
ПРИЛОЖЕНИЯ МАТЕМАТИКИ

УДК 544.272:519.6

EDN: KANLXD

Сравнение вычислительных методов молекулярной динамики

Чупраков Павел Григорьевич¹, Кабанов Егор Андреевич²,
Гавриленков Алексей Евгеньевич³

¹кандидат биологических наук, доцент кафедры прикладной математики и информатики,
Вятский государственный университет. Россия, г. Киров. E-mail: email@gmail.com

²студент направления подготовки «Прикладная математика и информатика»,
Вятский государственный университет. Россия, г. Киров. E-mail: sergeyrootuser@gmail.com

³студент направления подготовки «Прикладная математика и информатика»,
Вятский государственный университет. Россия, г. Киров. E-mail: Alekceygavr01082004@gmail.com

Аннотация. Актуальность исследования определяется широкой востребованностью молекулярной динамики для моделирования процессов на атомном уровне, где выбор численного метода интегрирования существенно влияет на точность и устойчивость результатов. Цель исследования – сравнительный анализ различных численных методов интегрирования в молекулярной динамике, реализованных на языке C++ с единым интерфейсом. Разработана программная платформа для генерации начальных условий, интегрирования системы одинаковыми методами и оценки точности по среднеквадратичной ошибке. Работа включает теоретический анализ алгоритмов и их численную верификацию на модельной задаче с потенциалом Леннарда-Джонса. Для исследования были рассмотрены метод Рунге – Кутты 4-го порядка [2], классический алгоритм Верле [3], скоростной Верле [3], метод с перескоками (leapfrog) [4], метод Бимана – Шофилда [5] и предиктор-корректор [6]. Основные результаты демонстрируют, что модификации Верле и метод Бимана – Шофилда обеспечивают наименьшую среднеквадратичную ошибку (MSE [7]) и высокую численную устойчивость при различных параметрах моделирования, в то время как стандартный алгоритм Верле наиболее чувствителен к накоплению погрешностей. Полученные данные могут быть использованы для оптимизации вычислительных экспериментов в задачах физики твердого тела, химии, материаловедения и биомолекулярных исследований.

Ключевые слова: молекулярная динамика, численные методы интегрирования, устойчивость алгоритмов, среднеквадратичная ошибка, симуляция атомных систем, вычислительный эксперимент.

Введение. Молекулярная динамика [1] – важный метод численного моделирования, позволяющий отслеживать эволюцию атомных и молекулярных систем через интегрирование классических уравнений движения. Эффективность и стабильность моделирования во многом зависят от выбранного численного алгоритма. Целью настоящей работы является сравнительный анализ численных методов интегрирования в молекулярной динамике, их реализация в единой программной платформе и оценка точности и устойчивости при различных параметрах моделирования. Основные задачи исследования состоят в следующем:

- Разработка единой программы на C++ для реализации и сравнения алгоритмов интегрирования.
- Численная верификация корректности работы методов.
- Оценка точности (через среднеквадратичную ошибку, MSE) и устойчивости при различных шагах интегрирования.

Математическая модель. Рассматривается замкнутая система, состоящая из однотипных молекул, расположенных в кубе заданного объема $V = L^3$. Гамильтониан системы имеет вид [1]:

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{m}{2} ||v_i||^2 + \sum_{i<j}^N u(|r_i - r_j|), \quad (1)$$

где:

- m – масса молекулы;
- r_i – радиус-вектор i -й молекулы;
- v_i – скорость i -й молекулы;
- $u(r)$ – потенциал межмолекулярного взаимодействия;

– $|r_i - r_j|$ – расстояние между i -й и j -й молекулами.

Для описания взаимодействия используется потенциал Леннарда-Джонса [1]:

$$u(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (2)$$

где:

- ϵ – глубина потенциальной ямы;
- σ – расстояние, на котором потенциал равен нулю;
- r – расстояние между центрами двух молекул.

Сила, действующая между двумя молекулами, определяется как градиент потенциала:

$$F(r_{ij}) = -\nabla_i u(r_{ij}) = 24\epsilon \left[2 \frac{\sigma^{12}}{r_{ij}^{13}} - \frac{\sigma^6}{r_{ij}^7} \right] \frac{r_i - r_j}{r_{ij}}, \quad (3)$$

где – расстояние между центрами двух молекул.

На основе гамильтониана выводятся классические уравнения движения для молекул:

$$\begin{aligned} \frac{dr_i}{dt} &= v_i \\ m \frac{dv_i}{dt} &= \sum_{i \neq j}^N F(|r_i - r_j|). \end{aligned} \quad (4)$$

Обезразмеривание упрощает уравнения, позволяя работать с универсальными безразмерными параметрами:

- ϵ – глубина потенциальной ямы;
- σ – расстояние, на котором потенциал равен нулю;
- m – масса молекулы.

