

doi 10.26089/NumMet.v25r217

УДК 519.63.4:532.51.5

Анализ эффективности симплектических схем высокого порядка точности на примере задачи о соударении наночастицы с преградой

Е. В. Ворожцов

Институт теоретической и прикладной механики имени С. А. Христиановича СО РАН,
Новосибирск, Российская Федерация

ORCID: 0000-0003-2753-8399, e-mail: vorozh@itam.nsc.ru

Аннотация: Работа посвящена применению метода молекулярной динамики (МД) для численного моделирования высокоскоростного взаимодействия твердых тел. Численно смоделировано явление отскока медной наночастицы от алюминиевой пластины. Для схемы Верле и новой симплектической схемы FR50, полученной ранее автором, найдены интервалы временных шагов, такие, что при задании временного шага в этих интервалах не происходит дрейфа полной энергии. При этом дрейф полной энергии возникает в случае схемы FR50 при гораздо больших шагах, чем в случае метода Верле. На основе анализа результатов численного моделирования задачи о соударении наночастицы с преградой показана необходимость введения в рассмотрение нескольких критериев подобия по аналогии с механикой сплошных сред. Предложен быстрый простой компьютерный тест для отбраковки ЕАМ-потенциалов до начала решения основной МД-задачи.

Ключевые слова: молекулярная динамика, уравнения Гамильтона, соударение наночастицы с преградой, ЕАМ-потенциалы, многокомпонентные системы, симплектические разностные схемы.

Благодарности: Работа выполнена в рамках государственного задания ИТПМ СО РАН.

Для цитирования: Ворожцов Е.В. Анализ эффективности симплектических схем высокого порядка точности на примере задачи о соударении наночастицы с преградой // Вычислительные методы и программирование. 2024. 25, № 2. 214–237. doi 10.26089/NumMet.v25r217.

An analysis of the efficiency of higher-order symplectic schemes by the example of a problem of the collision of a nanoparticle with an obstacle

Evgenii V. Vorozhtsov

Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics SB RAS,
Novosibirsk, Russia

ORCID: 0000-0003-2753-8399, e-mail: vorozh@itam.nsc.ru

Abstract: The work is devoted to the application of the molecular dynamics (MD) method for numerical simulation of high-velocity interaction of solids. The phenomenon of the copper nanoparticle rebound from the aluminum plate has been simulated numerically. For the Verlet scheme and the new symplectic scheme FR50 obtained recently by the author, the intervals of time steps were found such that at the specification of the time step within these intervals, no drift of the total



energy occurs. The total energy drift arises in the case of the FR50 scheme at much larger time steps than in the case of the Verlet method. The need in introducing several similarity criteria by analogy with the continuum mechanics has been shown by analyzing the results of the numerical simulation of problems involving the nanoparticle collision with an obstacle. A rapid and simple computer test has been proposed for the rejection of the EAM potentials before starting to solve the main MD problem.

Keywords: molecular dynamics, Hamilton equations, collision of a nanoparticle with an obstacle, EAM potentials, multi-component systems, symplectic difference schemes.

Acknowledgements: The research was carried out within the state assignment of Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation.

For citation: E. V. Vorozhtsov, “An analysis of the efficiency of higher-order symplectic schemes by the example of a problem of the collision of a nanoparticle with an obstacle,” Numerical Methods and Programming. 25 (2), 214–237 (2024). doi 10.26089/NumMet.v25r217.

1. Введение. Одним из актуальных направлений исследований в механике твердого тела в настоящее время является изучение поведения материалов при их ударно-волновом нагружении методами молекулярной динамики (МД). Это направление исследований зародилось в середине 20-го века в связи с созданием новых импульсных технологий, требующих высоких концентраций энергии. Суть метода МД заключается в решении уравнений движения атомов, взаимодействующих через потенциал, зависящий от координат атомов. При использовании данного метода не требуется формулировать уравнения состояния. Как известно, получение этих уравнений является одной из сложнейших задач механики сплошных сред [1].

Еще одним достоинством метода МД по сравнению с классической механикой сплошных сред является то, что метод МД естественным образом учитывает влияние кристаллической структуры твердых тел на процессы их деформации и разрушения под действием динамических нагрузок.

Уравнения молекулярной динамики представляют собой обыкновенные дифференциальные уравнения Гамильтона для атомов твердого тела. Согласно теории этих уравнений, должен выполняться закон сохранения полной энергии системы частиц [2]. Естественно потребовать, чтобы и разностная схема обеспечивала сохранение полной энергии.

МД-уравнения имеют точное аналитическое решение в очень ограниченном числе случаев [2]. Поэтому в общем случае эти уравнения решаются численно с помощью разностных схем, в которых дифференциальный оператор заменяется разностным.

В [3] показано, что в пределе, когда число частиц в объеме стремится к ∞ , МД-уравнения переходят в известные уравнения механики сплошной среды.

Как известно, явные разностные схемы накладывают ограничение на шаг интегрирования [3–5]. С другой стороны, достоинством явных схем является простота их программной реализации. Кроме того, возросшее быстродействие персональных компьютеров позволяет решать с помощью явных схем многие важные прикладные задачи за приемлемое время. Поэтому в настоящей работе предпочтение отдается явным разностным схемам. Широкое распространение получила явная симплектическая схема Верле второго порядка точности [6]. Это связано с экономичностью данной схемы, так как при ее реализации требуется рассчитать параметры только на одном промежуточном слое. Как известно, схема Верле является частным случаем семейства многостадийных схем Рунге–Кутты–Нистрема (РКН) [3–5, 7]. В работах [4, 5] с помощью базисов Гребнера [8] и методов оптимизации были найдены многочисленные новые симплектические схемы с числом стадий от двух до пяти в семействе РКН-схем.

Практически одновременно с исследованиями РКН-семейства продолжался поиск более простых симплектических схем, требующих на каждом временном шаге меньшего количества арифметических операций. Актуальность этого поиска связана с тем, что метод МД вычислительно весьма трудоемкий, так как в нем приходится решать систему нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений для каждой частицы. Если количество частиц достаточно велико, становится необходимым использование суперкомпьютеров и распараллеливания для решения задачи за приемлемое время. Рут [9] впервые предложил более простые, чем РКН-схемы, семейства двух- и трехстадийных симплектических схем. Он нашел

в своем семействе трехстадийный метод третьего порядка точности. В работе [10] семейство Рута было обобщено на случай произвольного числа стадий и были получены в аналитическом виде две вещественные симплектические четырехстадийные схемы четвертого порядка точности. Существенный прогресс в решении проблемы нахождения *всех* вещественных симплектических схем четвертого порядка точности был достигнут в работе [11] с помощью применения параметрических базисов Гребнера, результатов и перестановок параметров схем. В результате было найдено 97 новых четырехстадийных схем в семействе Фориста–Рута. В [4, 5] было проведено сравнение точности явных симплектических схем порядков точности от второго до пятого на примере задачи Кеплера двух тел, имеющей аналитическое решение. Было показано, что схемы, имеющие более высокие порядки точности, чем схема Верле, обеспечивают намного меньшие относительные ошибки в полной энергии, чем схема Верле. Например, в случае схем четвертого и пятого порядков точности эти ошибки на шесть–семь десятичных порядков точности меньше, чем в случае схемы Верле. Несмотря на кажущуюся простоту метода МД, до сих пор недостаточно полно исследованы вопросы точности, устойчивости и дисперсии разностных схем для задач МД. В этой связи представляет интерес исследование применимости симплектических схем четвертого порядка точности для численного решения задач высокоскоростного взаимодействия твердых тел. В данной работе на примере задачи о соударении наночастицы меди с преградой из алюминия исследуется эффективность применения схемы четвертого порядка точности, найденной авторами [11].

