

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ И ОСНОВЫ ИХ РЕАЛИЗАЦИИ

УДК: 519.21

Анализ упрощения разностных схем для уравнения Ланжевена, влияние учета корреляции приращений

Д. А. Турченков^{1,а}, М. А. Турченков^{2,б}

¹Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ,
Россия, 115409, г. Москва, Каширское ш., д. 31

²Научно-исследовательский центр БиоСим,
Россия, 115211, г. Москва, Каширское ш., д. 55

E-mail: ^а 08Jimmy91@gmail.com, ^б biosim.rg@gmail.com

Получено 9 апреля 2012 г.,
после доработки 17 апреля 2012 г.

Исследованы пути упрощения разностных схем интегрирования уравнения Ланжевена варьированием коэффициента корреляции приращений. Для семейства численных методов получено общее аналитическое выражение для координаты и скорости. Показано, что асимптотическое значение среднего квадрата скорости для ряда разностных схем зависит от размера шага. Оценивается область применимости численных методов, а также соотношение между порядками сходимости. Выявлено, что без точного учета скоррелированности приращений разностная схема, построенная на точном решении, имеет ошибку, сравнимую с методами первого порядка.

Ключевые слова: диффузия, уравнение Ланжевена, стохастические дифференциальные уравнения, корреляция, порядок сходимости

Analysis of simplifications of numerical schemes for Langevin equation, effect of variations in the correlation of augmentations

Д. А. Турченков¹, М. А. Турченков²

¹National Research Nuclear University MEPhI, 31 Kashirskoe shosse, Moscow, 115409, Russia

²BioSim Research Group, 55 Kashirskoe shosse, Moscow, 115211, Russia

Abstract. — The possibility to simplify the integration of Langevin equation using the variation of correlation between augmentation was researched. The analytical expression for a set of numerical schemes is presented. It's shown that asymptotic limits for squared velocity depend on step size. The region of convergence and the convergence orders were estimated. It turned out that the incorrect correlation between increments decrease the accuracy down to the level of first-order methods for schemes based on precise solution.

Keywords: diffusion, Langevin equation, stochastic differential equations, correlation, convergence order

Citation: Computer Research and Modeling, 2012, vol. 4, no. 2, pp. 325–338 (Russian).

Введение

Уравнение Ланжевена находит широкое применение в компьютерном моделировании благодаря эффективному уменьшению числа частиц [Zwanzig, 2001]. Много внимания уделяется численным схемам решения [Kloeden, Platen, 1992; Лукшин, Смирнов, 1990]. Методы интегрирования стохастических уравнений являются прямыми наследниками методов интегрирования обычных систем дифференциальных уравнений, однако вместе с тем они обладают особенностями, связанными со стохастической природой. В частности, речь идет о статистической ковариации случайных величин, фигурирующих в разностной схеме решения системы СДУ, а также существовании дисперсии значения в определенный момент времени даже для точного решения.

Исторически сложилось так, что уравнение Ланжевена интегрировалось методами, применимыми лишь на довольно плотной сетке с размером шага $\Delta t \ll \frac{1}{\gamma}$, т. е. для шага намного меньшего, чем время свободного пробега броуновской частицы [Turq et al., 1977]. Это приводило к тому, что для реальных систем моделирование существенной эволюции могло занять много времени. Впоследствии появились методы, выходящие за рамки указанного ограничения [Gunsteren, Berendsen, 1982]. В то же время существование аналитического решения [Chandrasekhar, 1943] позволяет строить точные разностные схемы на его основе.

Серьезной сложностью в численном интегрировании уравнения Ланжевена является необходимость генерации большого числа случайных величин [Phillips et al., 2011] [Жмурев, Барсегов, 2011], скоррелированных определенным образом [Allen, Tildesley, 1989]. Изменение коэффициента корреляции приращений в разностной схеме — один из путей уменьшения затратности вычислений.

В данной статье численные методы рассмотрены с точки зрения учета скоррелированности приращений и сравниваются с точным аналитическим решением. В разделе 2 приводится точное решение и его свойства, предложены упрощения. В разделе 3 выводится общий аналитический вид для определенного класса линейных разностных схем. В разделе 4 на основе полученных выражений анализируется точность методов, на основе выражения для ошибки среднего и ошибки дисперсии оценивается порядок сходимости, определена применимость упрощений. В разделе 5 приведены основные результаты. В приложении представлены аналитические выражения для рассмотренных разностных схем, а также вспомогательные формулы.

Решение уравнения и его свойства

Запишем уравнение Ланжевена, внешние силы считаем равными нулю:

$$\ddot{x} = -\gamma \dot{x} + \sigma \xi(t). \quad (1)$$

Здесь γ — удельный коэффициент трения, имеющий также смысл частоты столкновений броуновской частицы с частицами раствора [Pastor et al., 1988], $\sigma \xi(t)$ — стохастическая часть удельной силы, равная произведению амплитуды σ на так называемый белый шум $\xi(t)$, обладающий следующими свойствами:

- Среднее по ансамблю частиц в произвольный момент времени равно нулю:

$$\langle \xi(t) \rangle = 0.$$

- Автокорреляционная функция белого шума есть дельта-функция Дирака [Balescu, 1975]

$$\langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle = \delta(t_1 - t_2).$$

На деле корреляция отлична от нуля для интервалов порядка длительности столкновения. Времена столкновения τ_s хоть и конечны, но намного меньше любых других характерных времен в системе, поэтому приближение дельта-функцией вполне уместно.

Из этих свойств и из вида уравнения (1) следует, что случайная составляющая силы нескоррелирована с прошлыми значениями скорости [March, Tosi, 1991]:

$$\langle \xi(t)\dot{x}(t-s) \rangle = 0, s > 0.$$

Уравнение (1) сводится заменой переменных к системе уравнений первого порядка:

$$\begin{aligned} dx &= vdt, \\ dv &= -\gamma vdt + \sigma dW(t), \end{aligned} \quad (2)$$

где $W(t)$ — винеровский процесс.

Точное аналитическое решение данной системы [Chandrasekhar, 1943]:

$$\begin{aligned} x(t) &= x_0 + \frac{(1 - e^{-t\gamma})v_0}{\gamma} + N_x \left(0, \frac{e^{-2t\gamma} (e^{2t\gamma} (2t\gamma - 3) + 4e^{t\gamma} - 1) \sigma^2}{2\gamma^3} \right), \\ v(t) &= e^{-t\gamma} v_0 + N_v \left(0, \frac{(1 - e^{-2t\gamma}) \sigma^2}{2\gamma} \right). \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь $N(0, \sigma^2)$ — случайная величина, распределенная нормально со средним 0 и с дисперсией σ^2 .

