

Численное интегрирование системы уравнений движения

Поляченко Юрий
726

17 декабря 2020 г.

Содержание

1	Критерии выбора численной схемы	3
2	Ряд Тейлора	4
3	Классический оператор временной эволюции	6
4	Проверка сходимости	9
5	RESPA	11
6	Принцип наименьшего действия	12

1 Критерии выбора численной схемы

В молекулярной динамике (MD) уравнения движения решаются численно т.к. мы имеем систему из N частиц в общем положении, что очевидно не дает нам использовать какие-либо приближения не делая при этом каких-то предположений о системе, сильно сужающих исследуемую область параметров. Значит нам нужны хорошие численные схемы решения дифф. уравнений. Но что значит хорошие? Это не очень тривиальный вопрос.

Важно указать, что описываются критерии схемы, хорошей именно для анализа MD. Главная особенность MD в данном случае состоит в том, что целью не ставится получение точного решения системы уравнений в смысле

$$\forall \varepsilon \forall T \exists h(\varepsilon, T) : \forall \vec{x}(0) \forall t < T \quad \|\vec{x}(t) - \vec{x}_0(t)\| < \varepsilon \quad (1)$$

где h – шаг интегрирования, $\vec{x}(t)$ – траектория системы в фазовом пространстве, получаемая численно, $\vec{x}_0(t)$ – точное решение задачи Коши. Конкретный вид меры не важен – можно для простоты взять Евклидову. В принципе при $h \rightarrow 0$ все численные схемы решения дифф. уравнений удовлетворяют данному определению, но h в них очень быстро уменьшается с T . Чаще всего это происходит экспоненциально, что дает количество шагов, нужных для получения решения $\sim T/e^{-\alpha T} \sim xe^{\alpha x}$. При таком быстром росте мы не можем анализировать системы на временах, необходимых для решения физических задач.

Нас всегда интересуют лишь средние величины в системе, такие как полная энергия, плотность, температура и т.п. Поэтому нас интересует поиск схемы, удовлетворяющей (1) с мерой, отвечающей лишь разнице в этих средних величинах и при этом такой, что с ростом T количество шагов интегрирования растет не очень быстро. Таких «средних» свойств довольно много, поэтому по хорошему, собираясь анализировать какое-то из них, нужно выбирать схему, лучше подходящую под конкретную задачу. Но так вышло (так устроена природа), что существует простая в реализации схема, правильно воспроизводящая поведение фундаментальных характеристик системы – полной энергии (гамильтониана) и фазового объема (т.е. выполнение термемы Лиувилля о сохранении фазового объема). При чем сохранение энергии интересно нам в двух видах – малость флуктуаций и отсутствие глобального дрейфа со временем. У схем высокого порядка обычно хорошо выполняется локальное сохранение энергии, т.е. флуктуации малы, но при этом имеет место общий дрейф полной энергии со временем. Этот дрейф – следствие того, что в

таких схемах не выполняются фундаментальные законы обратимости и сохранения фазового объема.

В данном разделе будет с нескольких сторон рассмотрена численная схема Verlet и ее вариации.

2 Ряд Тейлора

Формулы расчета нового положения системы по старому могут быть получены из элементарных соображений разложения движения в ряд около текущего положения системы (далее $\Delta t = h$ если не сказано иного).

$$\begin{aligned} r(t+h) &= r(t) + v(t)h + a(t)\frac{h^2}{2} + b(t)\frac{h^3}{6} + \mathcal{O}(h^4) \\ r(t-h) &= r(t) - v(t)h + a(t)\frac{h^2}{2} - b(t)\frac{h^3}{6} + \mathcal{O}(h^4) \end{aligned} \quad (2)$$

откуда сразу получаем

$$\begin{aligned} r(t+h) &= 2r(t) - r(t-h) + a(t)h^2 + \mathcal{O}(h^4) \\ v(t) &= \frac{r(t+h) - r(t-h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2) \end{aligned} \quad (3)$$