Введем безразмерные переменные на основе характерных масштабов системы:

- $r^* = \frac{r}{\sigma}$ – безразмерное расстояние;
- $t^* = \frac{t}{\sqrt{\frac{m\sigma^2}{\epsilon}}}$ – безразмерное время;
- $v^* = \frac{v}{\sqrt{\frac{m\sigma^2}{\epsilon}}}$ – безразмерная скорость;
- $F^* = \frac{F\sigma}{\epsilon}$ – безразмерные силы.

После замены исходные уравнения движения приводятся к виду:

$$\begin{aligned} \frac{dr_i^*}{dt^*} &= v_i^*, \\ \frac{dv_i^*}{dt^*} &= a_i^*, \end{aligned} \quad (5)$$

где $a_i^* = F_i^*$.

Начальные и граничные условия. Начальные координаты молекул равномерно распределяются внутри куба со стороной L , определяемой числом частиц и заданной плотностью. Начальные скорости формируются по нормальному распределению с нулевым средним и дисперсией v , при этом осуществляется корректировка для обнуления суммарного импульса системы.

Для снижения граничных эффектов применяются отражающие граничные условия, при выходе молекулы за границы куба ее координата отражается, а соответствующая компонента скорости меняет знак.

Численные методы интегрирования.

– Метод Рунге – Кутты 4-го порядка – высокоточный метод с локальной ошибкой $O(\Delta t^5)$. Новое значение функции считается так:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{\Delta t}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \quad (6)$$

где:

$$\begin{aligned} k_1 &= f(t_n; y_n) \\ k_2 &= f\left(t_n + \frac{\Delta t}{2}; y_n + \frac{\Delta t}{2} k_1\right) \\ k_3 &= f\left(t_n + \frac{\Delta t}{2}; y_n + \frac{\Delta t}{2} k_2\right) \\ k_4 &= f(t_n + \Delta t; y_n + \Delta t \cdot k_3) \end{aligned} \quad (7)$$

– Метод Верле – метод, сохраняющий энергию на длительных временах.

$$x_{n+1} = 2x_n - x_{n-1} + a_n \Delta t^2$$

$$v_n = \frac{x_{n+1} - x_{n-1}}{2dt} \quad (8)$$

Предполагает хранение координат с предыдущего шага.

– Скоростной метод Верле – модификация метода Верле с явным учетом скоростей.

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n + v_n dt + \frac{1}{2} a_n dt^2 \\ v_{n+1} &= v_n + \frac{1}{2} (a_n + a_{n+1}) dt \end{aligned} \quad (9)$$

– Метод с перескоками (leapfrog) разделяет обновление координат и скоростей на полушагах.

$$\begin{aligned} v_{n+\frac{1}{2}} &= v_n + \frac{1}{2} a_n dt \\ x_{n+1} &= x_n + v_{n+\frac{1}{2}} dt \\ v_{n+1} &= v_{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} a_{n+1} dt \end{aligned} \quad (10)$$

– Метод Бимана – Шофилда использует информацию о силах на предыдущем шаге для повышения точности.

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n + v_n dt + \frac{dt^2}{6} (4a_n - a_{n-1}) \\ v_{n+1} &= v_n + \frac{dt}{6} (2a_{n+1} + 5a_n - a_{n-1}) \end{aligned} \quad (11)$$

Предусматривает использование ускорений, вычисленных на предыдущем шаге моделирования.

– Предиктор-корректор – предсказывает состояние системы и корректирует его на основе новых вычислений сил.

$$\begin{aligned} x_{n+1}^p &= x_n + v_n dt + \frac{1}{2} a_n dt^2 \\ v_{n+1}^p &= v_n + a_n dt \\ x_{n+1} &= x_n + v_n dt + \frac{1}{2} a_{n+1}^p dt^2 \\ v_{n+1} &= v_n + \frac{1}{2} (a_n + a_{n+1}^p) dt \end{aligned} \quad (12)$$

Для методов Верле и с перескоками (leapfrog) критически важно отслеживать сохранение полной энергии системы на протяжении всего моделирования. Это позволяет оценить корректность численного интегрирования и устойчивость симуляции. Тем не менее в рамках данной работы контроль энергии не осуществлялся.

Для сравнения методов вычисляется среднеквадратичная ошибка (MSE) позиций молекул относительно эталонного метода (выбираемого пользователем). Накопленная MSE усредняется по всем шагам моделирования для оценки долговременной стабильности методов.

