

М. Ю. Т о л п и н а (Москва, МГГУ). **Выбор метода интегрирования уравнений Ньютона при моделировании распыления твердых бинарных соединений.**

При нахождении траектории частицы, взаимодействующей с мишенью, необходимо решать уравнения Ньютона, т. е. решать задачу Коши для системы дифференциальных уравнений второго порядка вида

$$\ddot{x} = f(x, \dot{x}), \quad x(0) = x_0, \quad \dot{x}(0) = v_0,$$

где N — число взаимодействующих частиц, t — время. Так как учитываются только консервативные системы, в которых нет явной зависимости от времени, то указанную задачу можно свести к $6N$ уравнениям первого порядка с теми же начальными условиями. Поскольку в задачах распыления не встречаются силы, зависящие явно от скорости, используемая математическая задача Коши для системы одинаковых частиц выглядит следующим образом:

$$\dot{v}_i = \frac{1}{M_i} \sum_{j=1}^N F_{ij}(r_{ij}) = -\frac{1}{M_i} \sum_{j=1}^N a_j^i \frac{\partial U_{ij}(r_{ij})}{\partial r_{ij}}, \quad \dot{x}_i = v_i,$$

с начальными условиями $x_i(0) = x_{0i}$, $\dot{x}_i(0) = v_{0i}$. Здесь M_i — масса i -го атома, переменные v и x — $3N$ -мерные вектора с элементами $\{v_{1x}, v_{1y}, v_{1z}, \dots, v_{Nx}, v_{Ny}, v_{Nz}\}$, $\{x_1, y_1, z_1, \dots, x_N, y_N, z_N\}$, а элементы векторов — скорости и координаты частиц, соответственно.

Известно [1]–[3], что, независимо от разностной схемы, применяемой для решения задачи, вычисленное решение удаляется от точного, причем экспоненциально по времени. С математической точки зрения этот факт может интерпретироваться как следствие перехода (аппроксимации) от бесконечномерного пространства решений к конечномерному пространству функций на дискретной сетке.

Кроме того, поскольку при нахождении решения всегда существует погрешность и на каждом шаге интегрирования мы переходим с одной фазовой кривой на другую, полученное решение необратимо по времени, в отличие от точного. Наличие этих факторов заставляет внимательно относиться к обоснованию полученных в численном эксперименте результатов. Рассмотрим погрешности, возникающие из-за приближенного описания разностной схемой исходной системы дифференциальных уравнений. Специальные исследования по обоснованию корректности молекулярно-динамических расчетов показали, что в приближенном решении системы дифференциальных уравнений существует 3 характерных времени накопления ошибок (см. рис.).

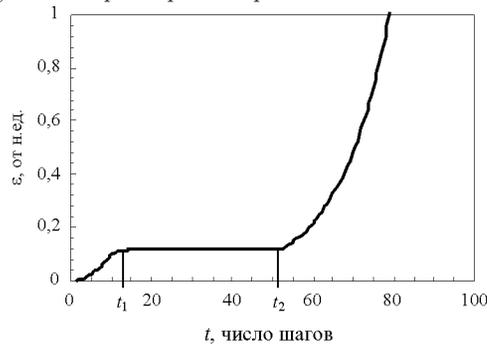


Рис. Качественное изображение роста погрешности в МД расчете в зависимости от времени (числа шагов численного метода интегрирования траектории частицы)

На первом участке кривой $[0, t_1]$ погрешность ϵ обусловлена целиком выбранной разностной схемой, а длина (по времени) этого участка порядка нескольких десятков шагов разностной схемы. На следующем участке $[t_1, t_2]$ погрешность не зависит от порядка точности выбранной разностной схемы; она линейна по времени для погрешности в расчете координат и постоянна для скоростей; длина этого участка — десятки шагов разностной схемы. Затем следует экспоненциальный рост погрешности на участке $[t_2, t_3]$ и насыщение при временах, больших t_3 (не показано на рисунке). Поскольку в расчетах распыления ограничиваются рассмотрением только динамической стадии, не происходит выхода за пределы второго участка. Рассмотрение используемых в молекулярно-динамическом моделировании схемы Верле, метода средней силы и варианты семейства одношаговых методов Рунге–Кутты показывает, что не все из них пригодны для моделирования распыления. Отметим, что хорошей разностной схемой для моделирования физического процесса распыления является схема, удовлетворяющая всем законам сохранения исходной физической задачи (в нашем случае — это законы сохранения энергии, импульса и момента импульса). В этом смысле хороших разностных схем для решения уравнений Ньютона не существует. Однако существуют некоторые схемы, консервативные по импульсу, но не консервативные по энергии. Поскольку любая разностная схема для решения данной задачи обладает погрешностью, с физической точки зрения в каждом расчете траектории, кроме вычисленной силы, которая является «точной», на систему действует псевдосила (погрешность системы). Поэтому максимум, чего можно ожидать от разностной схемы при консервативности по импульсу — равенства нулю работы этой псевдосилы по траектории. В этом случае энергия (в среднем по траектории) будет флуктуировать около истинного значения, а источник накачки энергии, обязанный своим происхождением погрешности разностной схемы, отсутствует. Простейшей из таких схем является разностная схема Эйлера. Отметим, что применение схем высокого порядка точности в МД расчетах нецелесообразно по двум причинам: 1) ввиду экспоненциального поведения потенциалов межатомного взаимодействия, увеличение порядка точности схемы не приводит к соответствующему уменьшению шага; 2) изменение в широких пределах шага разностной схемы не изменяет статистических результатов МД расчета, хотя каждая отдельная траектория при этом может значительно изменяться.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Куни С.* Вычислительная физика. М.: Мир, 1992.
2. *Федоренко Р. П.* Введение в вычислительную физику. М.: Изд-во МФТИ, 1994.
3. *Валуев А. А., Норман Г. Э., Подлипчук В. Ю.* — В сб.: Математическое моделирование. М.: Наука, 1989, с. 5–40.