2. Основные уравнения. В методе молекулярной динамики расчет движения N частиц осуществляется путем решения уравнений Гамильтона [2]

$$\frac{dx_{\alpha l}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_{\alpha l}}, \quad \frac{dp_{\alpha l}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_{\alpha l}}, \quad H(x_{\alpha l}, p_{\alpha l}) = \mathcal{K}(p_{\alpha l}) + V(x_{\alpha l}), \quad \mathcal{K}(p_{\alpha l}) = \sum_{l=1}^N \sum_{\alpha=1}^3 \frac{p_{\alpha l}^2}{2m_l}, \quad (1)$$

где t — время, l — номер частицы, α — номер координаты $x_{\alpha l}$ и импульса $p_{\alpha l}$, m_l — масса частицы, $\mathcal{K}(p_{\alpha l})$ — кинетическая энергия, $V(x_{\alpha l})$ — потенциальная энергия взаимодействия частиц, $H(x_{\alpha l}, p_{\alpha l})$ — гамильтониан системы частиц. Решение системы уравнений (1) при заданных начальных условиях $x_{\alpha l}(t=0) = x_{\alpha l}^0$, $p_{\alpha l}(t=0) = p_{\alpha l}^0$ представляет собой каноническое преобразование начального состояния в конечное состояние

$$x_{\alpha l} = x_{\alpha l}(x_{\alpha l}^0, p_{\alpha l}^0, t), \quad p_{\alpha l} = p_{\alpha l}(x_{\alpha l}^0, p_{\alpha l}^0, t). \quad (2)$$

Решение (2) уравнений Гамильтона (1) сохраняет фазовый объем (теорема Лиувилля [2]), условие сохранения этого объема имеет следующий вид [2]: $|G| = \left| \frac{\partial(x_{\alpha l}, p_{l\alpha})}{\partial(x_{\alpha l}^0, p_{\alpha l}^0)} \right| = 1$, где G — якобиан. Для дальнейшего изложения перепишем уравнения Гамильтона (1) для одной частицы в виде

$$dx_{\alpha}/dt = p_{\alpha}(t)/m, \quad dp_{\alpha}/dt = f_{\alpha}(x_{\alpha}), \quad H = \sum_{\alpha=1}^3 \frac{p_{\alpha}^2}{2m} + V(x_{\alpha}), \quad (3)$$

где $f_{\alpha}(x_{\alpha})$ — сила, действующая на частицу, $f_{\alpha}(x_{\alpha}) = -\partial H(x_{\alpha})/\partial x_{\alpha}$.

Важным следствием уравнений Гамильтона (1) является закон сохранения полной энергии. Чтобы доказать справедливость этого закона, сначала заметим, что полная энергия i -ой частицы является суммой кинетической и потенциальной энергий согласно (1). Тогда полная энергия замкнутой системы из N частиц выражается формулой

$$E = \sum_{l=1}^N \sum_{\alpha=1}^3 \left[\frac{p_{\alpha l}^2}{2m_l} + V_l(x_{\alpha l}) \right]. \quad (4)$$

Дифференцируя левую и правую части (4) по времени, с учетом уравнений движения (1) и соотношения $H = E$ получаем закон сохранения в гамильтоновой механике:

$$\dot{E} = \sum_{l=1}^N \sum_{\alpha=1}^3 \left(p_{\alpha l} \frac{\dot{p}_{\alpha l}}{m_l} + \frac{\partial V_l}{\partial x_{\alpha l}} \dot{x}_{\alpha l} \right) = \sum_{l=1}^N \sum_{\alpha=1}^3 \left[\frac{p_{\alpha l}}{m_l} \left(-\frac{\partial V_l}{\partial x_{\alpha l}} \right) + \frac{\partial V_l}{\partial x_{\alpha l}} \cdot \frac{p_{\alpha l}}{m_l} \right] = 0, \quad (5)$$

где точка обозначает дифференцирование по t .

Уравнениям Гамильтона (3) соответствует однопараметрическая группа Ли в пространстве канонических переменных (x_{α}, p_{α}) [12]

$$\frac{dz}{dt} = \hat{L}z, \quad \hat{L} = \sum_{\alpha=1}^3 \left(\frac{\partial H}{\partial p_{\alpha}} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} - \frac{\partial H}{\partial x_{\alpha}} \frac{\partial}{\partial p_{\alpha}} \right), \quad (6)$$



где $z = (x_\alpha, p_\alpha)$, \hat{L} — оператор Лиувилля. Ниже мы рассматриваем для простоты одномерный случай $\alpha = 1$. Опуская индекс α , запишем решение уравнения (6) в виде

$$z(t) = \hat{U}z(0), \quad \hat{U} = \exp(\hat{L}t), \quad \hat{L} = \hat{L}_1 + \hat{L}_2, \quad \hat{L}_1 = \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{L}_2 = -\frac{\partial H}{\partial x} \frac{\partial}{\partial p}. \quad (7)$$

Пропагаторы \hat{U} образуют однопараметрическую группу Ли и удовлетворяют групповым соотношениям: $\hat{U}(t_1)\hat{U}(t_2) = \hat{U}(t_1 + t_2)$, $\hat{U}^{-1} = \exp(-\hat{L}t)$, $\hat{U}(0) = I$, $\hat{U}\hat{U}^{-1} = I$. Уравнения (7) лежат в основе пропагаторного метода построения симплектических схем [13–16].

3. Постановка задачи о соударении медной наночастицы с алюминиевой пластиной при наличии недеформируемых стенок. Задача о высокоскоростном соударении металлического шарика с металлической преградой является достаточно трудной задачей для метода молекулярной динамики, потому что в области взаимодействия ударника и преграды возникают большие градиенты решения. Предполагается, что в общем случае материалы ударника и преграды различные. Будем решать задачу в трехмерной постановке. Пусть N — общее количество частиц металлов в задаче, $N \gg 1$. Согласно (1), нужно решить следующую систему из $3N$ обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\frac{dx_{\alpha i}}{dt} = \frac{p_{\alpha i}}{m_i}, \quad \frac{dp_{\alpha i}}{dt} = f_{\alpha i}, \quad \alpha = 1, 2, 3, \quad i = 1, \dots, N. \quad (8)$$

Здесь

$$f_{\alpha i} = -\partial V(x_{\alpha 1}, \dots, x_{\alpha N}) / \partial x_{\alpha i}, \quad \alpha = 1, 2, 3, \quad i = 1, \dots, N, \quad (9)$$

где $V(\cdot)$ — потенциал межатомного взаимодействия. Как будет показано в следующем разделе, может быть использован потенциал вида $V = \sum_{i=1}^N V_i(r_{ij})$, где r_{ij} — расстояние между i -й и j -й частицами, т.е. $r_{ij} = \sqrt{\sum_{\alpha=1}^3 (x_{\alpha i} - x_{\alpha j})^2}$. Тогда сила, действующая на i -й атом, выражается формулой

$$f_{\alpha i} = -\sum_{j \neq i} \sum_i \frac{\partial V_i(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \frac{x_{\alpha i} - x_{\alpha j}}{r_{ij}},$$

откуда получаем:

$$\mathbf{f}_i = -\sum_{j \neq i} \mathbf{f}_{ij} = -\sum_{j \neq i} \frac{\partial V(r_{ij})}{\partial \mathbf{r}_{ij}} = -\sum_{j \neq i} \left(\frac{\partial V_i(r_{ij})}{\partial r_{ij}} + \frac{\partial V_j(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \right) \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}}, \quad (10)$$

где \mathbf{f}_{ij} — сила взаимодействия i -го и j -го атомов.

