



ЛАБОРАТОРИЯ
ИНФОРМАЦИОННЫХ
ТЕХНОЛОГИЙ

СЕМИНАР
по ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ
ФИЗИКЕ

Четверг, 17 декабря 2015 г. в 15.00
Ком. 310

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

**Процедура построения явно-неявных
симплектических численных схем для
решения гамильтоновых систем уравнений**

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. Требования по повышению реалистичности процессов моделирования приводят к увеличению порядка систем молекулярно-динамических уравнений. Повышение эффективности численных методов на каждом временном шаге приводит к существенному повышению экономичности численного моделирования. В работе предложена процедура построения явно-неявных симметричных, симплектических численных схем произвольного порядка аппроксимации для решения гамильтоновых систем уравнений. Численные эксперименты показали не только вычислительную эффективность такого типа численных схем, но и сохранение с необходимой точностью геометрических свойств исходной гамильтоновой системы.