Из данного вывода видно, что рассчитав силы только 1 раз за шаг интегрирования мы получаем точность предсказания $\mathcal{O}(h^4)$ для координат. Это выгодное отличие от самой наивной схемы Эйлера « $vt + at^2/2$ », дающей 3 порядок ошибок для координат. Однако другое отличие от схемы Эйлера состоит в участии 3 шагов по координатам. Это создает проблему первого шага - его мы не можем посчитать по данной схеме. Чтобы не потерять в точности итогового решения, можно использовать для расчета $r(-h) = r(0) - v(0)h + a(0)h^2/2$. Эту проблему можно решить, перейдя к velocity Verlet:

$$\begin{aligned} r(t+h) &= r(t) + v(t)h + a(t)\frac{h^2}{2} \\ v(t+h) &= v(t) + \frac{a(t) + a(t+h)}{2}h \end{aligned} \quad (4)$$

Покажем их эквивалентность:

$$\begin{aligned}
r(t+h) &= r(t) + v(t)h + a(t)\frac{h^2}{2} \\
v(t+h) &= v(t) + \frac{a(t) + a(t+h)}{2}h \\
r(t+2h) &= r(t+h) + v(t+h)h + a(t+h)\frac{h^2}{2}
\end{aligned} \tag{5}$$

откуда

$$\begin{aligned}
r(t+2h) + r(t) &= 2r(t+h) + [v(t+h) - v(t)]h + [a(t+h) - a(t)]\frac{h^2}{2} = \\
&= 2r(t+h) + a(t+h)h^2
\end{aligned} \tag{6}$$

что эквивалентно (3).

Из (3) видно еще одно очень важное свойство данного алгоритма - временная обратимость. Ей обладает реальная описываемая гамильтонова система, поэтому ее сохранение - хороший знак. Существуют и более точные схемы, основанные на идее разложения движения в ряд на несколько шагов по времени в обе стороны от текущего момента. Они дают лучшее локальное сохранение энергии, но не обладают обратимостью. Вообще схемы высших порядков чаще всего не обладают свойствами сохранения некоторых фундаментальных физических величин а просто дают меньшую ошибку непосредственно в решении уравнений.

Мы формально получили правила для пересчета координат и скоростей, но хотелось бы понять, почему следуя именно этим правилам мы получаем отсутствие дрейфа полной энергии и сохранение фазового объема.

Для доказательства сохранения фазового объема хватит системы (4). Рассмотрим этот сдвиг координат как преобразование координат. Покажем, что это преобразование симплектическое, т.е. замена удовлетворяет $J^T \hat{E} J = \hat{E}$ где J - якобиан преобразования, \hat{E} - антисимметричная гамильтонова единица. Из симплектичности преобразования, непрерывности якобиана и того, что при $t = 0$ он был равен $E = \hat{1}$ будет следовать $|J| = 1$, из чего непосредственно следует сохранение фазового объема.

Вычислим якобиан преобразования для случая одномерной системы. Для n координат вычисления аналогичны. $\ddot{x} = F/m$ - функция координат. Вводя состояние системы в фазовом пространстве $\mathbf{x}(t) = (x(t); v(t))$

и вспоминая, что $a(t) = a(x(t))$:

$$\begin{aligned} x_1 &= x_0 + v_0 h + a(x_0) \frac{h^2}{2} \\ v_1 &= v_0 + [a(x_0) + a(x_1)] \frac{h}{2} \end{aligned} \quad (7)$$

откуда

$$J = \frac{\partial \mathbf{x}(\Delta t)}{\partial \mathbf{x}(0)} = \frac{\partial \mathbf{x}_1}{\partial \mathbf{x}_0} = \begin{pmatrix} 1 + \frac{h^2}{2} \frac{\partial a}{\partial x} \Big|_{x_0} & h \\ \frac{h}{2} \left[\frac{\partial a}{\partial x} \Big|_{x_0} + \frac{\partial a}{\partial x} \Big|_{x_1} \left(1 + \frac{h^2}{2} \frac{\partial a}{\partial x} \Big|_{x_0} \right) \right] & 1 + \frac{h}{2} \frac{\partial a}{\partial x} \Big|_{x_1} h \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Проверим симплектичность ($\alpha = h^2/2$):

$$\begin{aligned} J^T \hat{E} J &= \begin{pmatrix} 1 + \alpha a_0 & \frac{h}{2}(a_0 + a_1(1 + \alpha a_0)) \\ h & 1 + \alpha a_1 \end{pmatrix} \hat{E} \begin{pmatrix} 1 + \alpha a_0 & h \\ \frac{h}{2}(\dots) & 1 + \alpha a_1 \end{pmatrix} = \dots \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = \hat{E} \end{aligned} \quad (9)$$

