Embedded Atom Method – метод погружённого атома). Тем не менее представляет интерес сравнение критических временных шагов h_{cr} , при которых появляется дрейф полной энергии частиц в таких двух существенно различных задачах, как задача высокоскоростного соударения тел и задача Кеплера. Ниже мы приводим результаты вычислительных экспериментов, которые были выполнены с целью обнаружения дрейфа полной энергии при численном решении задачи Кеплера по схеме Верле и по одной из новых пятистадийных FR-схем, а именно, по схеме FR_{5,1}.

Очень заметный дрейф полной энергии наблюдался в [34] при использовании схемы Верле при $h = 0.015$. Для сравнения на рис. 6 приводятся результаты расчёта задачи Кеплера по схеме Верле с этим же шагом. Следуя работам [18, 25], мы рассмотрели поведение симплектических схем в промежутке времени $[0, 1000]$. Видно, что траектории обеих частиц с ростом времени t всё более отклоняются от своих точных стационарных эллиптических орбит. Интересно отметить, что дрейф полной энергии не наблюдается, амплитуда колебаний погрешности δE^n не увеличивается с ростом времени t . В то же время вполне ясно, что шаг $h = 0.015$ неприемлем с точки зрения точности результата.

Результаты расчёта задачи Кеплера с шагом $h = 0.06$ по схеме Верле и по новой схеме FR_{5,1} представлены соответственно на рис. 7 и на рис. 8. Видно, что отклонения обеих частиц от их точных орбит весьма значительные на рис. 7. В то же время отклонения обеих частиц от их точных орбит очень малы на рис. 8 во всём промежутке $0 \leq t \leq 1000$.

Из полученных результатов численного решения задачи Кеплера по схемам Верле и FR_{5,1} можно сделать следующий вывод: безопасный максимальный временной шаг h , при котором не возникает дрейф полной энергии, в случае схемы FR_{5,1} превосходит аналогичный безопасный шаг для схемы Верле более, чем в четыре раза.

5. Выводы

Рассмотрена задача построения симплектических схем высокого порядка точности для численного решения задач молекулярной динамики с распадающимся гамильтонианом. Использовались базисы Грёбнера и методы численной оптимизации. Эти методы позволили нам найти 146 новых симплектических пятистадийных схем четвертого порядка точности в семействе Фореста – Рута.

Новые схемы были протестированы на задаче Кеплера двух тел, которая имеет точное решение. Показано, что новые схемы обеспечивают более высокую точность сохранения энергии частиц, чем лучшие четырёхстадийные FR-схемы

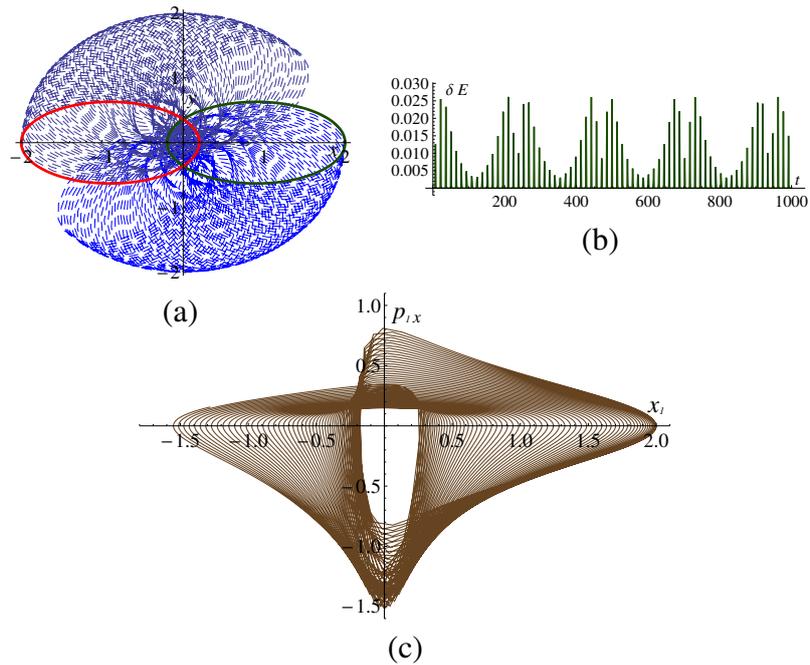


Рис. 7. Задача Кеплера, эксцентриситет $e = 0.82$. Расчёт по схеме Верле с $h = 0.06$ в промежутке $0 \leq t \leq 1000$: (a) – орбиты частицы 1 (правый эллипс) и частицы 2 (левый эллипс) в плоскости (x, y) , (—) – точные эллипсы, (---) – численное решение по методу Верле, (b) – величина δE как функция времени, (c) – фазовая траектория первой частицы в фазовой плоскости (x_1, p_{1x})