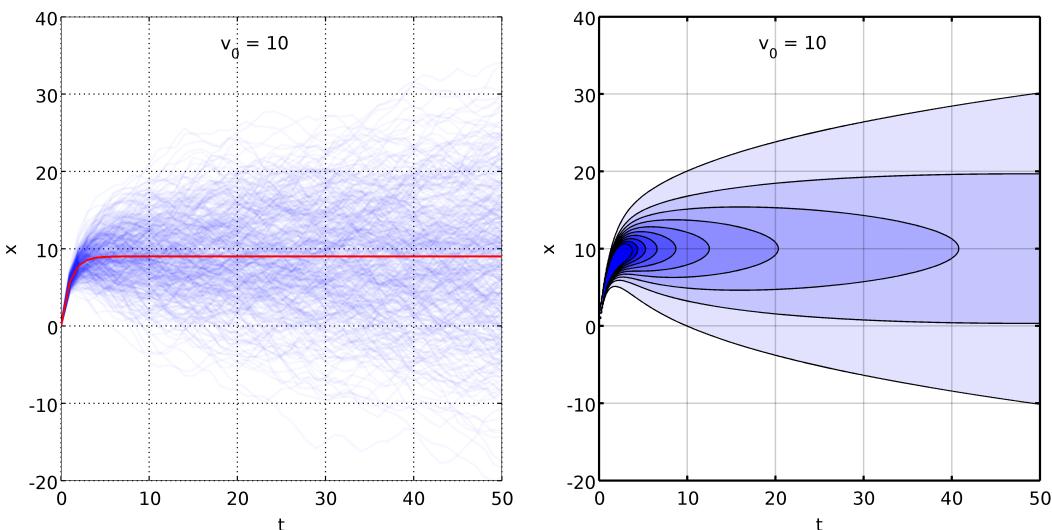


Рис. 1. Зависимость смещения от времени (слева), а также плотность распределения смещения (справа) для точного решения

На рисунке 1 на малых временах виден так называемый баллистический режим, характеризуемый линейной зависимостью смещения броуновской частицы от времени. Существование этого режима обусловлено тем, что самоподобный характер винеровского процесса на практике должен исчезнуть при уменьшении шага, так как иначе потребовались бы бесконечные импульсы силы. В последнее время баллистический режим удалось наблюдать непосредственно [Lukic, Jeney, 2005; Pusey, 2011]. На временах порядка $\frac{1}{\gamma}$ влияние начальной скорости пропадает, отсюда следует еще один смысл γ — это время автокорреляции скорости [Turq et al., 1977; Gunsteren, Berendsen, 1982].

Асимптотика среднего квадрата смещения имеет вид

$$\langle x(t)^2 \rangle \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{\sigma^2}{\gamma^2} t. \quad (4)$$

Коэффициент пропорциональности имеет физический смысл удвоенного коэффициента диффузии для одномерного случая.

Из общего вида уравнения (1) получается выражение для корреляции приращений [Pastor et al., 1988; Allen, Tildesley, 1989]:

$$\rho_{corr}(t) = \frac{e^{\gamma(-t)} (e^{\gamma t} - 1)^2}{\sqrt{1 - e^{-2\gamma t}} \sqrt{e^{2\gamma t} (2\gamma t - 3) + 4e^{\gamma t} - 1}}. \quad (5)$$

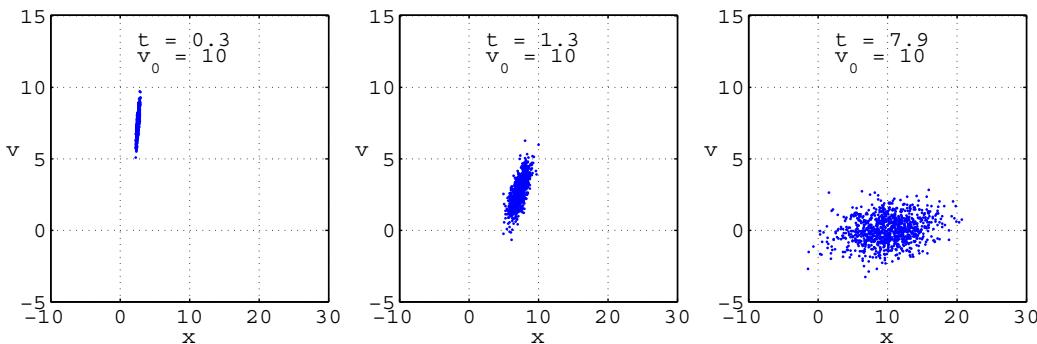


Рис. 2. График корреляции координаты и скорости в зависимости от времени

Как показано на рисунке 2, на малых временах скоррелированность приращения скорости и координаты высока, что и отвечает баллистическому режиму и сохранению скорости. На больших временах наблюдается диффузионный режим [Ermak, Buckholz, 1980], при котором скорость и координата становятся независимыми.

Изменением значения этой корреляции можно упростить разностную схему точного решения. Можно приравнять коэффициент корреляции нулю, это избавит от необходимости генерировать скоррелированные пары случайных величин и хранить первое сгенерированное значение для генерации второго. Этому варианту отвечает схема «no correlation». Также возможно приравнять коэффициент корреляции единице, это позволит уменьшить вдвое число генерируемых случайных величин. Этому варианту отвечает схема «full correlation». Далее исследуется влияние этих упрощений на ошибку схемы, основанной на точном решении. Для сравнения приведены некоторые известные схемы, в которых, как нетрудно убедиться, коэффициент корреляции равен единице.

Вывод аналитического выражения для разностных схем общего вида

В данной работе численные методы рассматриваются исходя из общего вида

$$\begin{pmatrix} x_k \\ v_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{k-1} \\ v_{k-1} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} N_x \\ N_v \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Может оказаться, что вектор случайных приращений координат и скорости на одном шаге $\mathbf{N} = \mathbf{q}_k - \mathbf{A}\mathbf{q}_{k-1}$, записанный напрямую из разностной схемы, имеет вид $\mathbf{B}\tilde{\mathbf{N}}$, где \mathbf{B} — матрица

размерности $2 \times m$, $\tilde{\mathbf{N}}$ — столбец из m независимых случайных величин и m зависит от сложности метода. Договоримся в таком случае представлять эти приращения в виде вектора двух случайных величин с коэффициентом корреляции ρ , используя формулу (15) приложения А. Также предполагается, что все коэффициенты перед итоговыми приращениями отнесены к дисперсии по формуле $c \cdot N(\mu, \sigma^2) = N(\mu, c^2 \cdot \sigma^2)$.