Для анализа поведения полной энергии нам уже не хватит аппарата разложения в ряд и придется обратиться непосредственно к гамильтоновой механике.

3 Классический оператор временной эволюции

Гамильтониан нашей системы прост

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} + U(q). \quad (10)$$

Рассмотрим произвольную функцию координат $a(x)$, где $x = (q, p)^T$. Для нее на прямых путях

$$\frac{da}{dt} = \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\partial a}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial a}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) = \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\partial a}{\partial q_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} - \frac{\partial a}{\partial p_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \right) = -\{a, \mathcal{H}\}. \quad (11)$$

Можно ввести оператор, действующий на фазовом пространстве, в котором эволюционирует наша система. Принято по аналогии с гамильтонианом в квантовой механике вводить

$$i\hat{L} = \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \frac{\partial}{\partial q_i} - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \frac{\partial}{\partial p_i} \right). \quad (12)$$

L - оператор Лиувилля. С ним уравнение на f запишется просто

$$\frac{df}{dt} = i\hat{L}f. \quad (13)$$

Гамильтониан не зависит от времени, а поэтому и L не зависит. Значит можно формально проинтегрировать (13):

$$f(t) = \tilde{f}(x(t)) = e^{i\hat{L}t} f(t_0) = e^{i\hat{L}t} \tilde{f}(x_0). \quad (14)$$

Формально это является общим решением нашей задачи. Проблема в том, что вы не можете вычислить точное значение оператора $e^{i\hat{L}t}$.

(12) можно записать как

$$i\hat{L} = i\hat{L}_q + i\hat{L}_p. \quad (15)$$

Приятно то, что мы можем вычислить действия $i\hat{L}_q$ и $i\hat{L}_p$ по отдельности - $i\hat{L}_q$ двигает частицы, не изменяя их скоростей, а $i\hat{L}_p$ наоборот меняет скорости, не двигая. Не приятно то, что в общем случае $e^{A+B} \neq e^A e^B$. Это так только для коммутирующих операторов, т.е. таких, что $AB = BA$. Покажем, что в нашем случае это не так. Рассмотрим простую систему $\mathcal{H} = p^2/2 + q^2/2$ и функцию, не симметричную относительно p и q - $f(q, p) = qp^2$. Вычисления дают

$$(\hat{L}_q \hat{L}_p - \hat{L}_p \hat{L}_q) f(q, p) = \frac{\partial f}{\partial q} \frac{\partial \varphi}{\partial q} - p \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial q^2} = -qp^2 \neq 0. \quad (16)$$

т.е. вообще говоря существуют такие функции, что $[\hat{L}_q, \hat{L}_p]f(q, p) \neq 0$. Здесь мы начинаем пытаться вычислить оператор приближенно и опять переходим к численным методам. Существует Trotter theorem:

$$e^{A+B} = (e^{B/2M} e^{A/M} e^{B/2M})^M e^{\mathcal{O}(1/M^2)} \quad (17)$$

Это уже в определенной степени похоже на описанный ранее метод расчета эволюции системы - N последовательных шагов, в каждом из которых чередуются применения операторов сдвига скоростей и координат.