Для объективной оценки точности и производительности методов интегрирования уравнений движения в молекулярной динамике была разработана специализированная программа на C++. Программа реализует следующие ключевые функции:

- генерация начальных условий (с заданной плотностью);
- генерация начальных скоростей по нормальному распределению с последующей коррекцией для обнуления общего импульса системы;
- интеграция траекторий шестью различными методами;
- вычисление среднеквадратичной ошибки (MSE) позиций молекул относительно эталонного решения;
- возможность рассматривать модель пошагово.

Разработанная программа реализует уникальную схему сравнения, при которой все методы интегрирования выполняются параллельно на идентичных начальных условиях с синхронизацией на каждом шаге моделирования. Все методы интегрирования запускаются с одинаковыми начальными условиями, что обеспечивает корректность сравнения. Пользователь может выбрать любой из реализованных методов в качестве эталонного для расчета MSE. По умолчанию установлен метод Рунге – Кутты 4-го порядка как теоретически наиболее точный. Внешний вид программы представлен на рисунке 1.

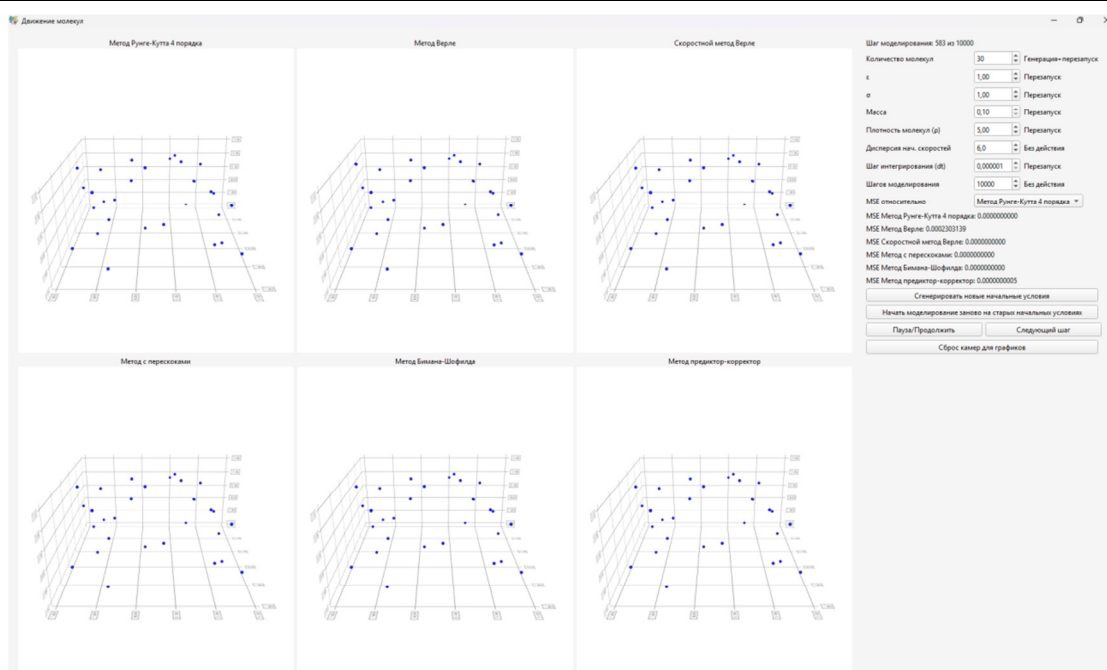


Рис 1. Внешний вид программы

Была выполнена серия экспериментов с использованием различных эталонных методов. Результаты моделирования после 10 000 шагов при различных начальных условиях представлены в табл. 1–10. Табл. 1–3 содержат сравнение в зависимости от числа молекул, табл. 4–6 – от значения параметра ϵ , табл. 7–8 – от значения σ , а табл. 9–10 – от массы молекул m .