Применяя рекуррентную формулу (6), получим

$$\begin{aligned} x_k &= A^k_{11}q_0 + A^k_{12}v_0 + A^{k-1}_{11}N_x + A^{k-1}_{12}N_v + \dots + N_x + 0N_v, \\ v_k &= A^k_{21}q_0 + A^k_{22}v_0 + A^{k-1}_{21}N_x + A^{k-1}_{22}N_v + \dots + 0N_x + N_v. \end{aligned} \quad (7)$$

Просуммируем случайные приращения на каждом шаге как независимые величины:

$$\begin{aligned} A^{k-1}_{11}N_x + A^{k-1}_{12}N_v + \dots + N_x + 0N_v &\sim \sqrt{\sum_{i=0}^{k-1} A_{11}^i {}^2 \widetilde{N}_x} + \sqrt{\sum_{i=0}^{k-1} A_{12}^i {}^2 \widetilde{N}_v}, \\ A^{k-1}_{21}N_x + A^{k-1}_{22}N_v + \dots + 0N_x + N_v &\sim \sqrt{\sum_{i=0}^{k-1} A_{21}^i {}^2 \widetilde{N}_x} + \sqrt{\sum_{i=0}^{k-1} A_{22}^i {}^2 \widetilde{N}_v}. \end{aligned} \quad (8)$$

Обратим внимание, что знак равенства не используется, так как речь идет об эквивалентности распределения случайной величины, а не о строгом тождестве. Тильды над случайными величинами обозначают, что коэффициент корреляции между ними изменился, так как складываются случайные величины N_x и N_v , которые коррелируют с коэффициентом ρ , хотя все остальные параметры, такие как среднее и дисперсия, остались прежними. Новый коэффициент корреляции между \widetilde{N}_x и \widetilde{N}_v вычисляется по формуле (15):

$$\widetilde{\rho} = \rho \frac{\sum_{i=0}^{k-1} A_{11}^i A_{12}^i}{\sqrt{\sum_{i=0}^{k-1} A_{11}^i {}^2} \sqrt{\sum_{i=0}^{k-1} A_{12}^i {}^2}}. \quad (9)$$

Все рассматриваемые методы имеют матрицу A вида:

$$\begin{pmatrix} 1 & \alpha \\ 0 & \beta \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Выражение для k -ой степени матрицы:

$$A^k = \begin{pmatrix} 1 & \frac{\alpha(\beta^k - 1)}{\beta - 1} \\ 0 & \beta^k \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Используя его, получим

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{k-1} A_{11}^i {}^2 &= k, \\ \sum_{i=0}^{k-1} A_{12}^i {}^2 &= \frac{\alpha^2}{(\beta - 1)^2} \left(\frac{\beta^2 - \beta^{2k}}{1 - \beta^2} - 2 \frac{\beta - \beta^k}{1 - \beta} + k - 1 \right), \\ \sum_{i=0}^{k-1} A_{21}^i {}^2 &= 0, \\ \sum_{i=0}^{k-1} A_{22}^i {}^2 &= \frac{1 - \beta^{2k}}{1 - \beta^2}. \end{aligned} \quad (12)$$

В итоге имеем выражения для координаты и скорости на k -ом шаге численного метода:

$$\begin{aligned} x_k &= x_0 + \frac{\alpha(\beta^k - 1)}{\beta - 1} v_0 + \sqrt{k} \widetilde{N}_x + \sqrt{\frac{\alpha^2}{(\beta - 1)^2} \left(\frac{\beta^2 - \beta^{2k}}{1 - \beta^2} - 2 \frac{\beta - \beta^k}{1 - \beta} + (k - 1) \right)} \widetilde{N}_v, \\ v_k &= \beta^k v_0 + \sqrt{\frac{\beta^k}{\beta^2 - 1}} \widetilde{N}_v. \end{aligned} \quad (13)$$

Выражение для корреляции случайных слагаемых в координате, согласно (9):

$$\tilde{\rho} = \rho \frac{\left(\frac{\beta - \beta^k}{1 - \beta} - (k - 1) \right)}{\sqrt{k} \sqrt{\left(\frac{\beta^2 - \beta^{2k}}{1 - \beta^2} - 2 \frac{\beta - \beta^k}{1 - \beta} + (k - 1) \right)}}. \quad (14)$$

Правильный учет этой корреляции нужен для получения аналитического выражения для x_k^2 .

Параметры разностных схем, согласно (6) и (10), можно представить в виде таблицы:

Таблица 1. Параметры численных методов

Метод	α	β	$\sigma_{\Delta x}^2$	$\sigma_{\Delta v}^2$	ρ_{corr}
precise	$\frac{1 - e^{-\gamma \Delta t}}{\gamma}$	$e^{-\gamma \Delta t}$	$\frac{\sigma^2 (\gamma \Delta t - \frac{1}{2} e^{-2\gamma \Delta t} + 2e^{-\gamma \Delta t} - \frac{3}{2})}{\gamma^3}$	$\frac{\sigma^2 (1 - e^{-2\gamma \Delta t})}{2\gamma}$	$\rho_{\text{corr}}(\Delta t)$
Euler [Burrage et al., 2007]	Δt	$1 - \gamma \Delta t$	0	$\Delta t \sigma^2$	1
Heun [Burrage et al., 2007]	$\Delta t \left(1 - \frac{\gamma \Delta t}{2}\right)$	$\frac{\gamma^2 \Delta t^2}{2} - \gamma \Delta t + 1$	$\frac{\Delta t^3 \sigma^2}{4}$	$\Delta t \sigma^2 \left(1 - \frac{\gamma \Delta t}{2}\right)^2$	1
implicit midpoint [Burrage et al., 2007]	$\frac{\Delta t}{\frac{\gamma \Delta t}{2} + 1}$	$1 - \frac{\gamma \Delta t}{\frac{\gamma \Delta t}{2} + 1}$	$\frac{\Delta t^3 \sigma^2}{(\gamma \Delta t + 2)^2}$	$\frac{4 \Delta t \sigma^2}{(\gamma \Delta t + 2)^2}$	1
no correlation	$\frac{1 - e^{-\gamma \Delta t}}{\gamma}$	$e^{-\gamma \Delta t}$	$\frac{\sigma^2 (\gamma \Delta t - \frac{1}{2} e^{-2\gamma \Delta t} + 2e^{-\gamma \Delta t} - \frac{3}{2})}{\gamma^3}$	$\frac{\sigma^2 (1 - e^{-2\gamma \Delta t})}{2\gamma}$	0
full correlation	$\frac{1 - e^{-\gamma \Delta t}}{\gamma}$	$e^{-\gamma \Delta t}$	$\frac{\sigma^2 (\gamma \Delta t - \frac{1}{2} e^{-2\gamma \Delta t} + 2e^{-\gamma \Delta t} - \frac{3}{2})}{\gamma^3}$	$\frac{\sigma^2 (1 - e^{-2\gamma \Delta t})}{2\gamma}$	1