Для системы (8) задаются начальные координаты и импульсы при $t = 0$:

$$x_{\alpha i} = x_{\alpha i}^0, \quad p_{\alpha i} = p_{\alpha i}^0, \quad \alpha = 1, 2, 3, \quad i = 1, \dots, N. \quad (11)$$

Алюминиевая пластина имеет толщину $A_1 = 12 \text{ \AA}$. Грани пластины, перпендикулярные оси x_2 , являются квадратами с длиной стороны $A_2 = 72 \text{ \AA}$. Таким образом, пластина имеет грани (рис. 1)

$$\begin{aligned} \Gamma_1^\pm &= \{(x_1, x_2, x_3) | -0.5A_2 \leq x_1, x_3 \leq 0.5A_2, x_2 = 0.5(A_1 \pm A_1)\}, \\ \Gamma_2^\pm &= \{(x_1, x_2, x_3) | -0.5A_2 \leq x_1 \leq 0.5A_2, x_2 = 0.5(A_1 \pm A_1), x_3 = \pm 0.5A_2\}, \\ \Gamma_3^\pm &= \{(x_1, x_2, x_3) | -0.5A_2 \leq x_1, x_3 \leq 0.5A_2, x_2 = 0.5(A_1 \pm A_1)\}. \end{aligned}$$

Пластина помещена в кювету, грани которой $\Gamma_1^\pm, \Gamma_2^\pm, \Gamma_3^+$ являются недеформируемыми. Грань Γ_3^- не накладывает ограничений на перемещение частиц пластины и сферического ударника. Ударник имеет заданный радиус $R = 12 \text{ \AA}$ и его центр лежит на оси x_2 (рис. 1).

Отсутствие деформаций граней $\Gamma_1^\pm, \Gamma_2^\pm, \Gamma_3^+$ обеспечивалось двумя способами. В первом способе частицы, лежащие на указанных гранях, также перемещались из тех положений, которые они имели в

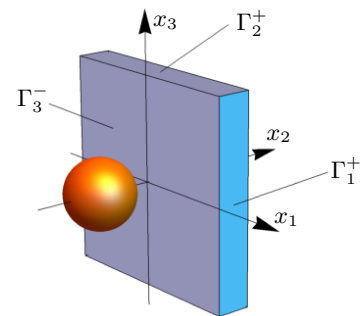


Рис. 1. Начальная конфигурация сферического ударника и преграды

Fig. 1. Initial configuration of the spherical projectile and obstacle

момент времени t_n , в положение, соответствующее времени $t_{n+1} = t_n + h$, где h — временной шаг. После завершения расчета на $(n + 1)$ -м слое по t частицы, которые лежали до перехода на временной слой t_{n+1} на недеформируемых гранях, принудительно возвращались в свои начальные положения. Эта операция перемещения частиц в их исходные положения производилась на каждой из стадий K -стадийного метода.

Во втором способе запоминались в множестве M_{sb} при $t = 0$ номера частиц, лежащих на недеформируемых гранях пластины. При расчете движения частиц по K -стадийной схеме частицы, номера которых принадлежали множеству M_{sb} , освобождались от пересчета их координат и импульсов на каждой стадии K -стадийного метода при переходе от момента времени t_n к моменту времени $t_n + h$. Этот способ обеспечивал существенную экономию машинного времени, потому что суммарно при выполнении вычислений на K стадиях освобождались при $K = 4$ от перерасчета $4 \cdot N_{sb}$ частиц, принадлежащих множеству M_{sb} . Если мишень в виде пластины достаточно тонкая, то величина $K \cdot N_{sb}$ сравнима с общим количеством атомов в мишени, что и обеспечивает существенное снижение потребного машинного времени по сравнению с первым способом учета наличия недеформируемых стенок.

Участие частиц, лежащих на недеформируемых гранях пластины, в расчете движения остальных частиц необходимо для физически правильного расчета. Действительно, когда i -я частица, которая ранее находилась внутри пластины или внутри шарика, сближалась с частицами недеформируемой стенки, на эту частицу начинали действовать отталкивающие силы, поэтому i -я частица не могла пересечь недеформируемую стенку.

Хорошо известно, что в случае меди (Cu) и алюминия (Al) их атомная решетка, состоящая из кубических ячеек, имеет гранецентрированную кубическую (ГЦК) структуру [17–19]. ГЦК-решетка характеризуется тем, что в четырех углах каждой грани кубической ячейки кристаллической решетки имеется по одному атому. Кроме того, имеется еще один атом в центре грани. Поэтому в начальный момент времени $t = 0$ атомы меди и алюминия размещались в узлах ГЦК-решетки. Отметим, что расстояние между атомами, лежащими на одной грани ячейки, различно для Al и Cu; оно находится с помощью рентгеноструктурного анализа и дается в справочниках, см. также [17, 19, 20]. Обозначим через a_{Cu} расстояние между атомами меди, лежащими в двух соседних углах одной грани. Согласно [17, 19, 20], $a_{Cu} = 3.62 \text{ \AA}$. Аналогично, для алюминия $a_{Al} = 4.05 \text{ \AA}$.

Атомы меди в сферическом ударнике имели начальный вектор скорости $\mathbf{V}^0 = (0, v_0, 0)$, где $v_0 > 0$ — заданная величина, например, $v_0 = 1000$ м/с. Таким образом, медный шарик двигался вдоль оси x_2 в направлении возрастания значений x_2 . В пластине все атомы предполагались при $t = 0$ в состоянии покоя, т.е. $p_{1i}^0 = p_{2i}^0 = p_{3i}^0 = 0$ в (11).

Ниже мы рассматриваем также упрощенный вариант вышеописанной задачи: все грани пластины являются свободными поверхностями. Это означает, что атомы пластины не ограничены в своих перемещениях под воздействием высокоскоростного удара наночастицы по ней.

4. Выбор потенциала межатомного взаимодействия для многокомпонентных систем. Выбор потенциала межатомного взаимодействия является ключевым вопросом метода МД, потому что именно потенциал полностью описывает реальное физическое взаимодействие частиц друг с другом. Ниже в данной работе для описания взаимодействия атомов в металлах используются ЕАМ-потенциалы, полученные методом погруженного атома (Embedded Atom Method). Поскольку прикладная задача, сформулированная в следующем разделе, включает в себя два различных металла, то мы имеем дело с двухкомпонентной системой. Первые работы [21–23], посвященные построению потенциалов в случаях многокомпонентных систем, появились практически сразу после первых пионерских работ, в которых был предложен метод ЕАМ. В ЕАМ-формулировке изначально заложена возможность описания систем, состоящих из атомов различных веществ. ЕАМ-потенциалы явно учитывают влияние электронов подсистемы на взаимодействие атомов металла.

Первоначально ЕАМ-потенциал был предложен для описания переходных металлов с гранецентрированной кубической (ГЦК) решеткой и объемноцентрированной кубической (ОЦК) решеткой [22, 24]. Затем ЕАМ-потенциал был обобщен на металлы с гексагональной плотноупакованной (ГПУ) решеткой [25]. В настоящее время имеется большое количество работ, в которых теория ЕАМ-потенциалов уточняется и развивается для переходных металлов и их сплавов.

В металлах валентные электроны слабо связаны с ядрами, поэтому отрываются от них и образуют электронную ферми-жидкость [26]. Образовавшиеся ионы расположены в узлах решетки и погружены в электронную жидкость.



