

При численном решении задач механики сплошных сред весьма перспективным является метод молекулярной динамики (МД), который состоит в решении уравнений движения для системы атомов, обладающих некоторыми потенциалами взаимодействия. Проблемы выбора потенциалов и разностных схем активно обсуждаются в иностранной (см., например [1,2]) и в отечественной литературе (см., например [3,4]). Последние достижения и обзор работ по этой теме представлен в [5].

Точное решение задачи Коши для уравнений Гамильтона, определяющих движение атомов, порождает унивалентное каноническое преобразование, которое сохраняет фазовый объём системы и универсальный инвариант Пуанкаре [6]. Поэтому широкое распространение получили разностные схемы, называемые симплектическими, которые обладают теми же свойствами. Предложенная в данной работе численная схема также принадлежит к классу симплектических и строится на основе теорем, доказанных в [7].

В данной работе было исследовано сохранение интегралов движения для предложенной численной схемы, а именно импульса, кинетического момента и энергии. Было показано, что импульс и кинетический момент сохраняются точно при применении схемы к любой гамильтоновой системе, квадратичной по импульсам:

$$H = \frac{p_1^2}{2} + \dots + \frac{p_n^2}{2} + U(\mathbf{q})$$

Для закона сохранения энергии относительная ошибка в точности равна нулю в случае, если потенциальная энергия квадратична по координатам (тогда уравнения Гамильтона линейны), а в общем случае составляет $O(\tau^2)$.

Было проведено сравнение численных схем третьего и пятого порядков сходимости со схемой Верле, в частности, было исследовано поведение численных решений для линейного гармонического осциллятора, системы из двух точек, взаимодействующих по закону Гука, трёх точек с аналогичным потенциалом взаимодействия, а также для двух точек кулоновским потенциалом взаимодействия и потенциалом Леннарда—Джонса. Кроме того, было рассмотрено поведение численного решения для гамильтониана, в котором не разделяются кинетическая и потенциальная энергии:

$$H = \frac{1}{2}(q_1^2 + p_1^2 + q_2^2 + p_2^2 + (q_1^2 + p_1^2)(q_2^2 + p_2^2))$$

Во всех численных экспериментах законы сохранения импульса и кинетического момента выполняются с точностью до погрешности округления. Закон сохранения энергии, как и предсказывают расчёты, выполняется точно в системах с квадратичной по координатам потенциальной энергией и с ошибкой второго порядка по шагу в остальных случаях. Схема Верле не даёт сохранения энергии в линейных схемах, показывая на всех гамильтонианах ошибку второго порядка. Для последнего гамильтониана энергия в предложенных схемах сохраняется точно, в то время как классическая схема Верле к нему неприменима вовсе.

Данная работа была представлена академиком В.Ф. Журавлевым в журнал «Доклады РАН».

Литература

1. *Tuckerman M.E.* Statistical Mechanics: Theory and molecular simulation. Oxford: Oxford Univ. Press, 2010.
2. *Hinchliffe A.* Molecular dynamics for beginners Chichester: Wilay, 2008.
3. *Фомин В.М., Головнев И.Ф.* Молекулярно-динамические исследования термомеханических свойств наноструктур // Механика – от дискретного к сплошному / Отв. ред. В.М. Фомин. Новосибирск: Изд-во СО РАН. 2008. С. 8 – 87.
4. *Псахье С.Г., Уваров Т.Ю., Зольников К.П.* О новом механизме генерации дефектов на границах раздела. Молекулярно-динамическое моделирование // Физ. Мезомеханика. 2000. Т. 3, № 3. С. 69 – 71.
5. *Киселев С.П.* Метод молекулярной динамики в механике деформированного твердого тела// ПМТФ. 2014. Т. 55, №3. С. 113 - 139.
6. *Журавлев В.Ф.* Основы теоретической механики. М.: Наука, 1997. 320 с.
7. *Петров А.Г.* Асимптотические методы решения уравнений Гамильтона с помощью параметризации канонических преобразований//Ж. Дифференц. уравнения. 2004, Т.40, №5. С. 626-638.