Методы «Euler», «Heun», «implicit midpoint» предполагают полную скоррелированность приращений координаты и скорости на каждом итерационном шаге, тогда как точный метод предполагает корреляцию согласно выражению (5). Метод «no correlation» представляет собой аналог точного метода, в котором пренебрегается скоррелированностью приращений координаты и скорости. Метод «full correlation» предполагает полную скоррелированность приращений.

Аналитические выражения для величин x_k и v_k , полученные на основе этих данных, приведены в приложении В.

Анализ методов

На основании данных таблицы 2 можно заключить, что асимптотика среднего квадрата смещения соответствует точному выражению (4), но если в точной разностной схеме не учитывать (no correlation) либо завышать (full correlation) скоррелированность приращений, то эффективный коэффициент диффузии отличается от точного.

Для методов «Euler» и «Heun» асимптотика среднего квадрата скорости зависит от временного шага. На практике это приводит к отклонению от точной температуры термостата Ланжевена.

Отметим, что методы оценки численных схем интегрирования стохастических уравнений аналогичны таковым для обыкновенных уравнений, однако в связи со стохастической природой

Таблица 2. Асимптотики численных методов. Приведенные значения относятся к пределам применимости метода

Метод	$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{x_k^2}{k\Delta t}$	v^2_∞
precise	$a_{pr} = \sigma^2 / \gamma^2$	$b_{pr} = \sigma^2 / 2\gamma$
Euler	a_{pr}	$b_{pr} \frac{1}{(1-\gamma\Delta t/2)}$
Heun	a_{pr}	$\frac{\sigma^2(2-\gamma\Delta t)}{\gamma(\gamma^2\Delta t^2 - 2\gamma\Delta t + 4)}$
implicit midpoint	a_{pr}	b_{pr}
no correlation	$a_{pr} \cdot (1 - (\gamma\Delta t))$ при $\gamma\Delta t \rightarrow 0$	b_{pr}
full correlation	$a_{pr} \cdot (1 + \frac{(2\sqrt{3}-3)}{3}(\gamma\Delta t))$ при $\gamma\Delta t \rightarrow 0$	b_{pr}

уравнений возникает своя специфика. Так как даже у точного решения, помимо среднего значения, существует ненулевая дисперсия, то график относительной ошибки среднего следует дополнить графиком относительной ошибки дисперсии. В работе [Ciccotti, Hoover, 1986] рассмотрен ряд численных методов для ОДУ, а для определения степени сходимости показано отклонение так называемый «энергии» (суммы квадратов координаты и скорости) от постоянного значения, а также среднеквадратичный разброс энергии. В данной статье для анализа степени сходимости методов СДУ выбрана относительная ошибка $\langle x_k^2 \rangle$ и $\langle v_k^2 \rangle$ по сравнению с точным решением, а также относительная ошибка величин $\sigma_{x_k^2}$ и $\sigma_{v_k^2}$.

Ниже приведена зависимость ряда точностных характеристик разностных схем от размера шага, начиная с долей времени свободного пробега и заканчивая кратными величинами $\frac{1}{\gamma}$ для оценки границ применимости методов. Значение $\Delta t \cdot k = T$ предполагается постоянным, время T выбрано как $10 \cdot \frac{1}{\gamma}$.

Методы «no correlation» и «full correlation» отвечают точному решению для величин x , v , v^2 , σ_v и σ_{v^2} , поэтому на соответствующих графиках не показаны.

Из графиков на рисунке 4 видно, что соотношения между точностью методов первого и больших порядков СДУ аналогичны таковым для ОДУ, приведенным в работе [Ciccotti, Hoover, 1986].

Обратим внимание, что хотя методы «no correlation» и «full correlation» был получены на основании абсолютно точной разностной схемы,искажение реального коэффициента корреляции приращений скорости и координаты приводит к тому, что методы имеют ошибку, сравнимую с ошибкой методов первого порядка. Для размера шага $\Delta t > \frac{1}{\gamma}$ ошибка метода «no correlation» начинает уменьшаться. Это связано с тем, что коэффициент корреляции приращений на больших временах стремится к нулю, и пренебрежение корреляцией становится оправданным.

На рисунке 3 хорошо видна область применимости рассмотренных методов. Точность метода implicit midpoint остается высокой для $\gamma\Delta t = 2$, в то время как ошибка методов «Euler», «Heun» для $\gamma\Delta t = 1$ может быть неприемлемой для вычисления скорости, но в то же время годится для координаты.