Таблица 1

**10 молекул, 10^{-6} , дисперсия начальных скоростей молекул 6 усл. ед.,
плотность 5 молекул/усл. ед.³, $\epsilon = \sigma = 1$, масса каждой молекулы 0,1 усл. ед.**

Эталонный метод	Рунге – Кутты 4	Верле	Скоростной Верле	С перескоками	Бимана – Шофилда	Предиктор-корректор	Среднее MSE
Рунге – Кутты 4	–	3.3100360638	2.2898682149	2.1232286169	2.2869681771	2.3140359918	2.4648274129
Верле	3.3100360638	–	3.0844523786	3.3020672680	3.4195531569	2.9295180608	3.2091253856
Скоростной Верле	2.2898682149	3.0844523786	–	1.5810178947	2.0636582703	2.3913571445	2.2820707806
С перескоками	2.1232286169	3.3020672680	1.5810178947	–	1.8999596196	2.3642910427	2.2541128884
Бимана – Шофилда	2.2869681771	3.4195531569	2.0636582703	1.8999596196	–	2.2234322803	2.3787143008
Предиктор-корректор	2.3140359918	2.9295180608	2.3913571445	2.3642910427	2.2234322803	–	2.4445269040

Для следующего эксперимента количество молекул увеличено до 30. Начальные координаты и скорости сгенерированы заново при сохранении остальных параметров моделирования.

Таблица 2

**30 молекул, 10^{-6} , дисперсия начальных скоростей молекул 6 усл. ед.,
5 молекул/усл. ед.³, $\epsilon = \sigma = 1$, масса каждой молекулы 0,1 усл. ед.**

Эталонный метод	Рунге – Кутты 4	Верле	Скоростной Верле	С перескоками	Бимана – Шофилда	Предиктор-корректор	Среднее MSE
Рунге – Кутты 4	–	5.5670535546	4.4656635893	4.5755111600	4.6260248227	4.6189603152	4.7706426884
Верле	5.5670535546	–	5.2017358280	5.3256159362	5.4409951064	5.5711764325	5.4213153715
Скоростной Верле	4.4656635893	5.2017358280	–	3.4284989854	3.7861826213	4.4701769800	4.2704516008
С перескоками	4.5755111600	5.3256159362	3.4284989854	–	3.7957480494	4.6320376606	4.3514823583
Бимана – Шофилда	4.6260248227	5.4409951064	3.7861826213	3.7957480494	–	4.5982169319	4.4494335063
Предиктор-корректор	4.6189603152	5.5711764325	4.4701769800	4.6320376606	4.5982169319	–	4.7781136640

Для следующего эксперимента количество молекул увеличено до 50. Начальные условия пересозданы при тех же параметрах плотности, массы и дисперсии скоростей.

Таблица 3

**50 молекул, 10^{-6} , дисперсия начальных скоростей молекул 6 усл. ед.,
плотность 5 молекул/усл. ед³, $\varepsilon = \sigma = 1$, масса каждой молекулы 0,1 усл. ед.**

Эталонный метод	Рунге – Кутты 4	Верле	Скоростной Верле	С перескоками	Бимана – Шофилда	Предиктор–корректор	Среднее MSE
Рунге – Кутты 4	–	6.1084328822	3.6532622098	3.7112421236	3.6787085636	4.1723742859	4.2648040130
Верле	6.1084328822	–	5.3969655978	5.3433050948	5.2802530556	6.2756380319	5.6809189325
Скоростной Верле	3.6532622098	5.3969655978	–	2.4553632812	1.8414772796	4.2612499987	3.5216636734
С перескоками	3.7112421236	5.3433050948	2.4553632812	–	2.3943194711	4.1448541042	3.6098168150
Бимана – Шофилда	3.6787085636	5.2802530556	1.8414772796	2.3943194711	–	4.3427835882	3.5075083916
Предиктор–корректор	4.1723742859	6.2756380319	4.2612499987	4.1448541042	4.3427835882	–	4.6393800018

Увеличение числа молекул сопровождается ростом среднеквадратичной ошибки, что обусловлено как усилением численных флуктуаций, так и спецификой генерации начальных скоростей. На следующем этапе исследования будет рассмотрено влияние иных параметров системы. В качестве отправной точки проанализируем случай при $\varepsilon = 1$. Начальные координаты и скорости молекул будут сгенерированы заново.

Таблица 4

**30 молекул, 10^{-6} , дисперсия начальных скоростей молекул 6 усл. ед.,
плотность 5 молекул/усл. ед³, $\varepsilon = \sigma = 1$, масса каждой молекулы 0,1 усл. ед.**

Эталонный метод	Рунге – Кутты 4	Верле	Скоростной Верле	С перескоками	Бимана – Шофилда	Предиктор–корректор	Среднее MSE
Рунге – Кутты 4	–	3.1990532090	3.5759952499	3.6211857614	3.7850295816	4.0540716264	3.6470670857
Верле	3.1990532090	–	3.2037773575	3.3550943961	3.3832351822	3.9686682791	3.4219656848
Скоростной Верле	3.5759952499	3.2037773575	–	1.0035557254	1.5586050111	3.4874009495	2.5658668587
С перескоками	3.6211857614	3.3550943961	1.0035557254	–	1.5896298901	3.7825449350	2.6704021416
Бимана – Шофилда	3.7850295816	3.3832351822	1.5586050111	1.5896298901	–	3.4180593449	2.7469118020
Предиктор–корректор	4.0540716264	3.9686682791	3.4874009495	3.7825449350	3.4180593449	–	3.7421490270

Несмотря на сохранение всех параметров системы, замена начальных координат и скоростей привела к заметным отличиям в значениях MSE (табл. 2 и 4).