Электронная плотность ρ_i в точке \mathbf{r}_i , где находится i -й атом, определяется в виде линейной суперпозиции электронных плотностей ρ_{ij} , создаваемых j -ми атомами:

$$\rho_i = \sum_{j \neq i}^{N_c} \rho_{ij}(r_{ij}), \quad (12)$$

где N_c — число атомов, заключенных в сфере с радиусом обрезания r_c . В случае однокомпонентной системы радиус обрезания вычислялся по формуле $r_c = \sqrt{2}a$, где a — расстояние между атомами в кристаллической решетке металла; $\sqrt{2}a$ — расстояние между двумя атомами, лежащими на диагонали на грани гранецентрической решетки. В случае двухкомпонентной системы (Cu, Al) радиус обрезания вычислялся по формуле $r_c = \max(r_c^{\text{Cu}}, r_c^{\text{Al}})$. В формуле (12) полагается, что после осреднения по углам плотность ρ_{ij} зависит только от расстояния r_{ij} . При увеличении расстояния от ядра плотность электронов уменьшается, поэтому для аппроксимации ρ_{ij} используется выражение [19]

$$\rho_{ij}(r_{ij}) = \xi^2 \exp(-2q(r_{ij}/r_0 - 1)), \quad (13)$$

где r_0 — равновесное расстояние между ближайшими соседями, ξ и q — константы аппроксимации. Согласно теории функционала электронной плотности [27], энергию взаимодействия ионов с электронной жидкостью можно представить в виде функции $F_i(\rho_i)$, зависящей от электронной плотности в основном состоянии. Притяжение ионов возникает за счет их взаимодействия с электронной жидкостью, находящейся между ними. Увеличение электронной плотности жидкости ρ_i должно приводить к увеличению силы притяжения ионов, поэтому эта функция должна удовлетворять неравенствам $F(\rho) < 0$, $dF/d\rho < 0$. Энергия взаимодействия ионов через электронную жидкость $F_i(\rho_i)$ может быть аппроксимирована следующим образом [28]:

$$F_i(\rho_i) = -\sqrt{\rho_i}. \quad (14)$$

Заметим, что в литературе используются и другие аппроксимации $F(\rho)$, удовлетворяющие указанным выше неравенствам [23]. С учетом сказанного выражение для потенциальной энергии, приходящейся на один атом, записывается в виде

$$V_i = F_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^{N_c} \varphi(r_{ij}). \quad (15)$$

Второй член в формуле (15) описывает отталкивание ионов вследствие парного кулоновского взаимодействия $\varphi(r_{ij}) = Z'_i(r_{ij})Z'_j(r_{ij})/r_{ij}$, где Z'_i и Z'_j — эффективные заряды ионов. В результате экранирования зарядов ионов электронами при увеличении расстояния функция $\varphi(r_{ij})$ монотонно убывает, поэтому, как правило, она аппроксимируется формулой [24]

$$\varphi(r_{ij}) = A \exp(-\gamma(r_{ij}/r_0 - 1)), \quad (16)$$

где A и γ — константы аппроксимации. Для подбора констант аппроксимации в формулах (13)–(16) для энергии когезии E_{cog} , энергии образования вакансии E_v , упругих констант C_{ijkl} используются экспериментальные значения и результаты квантово-механических расчетов из первых принципов (ab initio) [29].

Поскольку уравнение (15) инвариантно относительно преобразования $\varphi'(r_{ij}) = \varphi(r_{ij}) + 2\lambda\rho_{ij}(r_{ij})$, $F'_i(\rho_i) = F_i(\rho_i) - \lambda\rho_i$, сделанный выше выбор функций $F_i(\rho_i)$ и $\varphi(r_{ij})$ является неоднозначным с точностью до данного преобразования. Выбирая параметр λ , можно добиться выполнения условия $\frac{dF_i(\rho_i)}{d\rho_i} = 0$ в равновесном состоянии при температуре $T = 0$.

Поскольку функции $\rho_{ij}(r_{ij})$ и $\varphi(r_{ij})$ являются монотонно убывающими функциями расстояния между ионами (13), (16), вкладом j -х ионов, расположенных на достаточно большом расстоянии от i -го иона, можно пренебречь. Для этого вводится радиус обрезания r_c путем модификации этих функций, так чтобы при $r_{ij} > r_c$ их значения были равны нулю. В результате потенциал (15) равен нулю при $r_{ij} > r_c$.

При выполнении данной процедуры необходимо учитывать, что в окрестности точки обрезания $r_{ij} \approx r_c$ возникает дополнительная сила $\Delta f_i \sim \partial V_i / \partial r_c$, которая может повлиять на поведение атомной системы.

Сила, действующая на i -й атом, получается при дифференцировании потенциала (15) по координатам r_{ij} и суммировании по всем j -м атомам, находящимся внутри сферы $r_{ij} < r_c$. Подставляя потенциал

(15) в формулу (10), с учетом радиуса обрезания и формул

$$\mathbf{f}_i = \sum_{\alpha=1}^3 f_{\alpha i} \mathbf{e}_\alpha, \quad \mathbf{f}_{ij} = \sum_{\alpha=1}^3 f_{\alpha ij} \mathbf{e}_\alpha, \quad \mathbf{r}_{ij} = \sum_{\alpha=1}^3 (x_{\alpha i} - x_{\alpha j}) \mathbf{e}_\alpha$$

получаем выражение для α -компоненты силы, действующей на i -й атом:

$$f_{\alpha i} = \sum_{j \neq i} f_{\alpha ij} = - \sum_{j \neq i}^{N_c} \left[\left(\frac{\partial F_i(\rho_i)}{\partial \rho_i} + \frac{\partial F_j(\rho_j)}{\partial \rho_j} \right) \frac{\partial \rho_{ij}}{\partial r_{ij}} + \frac{\partial \varphi(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \right] \frac{x_{\alpha i} - x_{\alpha j}}{r_{ij}}.$$

Здесь

$$\frac{\partial F_i(\rho_i)}{\partial \rho_i} = -\frac{1}{2\sqrt{\rho_i}}, \quad \frac{\partial \rho_{ij}}{\partial r_{ij}} = -\frac{2q\xi^2}{r_0} \exp \left[-2q \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right) \right] \quad \text{и т.д.}$$

Взаимодействие атома Cu (“11”) с атомом Al (“22”) рассчитывалось по следующим формулам [19, 30]:
 $\rho_{ij}^{(12)} = (\rho_{ij}^{(11)} \rho_{ij}^{(22)})^{1/2}$, $\varphi_{ij}^{(12)} = (\varphi_{ij}^{(11)} \varphi_{ij}^{(22)})^{1/2}$.

Обезразмеривание размерных величин осуществлялось следующим образом: в качестве характерных размерных величин длины x_0 и времени t_0 использовались значения $x_0 = 10^{-10}$ м = 1 Å, $t_0 = 10^{-12}$ с = 1 пс; характерная масса $m_0 = 1.6 \cdot 10^{-23}$ кг; характерная размерная скорость $v_0 = \frac{x_0}{t_0} = \frac{10^{-10} \text{ м}}{10^{-12} \text{ с}} = 100$ м/с. Обозначим безразмерные длину, время, скорость и массу через \bar{x} , \bar{t} , $\bar{v}_{\alpha i}$, \bar{m} . Тогда

$$\bar{x}_{\alpha i} = x_{\alpha i}/x_0, \quad \bar{t} = t/t_0, \quad \bar{v}_{\alpha i} = v_{\alpha i}/v_0, \quad \bar{m} = m/m_0. \quad (17)$$

Далее, из (8) и (9) получаем уравнение $dp_{\alpha i}/dt = -\partial V/\partial x_{\alpha i}$. Перейдем в этом уравнении к безразмерным переменным:

$$d(\bar{p}_{\alpha i} \cdot m_0 v_0)/d(\bar{t} t_0) = -\partial(\bar{V} V_0)/\partial(\bar{x}_{\alpha i} x_0), \quad (18)$$

где V_0 — характерное размерное значение функции V . Подберем V_0 из требования, чтобы уравнение для импульса в безразмерных переменных имело такой же вид, как и уравнение для импульса в размерных переменных. Тогда из (18) находим: $V_0 = m_0(x_0/t_0)^2 = 1.6 \cdot 10^{-19}$ Дж = 1 эВ.