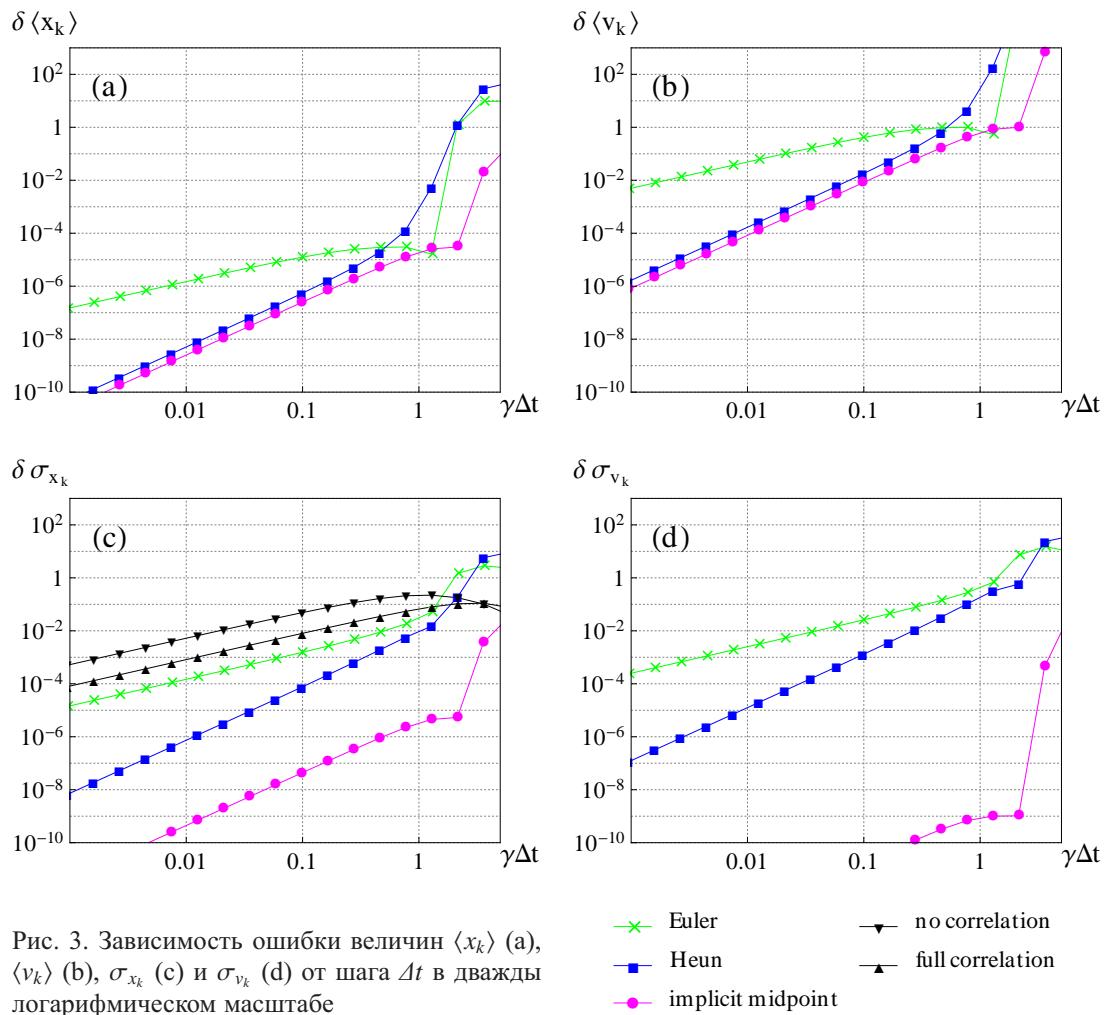


Рис. 3. Зависимость ошибки величин $\langle x_k \rangle$ (а), $\langle v_k \rangle$ (б), σ_{x_k} (с) и σ_{v_k} (д) от шага Δt в дважды логарифмическом масштабе

Таблица 3. Порядки сходимости численных методов. Приведенные значения относятся к пределам применимости метода

Метод	Порядок сходимости метода				
	Экспериментальный для СДУ				Теоретический для ОДУ [Süli, Mayers, 2003]
	$\langle x \rangle$	$\langle x^2 \rangle$	$\langle v \rangle$	$\langle v^2 \rangle$	
Euler	0.96	1.00	0.96	1.01	1
Heun	2.02	2.01	2.02	2.01	2
implicit midpoint	2.00	2.00	2.00	2.00	2
no correlation	точн.	1.00	точн.	точн.	не имеет аналогов
full correlation	точн.	1.00	точн.	точн.	не имеет аналогов

Из таблицы 3 видно, что соотношения между порядками сходимости методов сохраняются при переходе от обычных дифференциальных уравнений к стохастическим. Также видно,