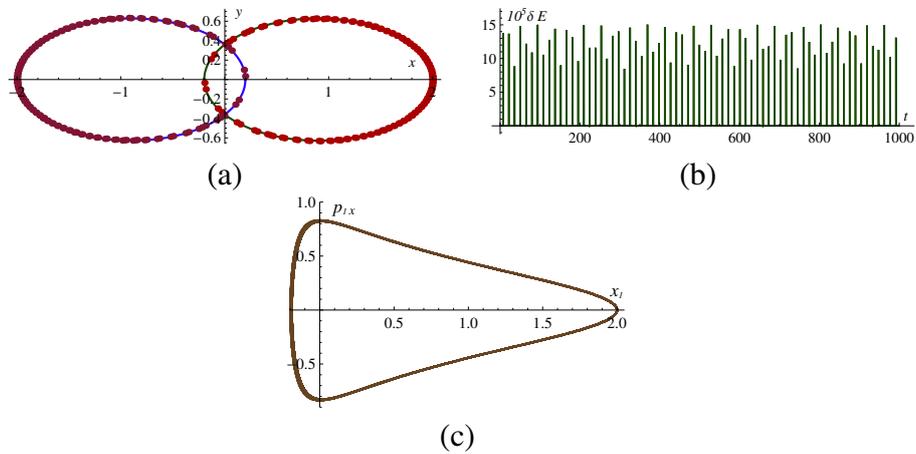


Рис. 8. Задача Кеплера, эксцентриситет $e = 0.82$. Расчёт по новому методу $FR_{5,1}$ с шагом $h = 0.06$ в промежутке $0 \leq t \leq 1000$: (a) – орбиты частицы 1 (правый эллипс) и частицы 2 (левый эллипс) в плоскости (x, y) , (—) – точные эллипсы, (•••) – численное решение по методу $FR_{5,1}$, (b) – величина δE как функция времени, (c) – фазовая траектория первой частицы в фазовой плоскости (x_1, p_{1x})

четвёртого порядка точности из [18] и известная схема Верле второго порядка точности. Проведено сравнение условий устойчивости FR-схем с числом стадий 3, 4 и 5. Показано, что размер области устойчивости растёт с увеличением числа стадий FR-схем.

Литература

1. Lewis H., Barnes D., Melendes K. The Liouville theorem and accurate plasma simulation // *Journal of Computational Physics*. 1987. Vol. 69, No. 2. P. 267–282.
2. Gladman B., Duncan M. Symplectic integrators for long-term integrations in celestial mechanics // *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*. 1991. Vol. 52. P. 221–240.
3. Karplus M., Petsko G.A. Molecular dynamics simulations in biology // *Nature*. 1990. Vol. 347. P. 631–639.
4. Tosenberger A., Salnikov V., Bessonov N., Babushkina E., Volpert V. Particle dynamics methods in blood flows simulations // *Mathematical Modelling of Natural Phenomena*. 2011. Vol. 6, No. 5. P. 320–332.
5. Годунов С.К., Киселёв С.П., Куликов И.М., Мали В.И. Моделирование ударно-волновых процессов в упругопластических материалах на различных (атомный, мезо и термодинамический) структурных уровнях. Москва; Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2014. 296 с.
6. Engle R.D., Skeel R.D., Drees M. Monitoring energy drift with shadow Hamiltonians // *Journal of Computational Physics*. 2005. Vol. 206, No. 2. P. 432–452.
7. LAMMPS Users Manual 31 Mar 2017 version. Sandia National Laboratories. URL: <http://lammps.sandia.gov> (дата обращения: 01.06.2024).
8. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 1. Механика. М.: Наука, 1973. 208 с.
9. Ruth R.D. A canonical integration technique // *IEEE Transactions on Nuclear Science*. 1983. Vol. NS-30, No. 4. P. 2669–2671.
10. Feng K. Difference schemes for Hamiltonian formalism and symplectic geometry // *Journal of Computational Mathematics*. 1986. Vol. 4. P. 279–289.
11. Forest E. Canonical integrators as tracking codes. SSC Central Design Group Technical Report SSC-138, 1987.
12. Neri F. Lie algebras and canonical integration. University of Maryland, preprint, 1988.
13. Forest E., Ruth R.D. Fourth-order symplectic integration // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. 1990. Vol. 43. P. 105–117.
14. Vorozhtsov E.V., Kiselev S.P. Comparative study of the accuracy of higher-order difference schemes for molecular dynamics problems using the computer algebra means // *Computer Algebra in Scientific Computing*. CASC 2020. LNCS. Vol. 12291. P. 600–620.
15. Vorozhtsov E.V., Kiselev S.P. Optimal four-stage symplectic integrators for molecular dynamics problems // *Computer Algebra in Scientific Computing*. CASC 2021. LNCS. Vol. 12865. P. 420–441.
16. Vorozhtsov E.V., Kiselev S.P. A general method of finding new symplectic schemes for Hamiltonian mechanics // *Computer Algebra in Scientific Computing*. CASC-2022. LNCS. Vol. 13366. P. 353–376.
17. Vorozhtsov E.V., Kiselev S.P. Higher-order symplectic integration techniques for molecular dynamics problems // *Journal of Computational Physics*. 2022. Vol. 452. Art. 110905.
18. Vorozhtsov E.V., Kiselev S.P.: An efficient method of finding new symplectic schemes for Hamiltonian mechanics problems with the aid of parametric Gröbner bases // *Journal of Computational Physics*. 2024. Vol. 496. Art. 112601.
19. Adams A.L., Loustau P. An Introduction to Gröbner Bases. Vol. 3. Providence: Amer. Math. Soc., Rhode Island, 1996.