Если число моделируемых атомов достаточно велико, то можно определить температуру и плотность, используя осреднение по объему [3]. Проиллюстрируем процесс вычисления средней температуры на примере сферического ударника. Пусть атомы меди в шарике пронумерованы от $i = 1$ до $i = N_s$ и пусть T — средняя температура медного шарика. Пусть $p_{1i}^0, p_{2i}^0, p_{3i}^0$ — компоненты вектора импульса i -й частицы в равновесном состоянии. Обозначим через \bar{p}_α^0 среднее значение α -компоненты импульса частиц меди в равновесном состоянии, т.е. $\bar{p}_\alpha^0 = \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} p_{\alpha i}^0$. В равновесном состоянии атомы твердого тела совершают малые колебания и поэтому представляют собой набор N_s осцилляторов. Согласно закону равнораспределения [31], на каждую степень свободы осциллятора приходится энергия $\frac{1}{2} k_B T_{\text{Cu}}$, где k_B — постоянная Больцмана, $k_B = 1.380649 \cdot 10^{-23}$ Дж/К. Отсюда следует, что для $3N_s$ степеней свободы $p'_{\alpha i} = p_{\alpha i}^0 - \bar{p}_\alpha^0$, $\alpha = 1, 2, 3$, $i = 1, \dots, N_s$, выполняется соотношение

$$\frac{3N_s k_B T}{2} = \sum_{i=1}^{N_s} \frac{(p'_{1i})^2 + (p'_{2i})^2 + (p'_{3i})^2}{2m},$$

где m — масса атома меди. Отсюда следует формула для определения средней температуры шарика:

$$T = \frac{1}{3N_s k_B} \sum_{i=1}^{N_s} \frac{(p'_{1i})^2 + (p'_{2i})^2 + (p'_{3i})^2}{m}. \quad (19)$$

Заметим, что суммарный импульс $\sum_{i=1}^{N_s} p'_{\alpha i}$ равен нулю. Действительно,

$$\sum_{i=1}^{N_s} p'_{\alpha i} = \sum_{i=1}^{N_s} (p_{\alpha i}^0 - \bar{p}_\alpha^0) = \sum_{i=1}^{N_s} p_{\alpha i}^0 - \bar{p}_\alpha^0 \sum_{i=1}^{N_s} 1 = \sum_{i=1}^{N_s} p_{\alpha i}^0 - N_s \bar{p}_\alpha^0 = \sum_{i=1}^{N_s} p_{\alpha i}^0 - N_s \cdot \left(\frac{1}{N_s} \right) \sum_{i=1}^{N_s} p_{\alpha i}^0 = 0.$$



Средняя плотность в атомной системе находится по формуле

$$\rho = mN_c/V_c,$$

где V_c — объем усреднения, N_c — число атомов в объеме V_c . Тензор напряжения вычисляется по формуле [3]

$$\sigma_{\alpha\beta} = -\frac{1}{V_c} \left(\sum_{i \in V_c} m v'_{\alpha i} v'_{\beta i} + \frac{1}{2} \sum_{i \in V_c} \sum_{j \neq i} f_{\alpha ij} f_{\beta ij} \right). \quad (20)$$

Средние значения ρ, T хорошо определены, если число атомов в объеме V_c велико, $N_c > 10^3$.

При расчетах задач высокоскоростного взаимодействия тел мы использовали константы ξ, A, q, γ, r_0 для меди и алюминия из работ [18, 19], они приведены в табл. 1. Массы атома меди и атома алюминия в килограммах: $m^{\text{Cu}} = 1.063 \cdot 10^{-25}$ кг, $m^{\text{Al}} = 4.48 \cdot 10^{-26}$ кг.

Таблица 1. Значения постоянных, входящих в EAM-потенциал
 Table 1. The values of the constants entering the EAM potential

Металл, источник Metal, source	ξ , eV	A , eV	q	γ	r_0 , Å
Cu, [19]	1.2355	0.0783	2.3197	11.1832	2.5560
Al, [19]	1.5074	0.1602	2.7456	1.5074	2.8634
Al, [18]	0.7981	0.0334	1.1120	14.6147	2.8119

5. Критерии подобия. Безразмерные параметры позволяют переносить результаты расчетов и экспериментов с одних геометрических размеров на другие и определять основные параметры задачи, от которых зависит характер протекающих физических процессов. Применение метода размерностей к задаче о соударении наночастицы с преградой имеет некоторые особенности, связанные с тем, что при описании соударения используются уравнения гамильтоновой механики. Как отмечалось выше, при моделировании динамического поведения большого числа атомов $N > 10^3$ методом МД, в объеме, занимаемом атомами, можно определить среднюю плотность ρ , температуру T и тензор напряжений $\sigma_{\alpha\beta}$. Это означает, что с помощью формул (19)–(20) можно перейти к описанию поведения наночастицы на уровне механики сплошных сред. В этом случае, в задаче о соударении наночастицы с преградой, для получения безразмерных параметров подобия можно также использовать Пи-теорему.

Выше в разделе 4 были уже введены величины x_0, t_0, v_0 — характерные длина, время, скорость, см. формулы (17). По аналогии с [32] введем следующие безразмерные параметры: $\bar{R} = R/x_0, \bar{d}_{\text{crat}} = d_{\text{crat}}/x_0, \bar{A}_1 = A_1/x_0, \bar{A}_2 = A_2/x_0$, где R — радиус сферического ударника, d_{crat} — размерная глубина кратера, она отсчитывается вдоль оси x_2 от начального положения грани пластины, обращенной к ударнику.

Далее, следуя [32], введем число Маха $M = V_0/c_{\text{п}}$, где $c_{\text{п}}$ — объемная скорость звука материала преграды, V_0 — скорость удара. Например, $c_{\text{п}} = 4700$ м/с для меди. Тогда при $V_0 = 1$ км/с получим: $M \approx 0.213$, т.е. течение дозвуковое. При соударении медных наночастиц с медной преградой в процессах холодного газодинамического напыления [33, 34] желателно применять скорость наночастиц порядка $V \approx 300$ м/с и температуру $T = 300$ К, тогда число Маха $M \approx 0.0638$.

Введем безразмерную скорость отскока наносферы $\bar{v}_{\text{reb}} = v_{\text{reb}}/v_0$, а также следующие безразмерные критерии [32]: $\Pi_1 = \rho_{\text{п}} c_{\text{п}}^2 / \sigma_{\text{п}}$, $\Pi_2 = \rho_{\text{у}} / \rho_{\text{п}}$, $\Pi_3 = \sigma_{\text{у}} / \sigma_{\text{п}}$, где $\rho_{\text{у}}, \rho_{\text{п}}$ — начальные плотности материалов ударника и преграды, $\sigma_{\text{у}}, \sigma_{\text{п}}$ — динамические прочностные характеристики ударника и преграды. Таким образом, решение задачи об ударе наносферы о пластину с недеформируемой тыльной стороной зависит от нескольких безразмерных параметров:

$$\bar{d}_{\text{crat}} = f_1(\bar{R}, \bar{A}_1, \bar{A}_2, M, \Pi_1, \Pi_2, \Pi_3), \quad \bar{v}_{\text{reb}} = f_2(\bar{R}, \bar{A}_1, \bar{A}_2, M, \Pi_1, \Pi_2, \Pi_3).$$

6. Схема Верле. До настоящего времени было разработано несколько семейств симплектических схем для численного решения уравнений Гамильтона (1) в случае распадающегося гамильтониана. Наиболее известные из них — семейство схем Рунге–Кутты–Нистрема [4, 5, 7] и семейство схем Фориста–Рута [5, 10, 11, 35]. Последнее семейство относится к классу расщепленных схем Рунге–Кутты; будем ссылаться на него как на семейство PRK-схем, где PRK — сокращение слов “Partitioned Runge–Kutta”.