В нашем случае теорема запишется

$$e^{i\hat{L}t} = e^{(i\hat{L}_q + i\hat{L}_p)t} = \left(e^{i\hat{L}_p t/2M} e^{i\hat{L}_q t/M} e^{i\hat{L}_p t/2M} \right)^M e^{\mathcal{O}(1/M^2)} \quad (18)$$

Обозначим $\Delta t = t/M$ и заметим, что оператор $e^{iL\Delta t}$ перестановочен сам с собой и с оператором ошибки (т.к. ошибка перестановочна с любым оператором). Поэтому можно извлечь корень M -ой степени из обеих частей (18):

$$e^{i\hat{L}\Delta t} = e^{i\hat{L}_p \Delta t/2} e^{i\hat{L}_q \Delta t} e^{i\hat{L}_p \Delta t/2} e^{\mathcal{O}(\Delta t^3)} \quad (19)$$

И так мы имеем оператор, действие которого на систему мы можем вычислить с точностью $\mathcal{O}(\Delta t^3)$:

$$e^{i\hat{L}\Delta t} \approx e^{i\hat{L}_p \Delta t/2} e^{i\hat{L}_q \Delta t} e^{i\hat{L}_p \Delta t/2} \quad (20)$$

Чтобы понять, как подобные операторы действуют на систему, можно рассмотреть абстрактный

$$\begin{aligned} \exp\left(c \frac{\partial}{\partial x}\right) f(x, y) &= \left[\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(c \frac{\partial}{\partial x}\right)^k \right] f(x, y) = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{c^k}{k!} \frac{\partial^k f(x, y)}{\partial x^k} = f(x + c, y) \end{aligned} \quad (21)$$

Далее применяя (12) к простой системы $\mathcal{H} = p^2/2m + U(q)$:

$$i\hat{L}_q = \frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial q} = v \frac{\partial}{\partial q}, \quad i\hat{L}_p = -\frac{\partial U}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} = F(q) \frac{\partial}{\partial p}. \quad (22)$$

Откуда используя (21)

$$\begin{aligned} e^{\mathcal{O}(\Delta t^3)} e^{iL\Delta t} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} &= \exp\left(\frac{\Delta t}{2} F(q) \frac{\partial}{\partial p}\right) \exp\left(\Delta t v \frac{\partial}{\partial q}\right) \exp\left(\frac{\Delta t}{2} F(q) \frac{\partial}{\partial p}\right) \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \\ &= \exp\left(\frac{\Delta t}{2} F(q) \frac{\partial}{\partial p}\right) \exp\left(\Delta t v \frac{\partial}{\partial q}\right) \begin{pmatrix} q \\ p + F(q) \Delta t/2 \end{pmatrix} = \\ &= \exp\left(\frac{\Delta t}{2} F(q) \frac{\partial}{\partial p}\right) \begin{pmatrix} q + \Delta t p/m \\ p + F(q + \Delta t p/m) \Delta t/2 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} q + \frac{\Delta t}{m} \left(p + F(q) \frac{\Delta t}{2}\right) \\ p + \left\{ F(q) + F\left[q + \frac{\Delta t}{m} \left(p + F(q) \frac{\Delta t}{2}\right)\right] \right\} \frac{\Delta t}{2} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (23)$$

Полученная формула аналогична (4). Мы убедились, что данный подход приводит к ранее полученным формулам. Но теперь мы можем показать важное свойство данного алгоритма, не вытекавшее из расложения в ряд Тейлора – отсутствие дрейфа полной энергии. Разложение (19) можно записать в другом виде:

$$e^{(i\hat{L}+\hat{\varepsilon})\Delta t} = e^{i\hat{L}_p\Delta t/2} e^{i\hat{L}_q\Delta t} e^{i\hat{L}_p\Delta t/2}, \quad (24)$$