Для следующего эксперимента увеличен с 1 до 10, при этом все остальные параметры системы сохранены такими же, как в условиях табл. 4.

Таблица 5

**30 молекул, 10^{-6} , дисперсия начальных скоростей молекул 6 усл. ед.,
плотность 5 молекул/усл. ед³, $\varepsilon = 10$, $\sigma = 1$, масса каждой молекулы 0,1 усл. ед.**

Эталонный метод	Рунге – Кутты 4	Верле	Скоростной Верле	С перескоками	Бимана – Шофилда	Предиктор–корректор	Среднее MSE
Рунге – Кутты 4	–	8.5058983354	5.8754341843	5.8194044050	6.0791595325	5.6840717857	6.3927936486
Верле	8.5058983354	–	8.1433108772	8.3214806736	8.3285875381	8.2290232755	8.3056601400
Скоростной Верле	5.8754341843	8.1433108772	–	5.2302866456	4.9555142900	5.9707435615	6.0350579117
С перескоками	5.8194044050	8.3214806736	5.2302866456	–	5.2033640739	6.0373216102	6.1223714817
Бимана – Шофилда	6.0791595325	8.3285875381	4.9555142900	5.2033640739	–	6.0626609824	6.1258572834
Предиктор–корректор	5.6840717857	8.2290232755	5.9707435615	6.0373216102	6.0626609824	–	6.3967642431

В следующем эксперименте параметр увеличен с 10 до 25 при сохранении остальных параметров системы.

Таблица 6

**30 молекул, 10^{-6} , дисперсия начальных скоростей молекул 6 усл. ед.,
плотность 5 молекул/усл. ед³, $\varepsilon = 25$, $\sigma = 1$, масса каждой молекулы 0,1 усл. ед.**

Эталонный метод	Рунге – Кутты 4	Верле	Скоростной Верле	С перескоками	Бимана – Шофилда	Предиктор–корректор	Среднее MSE
Рунге – Кутты 4	–	6.9066114255	6.0278915804	5.8972311989	5.9998667658	5.9527658393	6.1568733620
Верле	6.9066114255	–	6.9315803382	6.6211195207	6.7891036494	6.3351772189	6.7167184305
Скоростной Верле	6.0278915804	6.9315803382	–	5.6890279118	5.7247896620	5.8991396284	6.0544858242
С перескоками	5.8972311989	6.6211195207	5.6890279118	–	5.7476889905	6.0675351940	6.0045205632
Бимана – Шофилда	5.9998667658	6.7891036494	5.7247896620	5.7476889905	–	6.0445100948	6.0611918325
Предиктор–корректор	5.9527658393	6.3351772189	5.8991396284	6.0675351940	6.0445100948	–	6.0598255951

Далее исследуется влияние параметра σ . Для этого сгенерированы новые начальные условия.

Таблица 7

**30 молекул, 10^{-6} , дисперсия начальных скоростей молекул 6 усл. ед.,
плотность 5 молекул/усл. ед³, $\varepsilon = 1$, $\sigma = 2$, масса каждой молекулы 0,1 усл. ед.**

Эталонный метод	Рунге – Кутты 4	Верле	Скоростной Верле	С перескоками	Бимана – Шофилда	Предиктор–корректор	Среднее MSE
Рунге – Кутты 4	–	–	6.7671639325	6.6686417397	–	6.8114397659	6.7490818127
Верле	–	–	–	–	–	–	–
Скоростной Верле	6.7671639325	–	–	6.4335179508	–	6.9103614528	6.7036811120
С перескоками	6.6686417397	–	6.4335179508	–	–	6.5517369846	6.5512988917
Бимана – Шофилда	–	–	–	–	–	–	–
Предиктор–корректор	6.8114397659	–	6.9103614528	6.5517369846	–	–	6.7578460678

Для методов Верле и Бимана – Шофилда наблюдалась потеря численной устойчивости, сопровождаемая выходом молекул за границы расчетной области и возникновением неопределенных значений координат (NaN), что свидетельствует о расходимости интегрирования. Для следующего эксперимента значение параметра σ увеличено с 2 до 3 при сохранении всех остальных параметров системы неизменными.