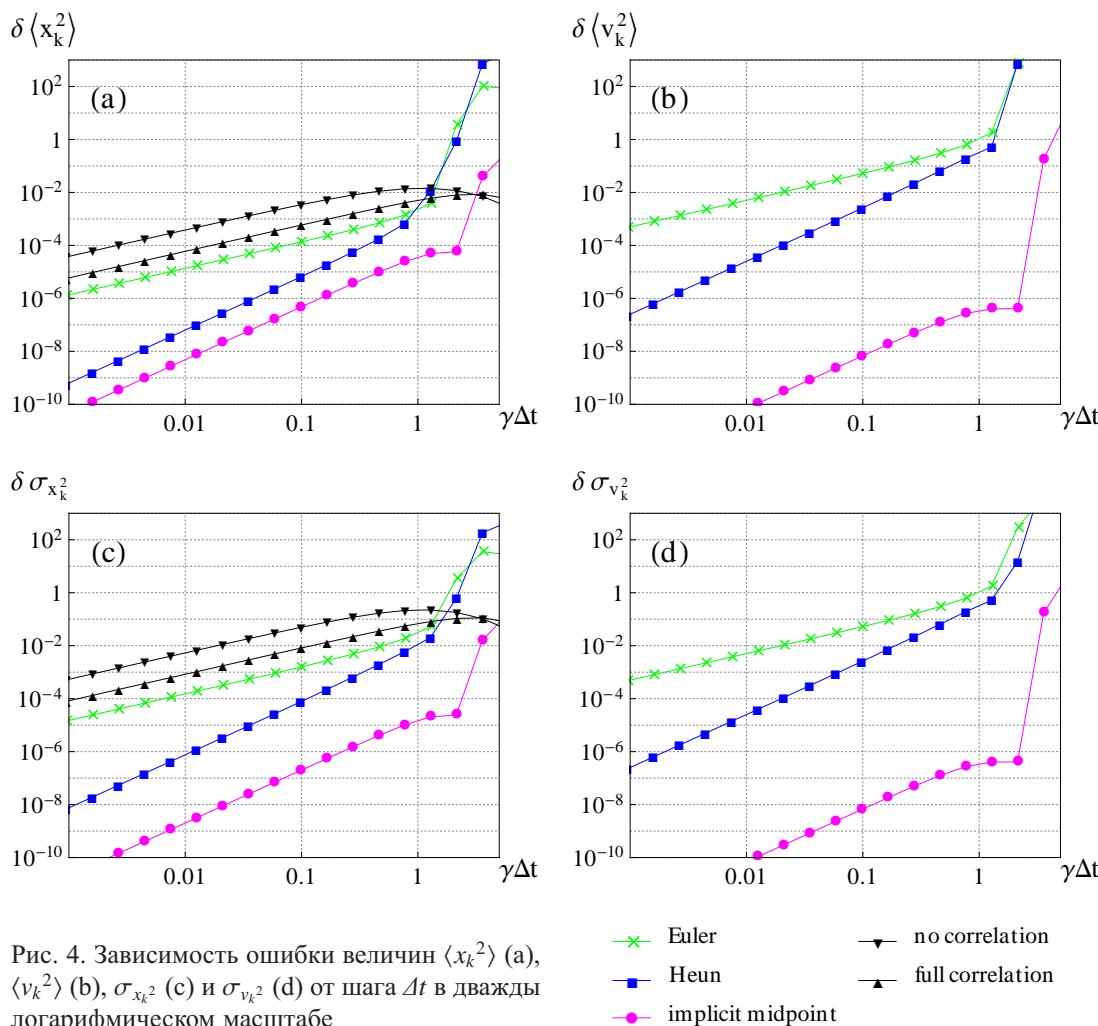


Рис. 4. Зависимость ошибки величин $\langle x_k^2 \rangle$ (а), $\langle v_k^2 \rangle$ (б), $\sigma_{x_k^2}$ (с) и $\sigma_{v_k^2}$ (д) от шага Δt в дважды логарифмическом масштабе

что абсолютные значения этих порядков для величин $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle v \rangle$, $\langle v^2 \rangle$ практически совпадают. Подчеркнем, что рассмотрены слабые порядки сходимости [Кузнецов, 2007], так называемая сходимость по распределению (weak convergence order).

Заключение

Исследована возможность упрощения численных методов интегрирования уравнения Ланжевена путем изменения коэффициента корреляции приращений. Получено общее аналитическое выражение для семейства численных методов, представимых в виде (6) с матрицей вида (10). Показано, что асимптотическое значение среднего квадрата скорости для ряда разностных схем не отвечает точному решению и зависит от размера шага. Это влияет на равновесную температуру моделируемой системы. Для методов «no correlation» и «full correlation» асимптотическое значение среднего квадрата смещения также зависит от размера шага, что искажает эффективный коэффициент диффузии. Оценена область применимости численных методов. Соотношение между порядками сходимости рассмотренных методов соответствует соотношению между порядками сходимости аналогичных методов решения нестochasticих дифференциальных уравнений. Выявлено, что без правильного учета скоррелированности приращений разностные схемы, построенные на точном решении, имеют ошибку, сравнимую с ошибкой методов Эйлера, и имеют первый порядок сходимости.

Приложение А. Корреляция двух сумм независимых величин

Напомним, что случайная величина $Y = \alpha N_1(\mu_1, \sigma_1^2) + \beta N_2(\mu_2, \sigma_2^2)$, равная сумме двух случайных величин с коэффициентом корреляции ρ , эквивалентна (т. е. имеет такую же плотность вероятности) величине

$$N(\alpha \cdot \mu_1 + \beta \cdot \mu_2, \alpha^2 \sigma_1^2 + \beta^2 \sigma_2^2 - 2\alpha\beta\rho\sigma_1\sigma_2).$$

Если проводится уменьшение числа случайных величин

$$\alpha_1 N_x^1 + \cdots + \alpha_k N_x^k + \beta_1 N_v^1 + \cdots + \beta_k N_v^k \sim A \tilde{N}_x + B \tilde{N}_v,$$

где $\text{corr}(N_x^i, N_x^j) = \text{corr}(N_v^i, N_v^j) = \delta_{ij}$, $\text{corr}(N_x^i, N_v^j) = \delta_{ij}\rho$, то $A = \sqrt{\sum_{i=1}^k \alpha_i^2}$, $B = \sqrt{\sum_{i=1}^k \beta_i^2}$, а коэффициент корреляции результирующих величин $\tilde{\rho} = \text{corr}(\tilde{N}_x, \tilde{N}_v)$ выражается следующим образом:

$$\tilde{\rho} = \rho \cdot \frac{\sum_{i=1}^k \alpha_i \beta_i}{AB}. \quad (15)$$

Приложение В. Аналитические выражения для разных методов

Метод «Euler»

Точное выражение для координаты на k -ом шаге метода Эйлера:

$$x_k = x_0 - \frac{(1 - \gamma \Delta t)^k - 1}{\gamma} v_0 + N_x(0, \sigma_{x_k}^2),$$

где

$$\sigma_{x_k}^2 = \frac{(-4(1 - \gamma \Delta t)^k + (1 - \gamma \Delta t)^{2k} + k\gamma^2 \Delta t^2 + 2\gamma \Delta t ((1 - \gamma \Delta t)^k - k - 1) + 3)\sigma^2}{\gamma^3 (\gamma \Delta t - 2)}.$$

Аналогичное выражение для скорости на k -ом шаге метода Эйлера:

$$v_k = (1 - \gamma \Delta t)^k v_0 + N_v(0, \sigma_{v_k}^2),$$

где

$$\sigma_{v_k}^2 = \frac{(1 - \gamma \Delta t)^{2k} - 1}{\gamma(\gamma \Delta t - 2)} \sigma^2.$$

Отсюда сразу следует асимптотика квадрата скорости на бесконечности:

$$\langle v_k^2 \rangle \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \frac{\sigma^2}{\gamma(2 - \gamma \Delta t)}.$$

Асимптотика среднего квадрата смещения:

$$\langle x_k^2 \rangle \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \frac{\Delta t k \sigma^2}{\gamma^2}.$$

Метод «Heun»

Метод также использует разложение коэффициентов матрицы метода в ряд Тейлора по степеням $\gamma\Delta t$. Точное выражение для координаты на k -ом шаге метода «Heun»:

$$x_k = x_0 + \frac{\left(1 - \left(\frac{\gamma^2 \Delta t^2}{2} - \gamma \Delta t + 1\right)^k\right) v_0}{\gamma} + N_x(0, \sigma_{x_k}^2),$$