Из сравнения РКН-схем и PRK-схем следует, что на каждой стадии PRK-метода формулы короче, чем в случае метода РКН. Отсюда ясно, что схемы семейства РКН требуют при своем практическом применении бóльших расходов машинного времени, чем схемы с тем же числом стадий из семейства PRK-схем. Нами были программно реализованы в [4, 5] схемы семейства РКН с числом стадий $K = 1, 2, 3, 4, 5$. Семейство PRK-схем было программно реализовано для произвольного числа стадий, но конкретные параметры заданы в компьютерной программе только для $K = 3$ и $K = 4$.

Несмотря на то, что схема Верле одностадийная, она имеет второй порядок аппроксимации [4, 5]. Благодаря этому и своей простоте схема Верле была к настоящему времени реализована согласно [30] в следующих пакетах программ: AL_CMD, Amber, CHARMM, DL_POLY, EGO, GROMACS, GROMOS, IMD, LAMMPS, Moldy, MOSCITO, NAMD, OPLS, ORAC, PMD, SIgMA, SPaSM, YASP, Pbody, GADGET, HYDRA.

Ниже мы представим схему Верле на примере ее применения к случаю движения одной частицы. Соответствующие уравнения имеют следующий вид:

$$dx/dt = p/m, \quad dp/dt = f(x), \quad f(x) = -\partial V(x)/\partial x. \quad (21)$$

Схема Верле для системы (21) имеет следующий вид:

$$x^{(1)} = x^n + \frac{h}{2} \frac{p^n}{m}, \quad x^{n+1} = x^n + h \frac{p^n}{m} + \frac{h^2}{2m} f(x^{(1)}), \quad p^{n+1} = p^n + hf(x^{(1)}).$$

При численном интегрировании системы обыкновенных дифференциальных уравнений (1) с помощью разностных схем полная энергия не сохраняется. В частности, в [36] показано, что изменение полной энергии на шаге по времени описывается в случае схемы Верле формулой $E^{n+1} - E^n \approx C_1 h^3$, где

$$C_1 = \frac{1}{12} \sum_{i,j,k} \frac{\partial^3 V(x_i^n)}{\partial x_k \partial x_j \partial x_i} \dot{x}_i^n \dot{x}_k^n \dot{x}_j^n. \quad (22)$$

Пусть E^0 — полная энергия системы частиц в начальный момент времени $t = 0$. Тогда изменение полной энергии $E^n - E^0$ после выполнения n шагов по времени можно выразить так:

$$E^n - E^0 = E^n - E^{n-1} + E^{n-1} - \dots + E^1 - E^0 = \sum_{k=1}^n (E^k - E^{k-1}) \approx \sum_{k=1}^n C_{1k} h^3. \quad (23)$$

Предположим, что производные, входящие в (22), имеют порядок малости $O(1)$. Тогда получаем из (23):

$$E^n - E^0 = h^3 \cdot \sum_{k=1}^n O(1) = h^3 \cdot n \cdot O(1). \quad (24)$$

Если выполнено достаточно большое количество шагов по t , такое, что $nh = O(1)$, то из (24) получаем: $E^n - E^0 = O(h^2)$. Поэтому имеет смысл вычислять относительную погрешность δE^n полной энергии по формуле

$$\delta E^n = (E^n - E^0)/E^0. \quad (25)$$

7. Семейство четырехстадийных интеграторов Фориста–Рута. Рассматриваемое семейство симплектических разностных схем принадлежит классу расщепленных схем Рунге–Кутты (PRK-схем) [9, 10, 35]. В основе PRK-схем лежит пропагаторный метод, который определяется соотношениями (7). В случае распадающегося гамильтониана они имеют следующий вид:

$$z(t) = \hat{U}z(0), \quad \hat{U} = \exp[(\hat{L}_1 + \hat{L}_2)t], \quad \hat{L}_1 = \frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{L}_2 = f(x) \frac{\partial}{\partial p}, \quad f(x) = -\frac{\partial V}{\partial x}.$$

Если на n -м временном слое t^n известны значения $z^n = (x^n, p^n)$, то на $(n+1)$ -м временном слое $t^{n+1} = t^n + h$ получим

$$z^{n+1} = \exp[(\hat{L}_1 + \hat{L}_2)h]z^n. \quad (26)$$

Разобьем переход $t^n \rightarrow t^{n+1}$ на K стадий. Аппроксимируем пропагатор (26) произведением пропагаторов с точностью $O(h^{\lambda+1})$:

$$\exp[(\hat{L}_1 + \hat{L}_2)h] = \prod_{s=1}^K \exp(d_s h \hat{L}_1) \exp(c_s h \hat{L}_2) + O(h^{\lambda+1}), \quad \sum_{s=1}^K c_s = 1, \quad \sum_{s=1}^K d_s = 1.$$



Здесь λ — порядок точности метода, он зависит от числа стадий K и коэффициентов c_s, d_s . Таким образом, решение на $(n + 1)$ -ом временном слое с точностью $O(h^\lambda)$ дается уравнением

$$\begin{aligned} z^{n+1} &= \prod_{s=1}^K \exp(d_s h \hat{L}_1) \exp(c_s h \hat{L}_2) z^n, \\ z^{(K)} &= z^{n+1} = (x^{n+1}, p^{n+1}), \quad z^{(0)} = z^n = (x^n, p^n). \end{aligned} \quad (27)$$

Из уравнений (26), (27) получим, что при переходе с $(i-1)$ -й на i -ю стадию справедливы соотношения [9, 10]

$$p^{(i)} = p^{(i-1)} + c_i h f(x^{(i-1)}), \quad x^{(i)} = x^{(i-1)} + d_i \frac{h}{m} p^{(i)}, \quad i = 1, \dots, K, \quad (28)$$

которые удовлетворяют условию $J = \frac{\partial(p^i, x^i)}{\partial(p^{i-1}, x^{i-1})} = 1$. Уравнения (28) определяют класс явных симплектических схем, порядок точности которых определяется числом стадий K и коэффициентами c_i, d_i . Точность каждой новой схемы оценивалась в [5, 11] путем вычисления двух квадратичных функционалов, содержащих многочлены, входящие в ведущие члены погрешностей аппроксимации уравнений для вычисления p^{n+1} и x^{n+1} :

$$P_{5,\text{rms}}^{(l)} = \left[(1/5) \sum_{j=1}^5 (\sigma_j P_{5j})^2 \right]^{1/2}, \quad X_{5,\text{rms}}^{(l)} = \{ [R_{51}^2 + (3R_{52})^2 + R_{53}^2] / 3 \}^{1/2}, \quad (29)$$

где многочлены $P_{5j}, j = 1, \dots, 5$, и $R_{5k}, k = 1, 2, 3$, даются следующими формулами [5, 11]:

$$\begin{aligned} P_{51} &= 1 + 20(-c_1^2(c_2 + c_3 + c_4)d_1^2 - 2c_1(c_1 + c_2)(c_3 + c_4)d_1d_2 - (c_1 + c_2)^2(c_3 + c_4)d_2^2 - \\ &\quad - 2(c_1 + c_2 + c_3)c_4(c_2d_2 + c_1(d_1 + d_2))d_3 - (c_1 + c_2 + c_3)^2c_4d_3^2), \\ P_{52} &= -1 + 120(c_1c_2(c_3 + c_4)d_1d_2 + c_4(c_1(c_2 + c_3)d_1 + (c_1 + c_2)c_3d_2)d_3), \\ P_{53} &= 1 - 10(c_2c_3d_2(d_1 + d_2)^2 + c_3c_4d_3(d_1 + d_2 + d_3)^2 + c_2c_4(d_2 + d_3)(d_1 + d_2 + d_3)^2 + \\ &\quad + c_1(c_2d_1^3 + c_3(d_1 + d_2)^3 + c_4(d_1 + d_2 + d_3)^3)), \\ P_{54} &= 1 - 12c_3c_4(d_1 + d_2)d_3(3(d_1 + d_2) + 2d_3) - 12c_2d_1(c_3d_2(3d_1 + 2d_2) + \\ &\quad + c_4(d_2 + d_3)(3d_1 + 2(d_2 + d_3))), \\ P_{55} &= 1 - 5c_2d_1^4 - 5c_3(d_1 + d_2)^4 - 5c_4(d_1 + d_2 + d_3)^4, \\ R_{51} &= 1 - 120(c_3c_4(d_1 + d_2)d_3d_4 + c_2d_1(c_4(d_2 + d_3)d_4 + c_3d_2(d_3 + d_4))), \\ R_{52} &= 1 - 40(c_3c_4d_1d_3d_4 + c_3c_4d_2d_3d_4 + c_3c_4d_3^2d_4 + \\ &\quad + c_2(c_4(d_2 + d_3)(d_1 + d_2 + d_3)d_4 + c_3d_2(d_1 + d_2)(d_3 + d_4)) + \\ &\quad + c_1(c_4(d_1 + d_2 + d_3)^2d_4 + c_3(d_1 + d_2)^2(d_3 + d_4) + c_2d_1^2(d_2 + d_3 + d_4))), \\ R_{53} &= 1 - 20(c_4(d_1 + d_2 + d_3)^3d_4 + c_3(d_1 + d_2)^3(d_3 + d_4) + c_2d_1^3(d_2 + d_3 + d_4)). \end{aligned}$$

Величины $\sigma_1, \dots, \sigma_5$ в (29) не зависят от специфики задачи, это коэффициенты при P_{5j} в ведущем члене погрешности аппроксимации четырехстадийной схемы для p^{n+1} , $\sigma_1 = -3, \sigma_2 = -1, \sigma_3 = 6, \sigma_4 = 5, \sigma_5 = 1$. Формула для $X_{5,\text{rms}}^{(l)}$ учитывает множитель 3 перед R_{52} в ведущем члене погрешности аппроксимации четырехстадийной схемы для x^{n+1} .

В табл. 2 приведены самые точные схемы, найденные в семействе Фориста–Рута; т.е. это схемы с наименьшими значениями функционалов погрешности [11]. Наряду с этой таблицей мы также приводим табл. 3, в которой даны параметры c_i и d_i , соответствующие двум схемам, найденным в [10]; этим схемам в [11] были даны имена FR9 и FR10. Значения $\zeta, \varphi_3, \varphi_4$ вычислялись по следующим формулам: $\zeta = 2^{1/3}$, $\varphi_3 = \frac{1}{12}(4 + 2\zeta + \zeta^2)$, $\varphi_4 = -\frac{1}{3}(1 + \zeta)^2$.

Верификация новых схем осуществлялась в [5, 11] на задаче Кеплера двух тел. Для этой задачи имеется точное решение [2]. В табл. 4 представлены результаты численного решения задачи Кеплера по схемам Верле, FR9, FR10, FR50. Эти расчеты выполнены в промежутке времени $[0, 500]$ с шагом $h = 0.005$, эксцентриситет орбит $e = 0.68$. Среднее значение $\delta E_{\text{ср}}$ относительной ошибки полной энергии вычислялось как среднее арифметическое величин $\delta E^n, n = 1, 2, \dots, 10^5$. Из табл. 4 следует, что в случае схемы FR50 погрешность $\delta E_{\text{ср}}$ на шесть десятичных порядков меньше, чем в случае схемы Верле, и на два порядка меньше, чем в случаях схем FR9 и FR10, описанных в [10].

Таблица 2. Значения параметров самых точных схем FRl в семействе Фориста–Рута
 Table 2. The values of the parameters of the most accurate schemes FRl in the Forest–Ruth family

FRl	c_i	d_i	$P_{5,rms}^{(l)}$	$X_{5,rms}^{(l)}$
FR47	4.290878395464025169	3.434400270740872001	0.0386	0.0708
	0.000963763146154897	-3.435707719128205871		
	-0.295364245574992759	-0.062976137694193308		
	-4.041842158610180066	0.656514850491044033		
	3/4	0.344792597896289836		
FR50	0.136825942475053071	1/2	0.0386	0.0708
	-0.295364245574992759	-0.062976137694193308		
	0.837926908632179149	0.440948891327570560		
	0.320611394467760539	0.122027246366622748		
FR51	-0.586438190415940380	1/2	0.0386	0.0708
	-0.075359198960140901	-0.430061540610022957		
	1.038753638680670670	0.676446958625960263		
	0.623043750695410612	0.253614581984062695		
FR52	0.182572224329682333	1/2	0.0386	0.0708
	0.744884110251947176	0.538588670363744296		
	0.141395996554118555	-0.758360900822698969		
	-0.068852331135748064	0.719772230458954673		
FR59	0.130496314992084781	0.545153172452857850	0.0559	0.0550
	-0.152112316952245843	-0.129275520560538766		
	2/3	0.445295236274126733		
	0.354949335293494396	0.138827111833554183		

Таблица 3. Значения параметров двух четырехстадийных схем FR9 и FR10 из работы [10]
 Table 3. The values of the parameters of two four-stage schemes FR9 and FR10 from the work [10]

FRl	c_1	c_2	c_3	c_4	d_1	d_2	d_3	d_4	$P_{5,rms}^{(l)}$	$X_{5,rms}^{(l)}$
FR9	0	$2\varphi_3$	φ_4	$2\varphi_3$	φ_3	$\frac{1}{2} - \varphi_3$	$\frac{1}{2} - \varphi_3$	φ_3	6.3431	2.5624
FR10	φ_3	$\frac{1}{2} - \varphi_3$	$\frac{1}{2} - \varphi_3$	φ_3	$2\varphi_3$	φ_4	$2\varphi_3$	0	4.6743	8.3036

Таблица 4. Величины δE_{cp} , полученные по различным методам при $e = 0.68$

Table 4. The quantities δE_{cp} obtained by different methods at $e = 0.68$

Метод Method	Верле Verlet	FR9	FR10	FR50
δE_{cp}	$1.746e - 6$	$1.062e - 10$	$-4.064e - 10$	$3.478e - 12$

8. Результаты численных расчетов задачи о соударении медной наночастицы с медной пластиной. В этом разделе рассматривается упрощенный вариант постановки задачи о соударении сферической наночастицы с преградой. Во-первых, предполагается, что материалы ударника и преграды одинаковые, а именно медь. Во-вторых, отсутствуют недеформируемые стенки у граней пластины, параллельных оси x_2 , а также у тыльной грани, которая перпендикулярна оси x_2 . Таким образом, все поверхности пластины являются свободными границами и их деформирование под действием сталкивающегося с ней медного сферического ударника ничем не ограничено.

В [30] приведены результаты численных расчетов задачи о соударении ударника с пластиной как в двумерной, так и трехмерной постановке. При этом в обеих постановках материал ударника и преграды



один и тот же. В двумерном случае ударник имел форму квадрата, а в трехмерном — форму куба. Использовался потенциал межатомного взаимодействия — потенциал Леннарда–Джонса, он подробно обсуждается в [30]. В этой же работе отмечалось, что применение более сложных потенциалов позволяет более реалистично моделировать методами молекулярной динамики столкновение твердых тел, чем в случае применения потенциала Леннарда–Джонса.