Таблица 8

**30 молекул, 10^{-6} , дисперсия начальных скоростей молекул 6 усл. ед.,
плотность 5 молекул/усл. ед³, $\varepsilon = 1$, $\sigma = 3$, масса каждой молекулы 0,1 усл. ед.**

Эталонный метод	Рунге – Кутты 4	Верле	Скоростной Верле	С перескоками	Бимана – Шофилда	Предиктор–корректор	Среднее MSE
Рунге – Кутты 4	–	–	–	6.5101566040	–	6.8672520398	6.6887043219
Верле	–	–	–	–	–	–	–
Скоростной Верле	–	–	–	–	–	–	–
С перескоками	6.5101566040	–	–	–	–	6.8672520398	6.6887043219
Бимана – Шофилда	–	–	–	–	–	–	–
Предиктор–корректор	6.8672520398	–	–	6.9088849049	–	–	6.8880684724

Для методов Верле, скоростного Верле и Бимана – Шофилда наблюдалась потеря численной устойчивости, сопровождаемая выходом молекул за границы расчетной области и возникновением неопределенных значений координат (NaN), что свидетельствует о расходимости интегрирования. На следующем этапе проанализировано влияние массы молекул. Исходные условия были пересозданы для случая $m = 1$.

Таблица 9

**30 молекул, 10^{-6} , дисперсия начальных скоростей молекул 6 усл. ед.,
плотность 5 молекул/усл. ед³, $\epsilon = \sigma = 1$, масса каждой молекулы 1 усл. ед.**

Эталонный метод	Рунге – Кутты 4	Верле	Скоростной Верле	С перескоками	Бимана – Шофилда	Предиктор–корректор	Среднее MSE
Рунге – Кутты 4	–	6.6578740175	5.9967089301	5.9386020104	6.2436035527	5.5872538426	6.0848084707
Верле	6.6578740175	–	6.6669356028	6.6313928156	6.8513325130	6.7994525972	6.7213975092
Скоростной Верле	5.9967089301	6.6669356028	–	5.1158552613	5.2984983381	5.6601091850	5.7476214635
С перескоками	5.9386020104	6.6313928156	5.1158552613	–	5.1198747228	5.8947621433	5.7400973907
Бимана – Шофилда	6.2436035527	6.8513325130	5.2984983381	5.1198747228	–	5.9829873926	5.8992593038
Предиктор–корректор	5.5872538426	6.7994525972	5.6601091850	5.8947621433	5.9829873926	–	5.9849130321

Для следующего эксперимента масса молекул увеличена с до $m = 15$, начальные координаты и скорости пересозданы.

Таблица 10

**30 молекул, 10^{-6} , дисперсия начальных скоростей молекул 6 усл. ед.,
плотность 5 молекул/усл. ед³, $\epsilon = \sigma = 1$, масса каждой молекулы 15 усл. ед.**

Эталонный метод	Рунге – Кутты 4	Верле	Скоростной Верле	С перескоками	Бимана – Шофилда	Предиктор–корректор	Среднее MSE
Рунге – Кутты 4	–	2.8030149445	1.4089900628	1.4478930799	1.4102251782	1.9765881149	1.8093422761
Верле	2.8030149445	–	2.4761600045	2.6232408147	2.4936722658	2.8081993666	2.6408574792
Скоростной Верле	1.4089900628	2.4761600045	–	0.1471507998	0.0177859875	1.6880526030	1.1476278915
С перескоками	1.4478930799	2.6232408147	0.1471507998	–	0.1629010689	1.7279904666	1.2218352460
Бимана – Шофилда	1.4102251782	2.4936722658	0.0177859875	0.1629010689	–	1.6696181637	1.1508405328
Предиктор–корректор	1.9765881149	2.8081993666	1.6880526030	1.7279904666	1.6696181637	–	1.9740897430

Результаты и обсуждение. Проведен ряд вычислительных экспериментов для оценки влияния параметров системы на точность алгоритмов. Рассмотрены системы из $N = 10, 30$ и 50 молекул при различных значениях плотности и параметров потенциала Леннарда-Джонса (ϵ, σ), а также разные массы молекул.

С увеличением числа молекул наблюдается рост накопленной ошибки интегрирования у всех методов из-за усиления численных погрешностей. При $N = 10$ все интеграторы демонстрируют относительно низкую MSE, однако уже при $N = 30$ наблюдается ее существенный рост. Методы с перескоками (leapfrog), скоростной Верле и Бимана – Шофилда показывают наименьшую MSE при любом N , тогда как стандартный метод Верле дает значительно большие ошибки. Это свидетельствует о лучшей стабильности модифицированных алгоритмов по сравнению с классическим методом Верле. Метод Рунге – Кутты 4-го порядка остается численно устойчивым во всех экспериментах, но его относительное преимущество по точности уменьшается при росте N .