где

$$\begin{aligned} \sigma_{x_k}^2 = & \frac{2\Delta t^2 \sigma^2 \left(\frac{\gamma^2 \Delta t^2}{2} - \gamma \Delta t + 1\right)^k}{\gamma (\gamma^2 \Delta t^2 - 2\gamma \Delta t + 4)} - \frac{4\Delta t \sigma^2 \left(\frac{\gamma^2 \Delta t^2}{2} - \gamma \Delta t + 1\right)^k}{\gamma^2 (\gamma^2 \Delta t^2 - 2\gamma \Delta t + 4)} + \\ & + \frac{8\sigma^2 \left(\frac{\gamma^2 \Delta t^2}{2} - \gamma \Delta t + 1\right)^k}{\gamma^3 (\gamma^2 \Delta t^2 - 2\gamma \Delta t + 4)} + \frac{\Delta t \sigma^2 \left(\frac{\gamma^2 \Delta t^2}{2} - \gamma \Delta t + 1\right)^{2k}}{\gamma^2 (\gamma^2 \Delta t^2 - 2\gamma \Delta t + 4)} - \frac{2\sigma^2 \left(\frac{\gamma^2 \Delta t^2}{2} - \gamma \Delta t + 1\right)^{2k}}{\gamma^3 (\gamma^2 \Delta t^2 - 2\gamma \Delta t + 4)} + \\ & + \frac{k \Delta t^3 \sigma^2}{\gamma^2 \Delta t^2 - 2\gamma \Delta t + 4} - \frac{2k \Delta t^2 \sigma^2}{\gamma (\gamma^2 \Delta t^2 - 2\gamma \Delta t + 4)} - \frac{2\Delta t^2 \sigma^2}{\gamma (\gamma^2 \Delta t^2 - 2\gamma \Delta t + 4)} + \\ & + \frac{4k \Delta t \sigma^2}{\gamma^2 (\gamma^2 \Delta t^2 - 2\gamma \Delta t + 4)} + \frac{3\Delta t \sigma^2}{\gamma^2 (\gamma^2 \Delta t^2 - 2\gamma \Delta t + 4)} - \frac{6\sigma^2}{\gamma^3 (\gamma^2 \Delta t^2 - 2\gamma \Delta t + 4)}. \end{aligned}$$

Аналогичное выражение для скорости на k -ом шаге метода «Heun»:

$$v_k = \left(\frac{\gamma^2 \Delta t^2}{2} - \gamma \Delta t + 1\right)^k v_0 + N_v(0, \sigma_{v_k}^2),$$

где

$$\sigma_{v_k}^2 = \frac{(\gamma \Delta t - 2) \left(\left(\frac{\gamma^2 \Delta t^2}{2} - \gamma \Delta t + 1\right)^{2k} - 1\right) \sigma^2}{\gamma (\gamma^2 \Delta t^2 - 2\gamma \Delta t + 4)}.$$

Отсюда сразу следует асимптотика квадрата скорости на бесконечности:

$$\langle v_k^2 \rangle \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \frac{\sigma^2 (2 - \gamma \Delta t)}{\gamma (\gamma^2 \Delta t^2 - 2\gamma \Delta t + 4)}.$$

Асимптотика среднего квадрата смещения:

$$\langle x_k^2 \rangle \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \frac{\Delta t k \sigma^2}{\gamma^2}.$$

Метод «implicit midpoint»

Точное выражение для координаты на k -ом шаге метода «implicit midpoint»:

$$x_k = x_0 + \frac{\left(1 - \left(\frac{2-\gamma \Delta t}{\gamma \Delta t + 2}\right)^k\right) v_0}{\gamma} + N_x(0, \sigma_{x_k}^2),$$

где

$$\sigma_{x_k}^2 = \frac{\left(4 \left(\frac{2-\gamma \Delta t}{\gamma \Delta t + 2}\right)^k - \left(\frac{2-\gamma \Delta t}{\gamma \Delta t + 2}\right)^{2k} + 2k\gamma \Delta t - 3\right) \sigma^2}{2\gamma^3}.$$

Аналогичное выражение для скорости на k -ом шаге метода «implicit midpoint»:

$$v_k = \left(\frac{2 - \gamma \Delta t}{\gamma \Delta t + 2} \right)^k v_0 + N_v(0, \sigma_{v_k}^2),$$

где

$$\sigma_{v_k}^2 = \frac{\left(1 - \left(\frac{2 - \gamma \Delta t}{\gamma \Delta t + 2}\right)^{2k}\right) \sigma^2}{2\gamma}.$$

Отсюда сразу следует асимптотика квадрата скорости на бесконечности:

$$\langle v_k^2 \rangle \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \frac{\sigma^2}{2\gamma}.$$

Видно, что она не зависит от размера шага и в точности равна асимптотике аналитического решения.

Асимптотика среднего квадрата смещения:

$$\langle x_k^2 \rangle \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \frac{\Delta t k \sigma^2}{\gamma^2}.$$

Метод «no correlation»

Точное выражение для координаты на k -ом шаге метода без корреляции:

$$x_k = x_0 + \frac{\left(1 - e^{-k\gamma\Delta t}\right) v_0}{\gamma} + N_x(0, \sigma_{x_k}^2),$$

где

$$\sigma_{x_k}^2 = \frac{e^{-2\gamma\Delta t} \left(e^{\gamma\Delta t} (4k - 2) + 2e^{-(k-2)\gamma\Delta t} - e^{-2(k-1)\gamma\Delta t} + 2e^{-(k-1)\gamma\Delta t} - 2k - e^{2\gamma\Delta t} (k(2 - 2\gamma\Delta t) + 1) \right) \sigma^2}{2\gamma^3}.$$

Аналогичное выражение для скорости на k -ом шаге метода без корреляции:

$$v_k = e^{-k\gamma\Delta t} v_0 + N_v(0, \sigma_{v_k}^2),$$

где

$$\sigma_{v_k}^2 = \frac{\left(1 - e^{-2k\gamma\Delta t}\right) \sigma^2}{2\gamma}.$$

Видно, что выражение для скорости полностью совпадает с точным аналитическим решением.

Отсюда сразу следует асимптотика квадрата скорости на бесконечности:

$$\langle v_k^2 \rangle \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \frac{\sigma^2}{2\gamma}.$$

Асимптотика среднего квадрата смещения:

$$\langle x_k^2 \rangle \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \frac{k \sigma^2 e^{-2\gamma\Delta t} \left(e^{2\gamma\Delta t} (\gamma\Delta t - 1) + 2e^{\gamma\Delta t} - 1 \right)}{\gamma^3}.$$

Метод full correlation

Точное выражение для координаты на k -ом шаге метода без корреляции:

$$x_k = x_0 + \frac{(1 - e^{-k\gamma\Delta t}) v_0}{\gamma} + N_x(0, \sigma_{x_k}^2),$$