где $\|\hat{\varepsilon}\| = \varepsilon = \mathcal{O}(\Delta t^2)$. Новому псевдо оператору Лиувилля $i\hat{\tilde{L}} = i\hat{L} + \hat{\varepsilon}$ отвечает псевдо гамельтониан $\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{H} + \mathcal{O}(\varepsilon)$. А по скольку мы применяем к системе в точности оператор (24), то этот псевдо гамильтониан точно сохраняется (с точностью до количества знаков, выделенных на хранение числа). Это значит, что из-за неточностей рассматриваемой схемы Verlet полная энергия может флуктуировать со среднеквадратичным отклонением $\sigma_{\mathcal{H}} \sim \Delta t^2$, но не может дрейфовать, т.к. она должна оставаться в ε -окрестности строго сохраняющейся величины. В заключении следует добавить ложку дегтя. Для $\hat{\varepsilon}$ можно выписать операторный ряд в духе теории возмущений

$$\hat{\varepsilon} = \sum_{k=2}^{\infty} \Delta t^k \hat{C}_k. \quad (25)$$

Радиус сходимости этого ряда на данный момент современной науке в общем случае не известен, поэтому надо с осторожностью подходить к выбору Δt . Но все не так плохо как могло бы быть – численные эксперименты показывают отсутствие дрейфа полной энергии при вполне разумных шагах интегрирования, что говорит о том, что радиус сходимости ряда в данном случае – не слабое место предложенной теории, из-за которого она бы ломалась, а в лишь вопрос, подлежащий дальнейшему исследованию.

В итоге применения подхода операторов эволюции мы с оговоркой получили оценку на флуктуации полной энергии и вывод о долгосрочном сохранении полной энергии.

4 Проверка сходимости

Можно показать, что первый член разложения H_{shadow} :

$$H_{shadow} = E + \frac{dt^2}{12} \left[\sum_{k=1}^N \left(\vec{v}_k \cdot \dot{\vec{F}}_k - \frac{\vec{F}_k^2}{2m_k} \right) \right] + \mathcal{O}(dt^4). \quad (26)$$

Явно расписывая

$$\frac{d\vec{F}_k}{dt} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial \vec{F}_k}{\partial \vec{r}_i} \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial t}, \quad \vec{F}_k = -\frac{\partial U}{\partial \vec{r}_k}, \quad U = \sum_{i<j}^N \varphi((\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2), \quad \varphi(x) = 4(x^{-6} - x^{-3}) \quad (27)$$

Можно получить явное выражение для поправки

$$\frac{dt^2}{12} \sum_{k=1}^N \left(2\vec{v}_k^T \sum_{l \neq k} \left\{ 2\varphi''[(\vec{r}_k - \vec{r}_l)^2](\vec{r}_k - \vec{r}_l)(\vec{r}_k - \vec{r}_l)^T + \varphi'[(\vec{r}_k - \vec{r}_l)^2] \cdot \mathbb{1} \right\} (\vec{v}_k - \vec{v}_l) - \frac{\vec{F}_k^2}{2m} \right) \quad (28)$$

Отметим, что необходимо существование 2-ой производной $\varphi(r^2)$, что накладывает определенные требования на то, как можно обрезать используемый потенциал.

Учет этой поправки действительно улучшает сохранение:

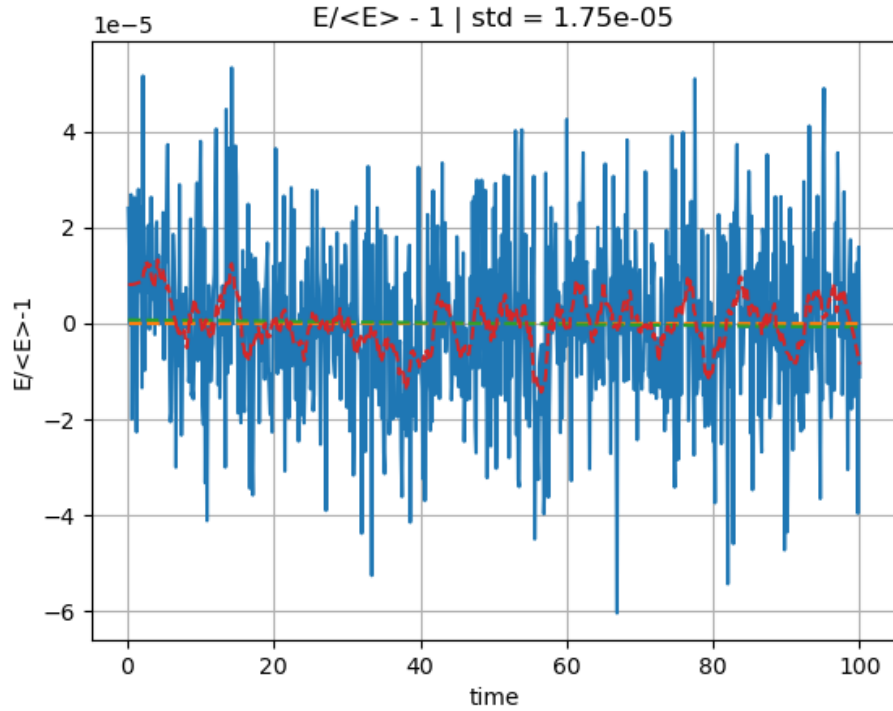


Рис. 1: Относительные флуктуации энергии E . Флуктуации $\sim 10^{-5}$

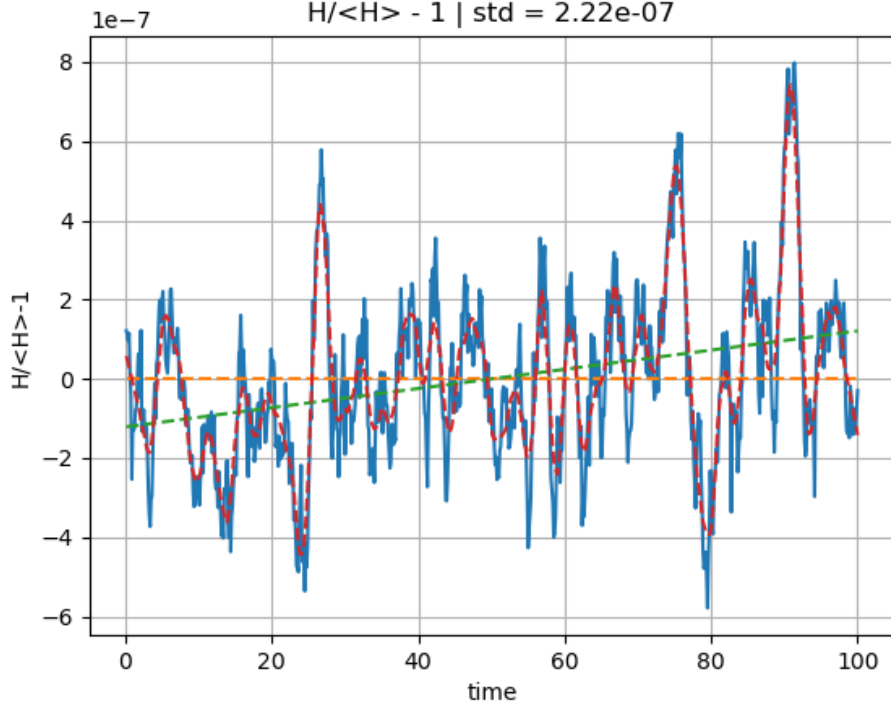


Рис. 2: Относительные флуктуации $E + \delta^2 H$. Флуктуации $\sim 10^{-7}$

5 RESPA

Формализм временных пропагаторов позволяет легко конструировать довольно сложные численные схемы. В частности можно формулировать схемы, естественно и оптимально учитывающие наличие разных временных масштабов в системе. Классическим примером здесь является например процесс изменения конформации белка с учетом вибраций межатомных связей. Для простоты рассмотрим случа й 1 частицы:

$$\dot{x} = \frac{p}{m} \dot{p} = F_{\text{fast}}(x) + F_{\text{slow}}(x) \quad (29)$$

дают пропагатор

$$iL = \frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial x} + [F_{\text{fast}}(x) + F_{\text{slow}}(x)] \frac{\partial}{\partial p} \quad (30)$$

который можно разбить на 2

$$\begin{aligned}
iL &= iL_{\text{fast}} + iL_{\text{slow}} \\
iL_{\text{fast}} &= \frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial x} + F_{\text{fast}}(x) \frac{\partial}{\partial p} \\
iL_{\text{slow}} &= F_{\text{slow}}(x) \frac{\partial}{\partial p}
\end{aligned} \tag{31}$$