При увеличении глубины потенциальной ямы ϵ среднеквадратичная ошибка также возрастает для всех методов. Особенно заметен рост MSE у алгоритмов Верле и предиктор-корректора, тогда как методы с перескоками (leapfrog) и скоростной Верле сохраняют относительно низкие ошибки даже при больших ϵ . Метод Рунге – Кутты 4-го порядка остается стабильным при увеличении ϵ , однако начинает уступать модифицированным методам по точности на сильных взаимодействиях.

При увеличении характерного расстояния σ система становится численно более жесткой, что приводит к неустойчивости некоторых методов. Так, стандартные схемы Верле, скоростной метод Верле и метод Бимана – Шофилда при больших σ приводят к расходимости расчета (возникают NaN-значения), тогда как методы с перескоками (leapfrog) и предиктор-корректор остаются работоспособными. Это говорит о более высокой устойчивости этих алгоритмов при экстремальных значениях параметров потенциала.

Увеличение массы частиц от 1 до 15 приводит к уменьшению MSE у всех методов за счет замедления динамики системы. Особенно ярко это проявляется для скоростного метода Верле и метода Бимана – Шофилда, у которых ошибки значительно падают при большей массе. При высоких массах преимущество в точности сохраняют методы скоростной Верле, с перескоками (leapfrog) и Бимана – Шофилда, демонстрируя наименьшие ошибки.

Таким образом, наиболее точными и устойчивыми методами среди рассмотренных оказались скоростной Верле, метод с перескоками (leapfrog) и метод Бимана – Шофилда, тогда как классический алгоритм Верле проявил наибольшую чувствительность и численную неустойчивость к изменению параметров системы. Метод Рунге – Кутты 4-го порядка показал надежную устойчивость при всех тестах, однако уступает модифицированным методам по точности в долгосрочных симуляциях.

Выводы. Зависимость от числа частиц. При увеличении числа молекул N наблюдается устойчивый рост накопленной ошибки интегрирования у всех методов. Это связано с усилением численных погрешностей и влиянием случайных начальных условий. Методы с перескоками (leapfrog), скоростной Верле и Бимана – Шофилда демонстрируют наименьшую MSE при любом N , тогда как стандартный алгоритм Верле оказывается наиболее чувствительным к росту размера системы. Метод Рунге – Кутты 4-го порядка остается численно устойчивым, но его относительное преимущество по точности уменьшается при больших N .

Влияние глубины потенциальной ямы ϵ . С возрастанием ϵ среднеквадратичная ошибка увеличивается у всех методов, что особенно заметно у алгоритмов Верле и предиктор-корректора. Наиболее низкую MSE вновь демонстрируют методы с перескоками (leapfrog) и скоростной Верле, тогда как метод Рунге – Кутты 4-го порядка, хоть и устойчив, уступает им по точности при сильном взаимодействии.

Влияние характерного расстояния σ . При увеличении σ система становится численно жесткой, что приводит к расходимости некоторых алгоритмов. Методы Верле, скоростной Верле и Бимана – Шофилда дали сбой (возникали NaN-значения), что свидетельствует о потере устойчивости. При этом методы с перескоками (leapfrog) и предиктор-корректор сохранили работоспособность, оставаясь стабильными при больших σ .

Влияние массы молекул m . Рост массы частиц приводит к общему снижению MSE у всех алгоритмов за счет замедления динамики системы. Наибольшее уменьшение ошибок наблюдается у скоростного метода Верле и метода Бимана – Шофилда, что дополнительно подтверждает их эффективность. Преимущество по точности при больших m сохраняют методы скоростной Верле, с перескоками (leapfrog) и Бимана – Шофилда.

В целом методы скоростной Верле, с перескоками (leapfrog) и Бимана – Шофилда признаны наиболее точными и устойчивыми для широкого диапазона условий моделирования. Классический алгоритм Верле продемонстрировал наибольшую чувствительность к изменениям параметров и численную неустойчивость. Метод Рунге – Кутты 4-го порядка оказался устойчивым во всех испытаниях, однако его точность может уступать модифицированным алгоритмам при длительном интегрировании.

