

ПРОЦЕДУРА ПОСТРОЕНИЯ ЯВНО-НЕЯВНЫХ СИМПЛЕКТИЧЕСКИХ ЧИСЛЕННЫХ СХЕМ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ГАМИЛЬТОНОВЫХ СИСТЕМ УРАВНЕНИЙ

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

Российская Федерация, г.Дубна Московской области, ул. Жолио-Кюри, д. 6, ЛИТ ОИЯИ

Интенсивно используемые для моделирования сложных систем в различных областях науки и технологий методы молекулярной динамики основаны на решении на каждом временном шаге гамильтоновых систем уравнений. Повышение реалистичности процессов моделирования приводят к увеличению порядка систем молекулярно-динамических уравнений. Повышение эффективности численных методов на каждом временном шаге требует существенного повышения экономичности численного моделирования. В работе предложена самосогласованная процедура построения явно- неявных симплектических численных схем произвольного порядка аппроксимации для решения уравнений молекулярной динамики в гамильтоновой форме. Она основана на использовании аппарата производящих функций и разложения приближенного решения в ряды Тейлора. Численные эксперименты показали не только вычислительную эффективность такого типа численных схем, но и сохранение с необходимой точностью геометрических свойств исходной гамильтоновой системы.