где

$$\begin{aligned} \sigma_{x_k}^2 = & \frac{k\Delta t \sigma^2}{\gamma^2} - \frac{e^{(k-1)\gamma\Delta t - k\gamma\Delta t} \sqrt{1 - e^{-2\gamma\Delta t}} k \sqrt{e^{2\gamma\Delta t}(2\gamma\Delta t - 3) + 4e^{\gamma\Delta t} - 1} \sigma^2}{(-1 + e^{\gamma\Delta t}) \gamma^3} + \\ & + \frac{\sqrt{1 - e^{-2\gamma\Delta t}} k \sqrt{e^{2\gamma\Delta t}(2\gamma\Delta t - 3) + 4e^{\gamma\Delta t} - 1} \sigma^2}{(-1 + e^{\gamma\Delta t}) \gamma^3} + \\ & + \frac{e^{-k\gamma\Delta t} \sqrt{1 - e^{-2\gamma\Delta t}} \sqrt{e^{2\gamma\Delta t}(2\gamma\Delta t - 3) + 4e^{\gamma\Delta t} - 1} \sigma^2}{(-1 + e^{\gamma\Delta t}) \gamma^3} - \\ & - \frac{\sqrt{1 - e^{-2\gamma\Delta t}} \sqrt{e^{2\gamma\Delta t}(2\gamma\Delta t - 3) + 4e^{\gamma\Delta t} - 1} \sigma^2}{(-1 + e^{\gamma\Delta t}) \gamma^3} - \frac{e^{-\gamma\Delta t} \sigma^2}{\gamma^3} - \frac{e^{-2k\gamma\Delta t} \sigma^2}{2\gamma^3} + \frac{e^{-k\gamma\Delta t} \sigma^2}{\gamma^3} + \\ & + \frac{e^{-(k+1)\gamma\Delta t} \sigma^2}{\gamma^3} - \frac{e^{-2\gamma\Delta t} k \sigma^2}{\gamma^3} + \frac{2e^{-\gamma\Delta t} k \sigma^2}{\gamma^3} - \frac{k \sigma^2}{\gamma^3} - \frac{\sigma^2}{2\gamma^3}. \end{aligned}$$

Аналогичное выражение для скорости на k -ом шаге метода без корреляции:

$$v_k = e^{-k\gamma\Delta t} v_0 + N_v(0, \sigma_{v_k}^2),$$

где

$$\sigma_{v_k}^2 = \frac{(1 - e^{-2k\gamma\Delta t}) \sigma^2}{2\gamma}.$$

Видно, что выраженное для скорости полностью совпадает с точным аналитическим решением.

Отсюда сразу следует асимптотика квадрата скорости на бесконечности:

$$\langle v_k^2 \rangle \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \frac{\sigma^2}{2\gamma}.$$

Асимптотика среднего квадрата смещения:

$$\langle x_k^2 \rangle \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \frac{k \sigma^2 e^{-2\gamma\Delta t} (e^{2\gamma\Delta t}(\gamma\Delta t - 1) + 2e^{\gamma\Delta t} + \sqrt{(e^{2\gamma\Delta t} - 1)(e^{2\gamma\Delta t}(2\gamma\Delta t - 3) + 4e^{\gamma\Delta t} - 1)} - 1)}{\gamma^3}.$$

Список литературы

- Жмурков А. А., Барсегов В. А. Эффективные генераторы псевдослучайных чисел при молекулярном моделировании на видеокартах // Компьютерные исследования и моделирование. — 2011. — Т. 3, № 3. — С. 287–308.
- Кузнецов Д. Ф. Стохастические дифференциальные уравнения: теория и практика численного решения. — Изд-во Политехн. ун-та, 2007.
- Лукишин А. В., Смирнов С. Н. Численные методы решения стохастических дифференциальных уравнений // Матем. моделирование. — 1990. — Т. 2, № 11. — С. 108–121.

- Allen M. P., Tildesley D. J.* Computer Simulation of Liquids. — Oxford University Press, USA, 1989. — jun.
- Balescu R.* Equilibrium and nonequilibrium statistical mechanics. Wiley-Interscience publication. — Wiley, 1975.
- Burrage K., Lenane I., Lythe G.* Numerical Methods for Second-Order Stochastic Differential Equations // *SIAM Journal on Scientific Computing*. — 2007. — Vol. 29, no. 1. — P. 245–264.
- Chandrasekhar S.* Stochastic Problems in Physics and Astronomy // *Rev. Mod. Phys.* — 1943. — Jan. — Vol. 15. — P. 1–89.
- Ciccotti G., Hoover W.* Molecular-dynamics simulation of statistical-mechanical systems: Varenna on Lake Como, Villa Monastero, 23 July-2 August 1985. Proceedings of the International School of Physics "Enrico Fermi". — North-Holland, 1986. — P. 43–65.
- Ermak D. L., Buckholz H.* Numerical integration of the Langevin equation: Monte Carlo simulation // *Journal of Computational Physics*. — 1980. — Apr. — Vol. 35, no. 2. — P. 169–182.
- Gunsteren W., Berendsen H.* Algorithms for brownian dynamics // *Molecular Physics*. — 1982. — Vol. 45, no. 3. — P. 637–647.
- Kloeden P., Platen E.* Numerical solution of stochastic differential equations. Applications of mathematics. — Springer-Verlag, 1992.
- Lukic B., Jeney S.* Direct Observation of Nondiffusive Motion of a Brownian Particle // *Phys. Rev. Lett.* — 2005. — Oct. — Vol. 95. — P. 160601.
- March N., Tosi M.* Atomic Dynamics in Liquids. Dover Books on Physics and Chemistry. — Dover, 1991.
- Pastor R. W., Brooks B. R., Szabo A.* An analysis of the accuracy of Langevin and molecular dynamics algorithms // *Molecular Physics*. — 1988. — Vol. 65, no. 6. — P. 1409–1419.
- Phillips C. L., Anderson J. A., Glotzer S. C.* Pseudo-random number generation for Brownian Dynamics and Dissipative Particle Dynamics simulations on GPU devices // *Journal of Computational Physics*. — 2011. — Vol. 230, no. 19. — P. 7191–7201.
- Pusey P. N.* Brownian Motion Goes Ballistic // *Science*. — 2011. — Vol. 332, no. 6031. — P. 802–803.
- Süli E., Mayers D.* An Introduction to Numerical Analysis. — Cambridge University Press, 2003.
- Turq P., Lantelme F., Friedman H. L.* Brownian dynamics: Its application to ionic solutions // *The Journal of Chemical Physics*. — 1977. — Vol. 66, no. 7. — P. 3039–3044.
- Zwanzig R.* Nonequilibrium statistical mechanics. — Oxford University Press, 2001.