Список литературы

1. Аксенова Е. В., Кшевцевский М. С. Вычислительные методы исследования молекулярной динамики : учеб.-метод. пособие. СПб. : СПбГУ, 2009. 50 с.
2. Калиткин Н. Н. Численные методы : учеб. для вузов. 3-е изд., испр. и доп. М. : Наука, 2011. 512 с.
3. Селезнев А. А. Основы метода молекулярной динамики : учеб.-метод. пособие. Саров : СарФТИ, 2017. 72 с.
4. Кураев А. А., Трубецков Д. И. Методы нелинейной динамики и теории хаоса в задачах электроники сверхвысоких частот. Т. 1: Стационарные процессы. М. : Физматлит, 2009. 288 с.
5. Гулд Дж., Тобочник В. Вычислительная физика : учеб. М. : Мир, 1989. 592 с.
6. Хеерман Д. В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике / пер. с англ. ; под ред. С. А. Ахманова. М. : Наука, 1990. 432 с.
7. Bishop C. M. Pattern Recognition and Machine Learning. N. Y. : Springer, 2006. 738 p.

Comparison of computational methods of molecular dynamics

Chuprakov Pavel Grigorievich¹, Kabanov Egor Andreevich²,
Gavrilentsov Alexey Evgenievich³

¹PhD in Biological Sciences, associate professor of the Department of Applied Mathematics and Computer Science, Vyatka State University. Russia, Kirov. E-mail: email@gmail.com

²student in the field of Applied Mathematics and Computer Science, Vyatka State University. Russia, Kirov. E-mail: sergeyrootuser@gmail.com

³student in the field of Applied Mathematics and Computer Science, Vyatka State University. Russia, Kirov. E-mail: Alekseygavr01082004@gmail.com

Abstract. The relevance of the research is determined by the widespread demand for molecular dynamics for modeling processes at the atomic level, where the choice of a numerical integration method significantly affects the accuracy and stability of the results. The purpose of the study is a comparative analysis of various numerical integra-

tion methods in molecular dynamics implemented in C++ with a single interface. A single software platform has been developed for generating initial conditions, integrating the system using the same methods, and evaluating accuracy by the root-mean-square error. The work includes a theoretical analysis of algorithms and their numerical verification on a model problem with the potential Lennard-Jones. The method Runge-Kutta 4th order [2], the classical Verlet algorithm [3], the high-speed Verlet [3], the leapfrog method [4], the Beeman-Schofield method [5] and the predictor corrector [6] was considered for the study. The main results demonstrate that the Werle modifications and the Beeman-Schofield method provide the lowest mean square error (MSE [7]) and high numerical stability for various modeling parameters, while the standard Verlet algorithm is most sensitive to error accumulation. The data obtained can be used to optimize computational experiments in problems of solid state physics, chemistry, materials science, and biomolecular research.

Keywords: molecular dynamics; numerical integration methods; algorithm stability; root-mean-square error; simulation of atomic systems; computational experiment.

References

1. Aksenova E. V., Kshevetsky M. S. *Vychislitel'nye metody issledovaniya molekulyarnoy dinamiki : ucheb.-metod. posobie* [Computational Methods for the Study of Molecular Dynamics : educational and methodical manual]. SPb., St. Petersburg State University. 2009. 50 p.
2. Kalitkin N. N. *Chislennyye metody : ucheb. dlya vuzov* [Numerical Methods : textbook for universities]. 3rd ed., revised and expanded. M., Nauka (Science). 2011. 512 p.
3. Seleznev A. A. *Osnovy metoda molekulyarnoy dinamiki : ucheb.-metod. posobie* [Fundamentals of the Molecular Dynamics Method : educational and methodical manual]. Sarov, SarFTI. 2017. 72 p.
4. Kuraev A. A., Trubetskov D. I. *Metody nelinejnoj dinamiki i teorii haosa v zadachah elektroniki sverkhvysokih chastot* [Methods of Nonlinear Dynamics and Chaos Theory in Microwave Electronics Problems]. Vol. 1: Stationary Processes. M., Fizmatlit. 2009. 288 p.
5. Gould J., Tobochnik V. *Vychislitel'naya fizika : ucheb* [Computational Physics : textbook]. M., Mir (World). 1989. 592 p.
6. Heermann D. W. *Metody komp'yuternogo eksperimenta v teoreticheskoy fizike* [Computer Simulation Methods in Theoretical Physics] / transl. from English; ed. by S. A. Akhmanov. M., Nauka (Science). 1990. 432 p.
7. Bishop C. M. *Pattern Recognition and Machine Learning*. N. Y. : Springer, 2006. 738 p.

Поступила в редакцию: 15.07.2025

Принята к публикации: 30.09.2025