20. Кокс Д., Литтл Дж., О'Ши Д. Идеалы, многообразия и алгоритмы. М.: Мир, 2000. 687 с.
21. Cox D., Little J., O'shea D. Using Algebraic Geometry. N.Y.: Springer, Science+Business media, Inc., 2005. 184 p.
22. Дьяконов В.П. Mathematica 5/6/7. Полное руководство. М.: ДМК Пресс, 2010. 624 с.
23. Ворожцов Е.В., Киселев С.П. Явные схемы высоких порядков точности для задач молекулярной динамики // Вычислительные методы и программирование. 2021. Т. 22. С. 87–108.
24. Verlet L. Computer “experiments” on classical fluids. Thermodynamical properties of Lennard–Jones molecules // Physical Review Journals. 1967. Vol. 159, No. 1. P. 98–103.
25. Hairer E., Lubich C., Wanner G. Geometric Numerical Integration. 2nd ed. Berlin; Heidelberg: Springer-Verlag, 2006.
26. Leimkuhler B., Reich S. Simulating Hamiltonian Dynamics. Cambridge: Cambridge University Press, 2004.
27. Omelyan I.P., Mryglod I.M., Folk R. Optimized Verlet-like algorithms for molecular dynamics simulations // arXiv. 2001. arXiv:cond-mat/0110438v1.
28. Blanes S., Moan P. Practical symplectic partitioned Runge–Kutta and Runge–Kutta–Nyström methods // Journal of Computational and Applied Mathematics. 2002. Vol. 142. P. 313–330.
29. Okunbor D.I., Skeel R.D. Canonical Runge–Kutta–Nyström methods of orders five and six // Journal of Computational and Applied Mathematics. 1994. Vol. 51. P. 375–382.
30. Кудрявцева И.В., Рыков С.А., Рыков С.В., Скобов Е.Д. Методы оптимизации в примерах в пакете MathCAD 15. Учебное пособие. Ч. I. СПб: НИУ ИТМО, ИХиБТ, 2014. 166 с.
31. Софронов В.Н., Шемарулин В.Е. Классификация явных трехстадийных симплектических разностных схем численного решения натуральных гамильтоновых систем. Сравнительное исследование точности схем высокого порядка на задачах молекулярной динамики // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2016. Т. 56, № 4. С. 551–571.
32. Leimkuhler B., Matthews C. Molecular Dynamics With Deterministic and Stochastic Numerical Methods. Heidelberg: Springer, 2015.
33. Альшина Е.А., Закс Е.М., Калиткин Н.Н. Оптимальные схемы Рунге Кутты с первого по шестой порядок точности // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2008. Т. 48, № 3. С. 418–429.
34. Ворожцов Е.В. Анализ эффективности симплектических схем высокого порядка точности на примере задачи о соударении наночастицы с преградой // Вычислительные методы и программирование. 2024. Т. 25, № 2. С. 214–237.

NEW SYMPLECTIC FIVE-STAGE SCHEMES FOR MOLECULAR DYNAMICS PROBLEMS

E.V. Vorozhtsov

Dr.Sc. (Phys.-Math.), Professor, Leading Researcher, e-mail: vorozh@itam.nsc.ru

Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics
Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russia

Abstract. We consider the Forest – Ruth family of symplectic five-stage Runge – Kutta type schemes for the numerical solution of molecular dynamics problems described by systems with a separable Hamiltonian. A two-step optimization method for finding symplectic schemes of high order of accuracy is proposed. In fact, a method has been proposed for increasing the accuracy of symplectic difference schemes with a fixed number of stages by obtaining real schemes with the smallest norm of the leading term of the difference scheme approximation error. 146 new five-stage schemes of the fourth order of accuracy were found using numerical optimization. A comparison was made of the stability conditions of the Forest – Ruth schemes with a number of stages of 3, 4, and 5. The accuracy of the new schemes was demonstrated using the example of a numerical solution to the Kepler two-body problem. It is shown that the new five-stage schemes provide higher accuracy of particle energy conservation than the best known four-stage fourth-order schemes and the well-known second-order Verlet scheme.

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

Дата поступления в редакцию: 17.06.2024