что дает нам выражение численного пропагатора

$$\exp(iL\Delta t) = \exp\left(iL_{\text{slow}} \frac{\Delta t}{2}\right) \exp(iL_{\text{fast}}\Delta t) \exp\left(iL_{\text{slow}} \frac{\Delta t}{2}\right) \tag{32}$$

В распространенном случае когда быстрые силы – колебания связей, оператору $\exp(iL_{\text{fast}}\Delta t)$ соответствует гамильтониан $H = p^2/2m + m\omega^2 x^2/2$, допускающий аналитическое решение уравнений движения и соответственно нахождение точного действия оператора $\exp(iL_{\text{fast}}\Delta t)$.

Когда же аналитическое вычисление быстрого пропагатора невозможно, его можно аппроксимировать численно, опять используя разложение Троттера:

$$\exp(iL_{\text{fast}}\Delta t) = \left[\exp\left(\frac{\delta t}{2} F_{\text{fast}} \frac{\partial}{\partial p}\right) \exp\left(\delta t \frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial x}\right) \exp\left(\frac{\delta t}{2} F_{\text{fast}} \frac{\partial}{\partial p}\right) \right]^n. \tag{33}$$

Эту логику можно применять и далее, выделяя разные временные масштабы в системе. Итоговый пропагатор будет иметь вид сходный с

$$\begin{aligned}
\exp(iL\Delta T) &= \exp\left(\frac{\Delta T}{2} F_{\text{slow}} \frac{\partial}{\partial p}\right) \left\{ \exp\left(\frac{\Delta t}{2} F_{\text{intermed}} \frac{\partial}{\partial p}\right) \right. \\
&\quad \left[\exp\left(\frac{\delta t}{2} F_{\text{fast}} \frac{\partial}{\partial p}\right) \exp\left(\delta t \frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial x}\right) \exp\left(\frac{\delta t}{2} F_{\text{fast}} \frac{\partial}{\partial p}\right) \right]^n \\
&\quad \left. \exp\left(\frac{\Delta t}{2} F_{\text{intermed}} \frac{\partial}{\partial p}\right) \right\}^m \exp\left(\frac{\Delta T}{2} F_{\text{slow}} \frac{\partial}{\partial p}\right)
\end{aligned} \tag{34}$$

6 Принцип наименьшего действия

Алгоритм верле так хорош, что все он же получается из принципа наименьшего действия. Минимальность (экстремальность) действия следует из уравнений Лагранжа 2 рода, поэтому запишем их для нашей дискретной схемы.

Для простоты опять рассмотрим 1-мерную систему $\mathcal{L} = mv^2/2 - U(x)$. Чтобы все производные по времени в дискретной схеме отвечали именно

текущему моменту, они должны вычисляться как

$$\left. \frac{df}{dt} \right|_k = \frac{f_{k+1/2} - f_{k-1/2}}{h}$$

а не как часто пишут

$$\left. \frac{df}{dt} \right|_k = \frac{f_{k+1} - f_k}{h}$$

Имеем стандартные

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v} &= mv \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} &= \frac{\partial U}{\partial x} \end{aligned} \tag{35}$$

Тогда уравнения Лагранжа

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_{x_k} &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} = \left. \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v} \right) \right|_{t_k} = \\ &= \frac{v_{k+1/2} - v_{k-1/2}}{h} m = \frac{(x_{k+1} - x_k)/h - (x_k - x_{k+1})/h}{h} m = \\ &= \frac{x_{k+1} + x_{k-1} - 2x_k}{h^2} m = F(x_k). \end{aligned} \tag{36}$$

Уравнение лагранжа только одно и из него мы нашли формулу для сдвига координат. Чтобы сохранить симметрию по времени, можно положить скорость

$$v_k = \frac{v_{k+1/2} + v_{k-1/2}}{2} = \frac{x_{k+1} - x_{k-1}}{2h} \tag{37}$$

Выражения (36) и (37) аналогичны (3).