Программная реализация четырехстадийных схем из семейства Фориста–Рута была осуществлена следующим образом. Обозначим через N общее количество частиц в решаемой задаче; в частности, $N = 2$ в задаче Кеплера. В компьютерной программе решения задачи о соударении ударника с пластиной была использована программная реализация указанных схем из программы решения задачи Кеплера двух тел. При этом значение $N = 2$ было заменено на величину $N \gg 2$ — суммарное количество частиц, оно определялось в процессе построения ГЦК-сеток в ударнике и в преграде. И, наконец, гравитационный потенциал, использованный в задаче Кеплера, был заменен на ЕАМ-потенциал, обобщенный на случай наличия двух различных материалов в задаче высокоскоростного взаимодействия тел. Рассматриваемые ниже трехмерные задачи не имеют точных решений. Тем не менее о правильности программирования соответствующего МД-алгоритма можно судить по малости относительной погрешности полной энергии δE^n , соответствующие графики представлены ниже.

На рис. 2 показана блок-схема разработанной компьютерной программы. Программа написана на языке Фортран и реализована на персональном компьютере. С ее помощью численно решаются уравнения Гамильтона (8) при начальных данных (2). Имеются два варианта этой программы, в первом из которых реализовано семейство РКН-схем с числом стадий от одной до пяти (в том числе схема Верле). Во втором варианте реализовано семейство схем Фориста–Рута с числом стадий 3 и 4. При этом решатель уравнений Гамильтона запрограммирован для произвольного числа стадий, оно задается пользователем. Для графического отображения полученных результатов используется пакет программ *Mathematica* [37], в котором имеется большой раздел с описаниями функций компьютерной графики. Использование разработанной автором *Mathematica*-программы происходит весьма эффективно: достаточно открыть эту программу, и она сама считывает результаты счета по Фортран-программе из директории, указанной автором программы в ее начале, и показывает на экране монитора все нужные одно-, двух- и трехмерные графические объекты. В подпрограмме, разработанной для отрисовки первоначально сферической наночастицы, в *Mathematica*-программе используется система сферических координат. При этом не применяются никакие приемы для сглаживания этой поверхности, например с помощью поверхностей Безье. Это сделано для того, чтобы увидеть, насколько устойчив процесс счета по симплектическому методу.

Ниже мы приводим результаты трехмерных расчетов задачи о соударении медной сферы с медной пластиной, их размеры такие же, как в разделе 3. В отличие от [30], мы использовали в расчетах задачи соударения двух тел ЕАМ-потенциал, описанный в разделе 4. Требуемые константы для меди взяты из табл. 1. В начальный момент времени $t = 0$ век-

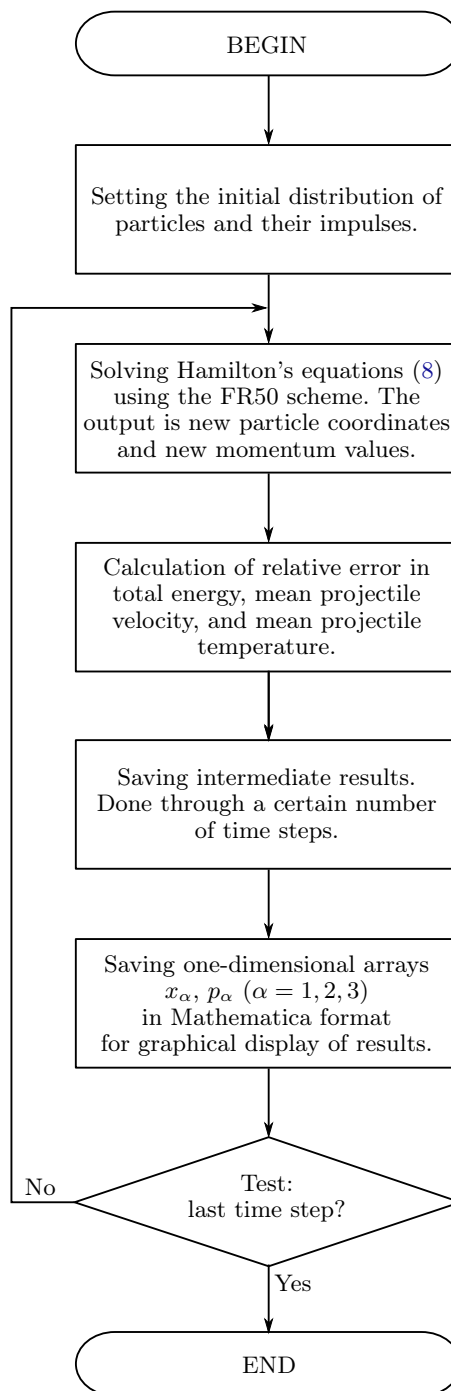


Рис. 2. Блок-схема программы

Fig. 2. Flow chart of the computer code

тор скорости частиц имел координаты $(0, v_0, 0)$, где $v_0 = 300$ м/с, т.е. медная наночастица двигалась в положительном направлении оси x_2 , см. рис. 1.

Радиус обрезания r_c подсчитывался следующим образом: брались два атома на грани, которые лежат на ее диагонали. Расстояние между этими двумя атомами подсчитывалось по теореме Пифагора: $r_c = \sqrt{a_{Cu}^2 + a_{Cu}^2} = \sqrt{2} a_{Cu} \approx 5.7269$ Å.

Расчеты преследовали две цели. Во-первых, подлежало выяснению определение такого максимально допустимого размера временного шага h , при котором счет по схемам Верле и FR50 остается устойчивым и при этом не происходит дрейф сохраняемой величины — полной энергии системы, состоящей из ударника и преграды. Второй целью описываемых в этом разделе результатов расчетов является демонстрация динамики деформирования наночастицы и пластины в процессе их высокоскоростного взаимодействия.

8.1. О подборе временного шага. Ввиду того, что временной шаг h входит в ведущий член погрешности симплектического метода, ясно, что выбор его значения влияет на точность численного решения и устойчивость вычислительного процесса, особенно если метод явный. Действительно, если будет превышено некоторое критическое значение h_{cr} , то счет становится неустойчивым и происходит очень быстрый рост относительной погрешности полной энергии δE^n , как будет показано ниже на примерах.

С другой стороны, при использовании значения шага h , обеспечивающего устойчивый счет, есть риск возникновения дрейфа полной энергии E^n , который выражается в том, что происходит постепенное изменение полной энергии замкнутой системы во времени [38–40]. Согласно (5), эта величина должна сохраняться во времени. Эти явления дрейфа полной энергии будут продемонстрированы ниже на примерах. В работе [40, С. 628] был рекомендован следующий диапазон значений шага h : 0.5 фс $\leq h \leq 4$ фс (фемтосекунд). Задание h в указанном диапазоне гарантирует, что не возникнет явление дрейфа полной энергии в процессе продвижения счета во времени. Указанный диапазон для выбора шага h был установлен в [40] для случая применения метода Верле для численного моделирования в молекулярной биологии. Кроме того, основным потенциалом межатомного взаимодействия в [40] является потенциал Леннарда–Джонса [30]. Но мы применяем ЕАМ-потенциал, который является намного более сложным. Ясно, что если этот потенциал применяется не для задач молекулярной биологии, а для задач механики твердого тела, то интервал допустимых значений временного шага с точки зрения недопущения дрейфа полной энергии может оказаться отличным от того интервала, который был рекомендован в [40] при решении задач молекулярной биологии. Поэтому при использовании симплектических схем для численного решения задач механики твердого тела допустимый интервал временных шагов должен быть найден с помощью серии пробных расчетов при различных значениях временного шага. Выгода от установления этого интервала состоит в том, что при наличии в решаемой задаче большого количества частиц (атомов) можно существенно снизить расход машинного времени, как это показано на примерах в [40].

На рис. 3 и 4 представлены кривые δE^n , полученные при различных шагах h , соответственно по схеме Верле и по схеме FR50. Величина δE^n вычислялась по формуле (25), где начальное значение E^0 полной энергии всей системы частиц в начальный момент времени, т.е. при $t = 0$, вычислялось по формуле (4). Потенциальная энергия вычислялась по формуле $V^n = \sum_i V_i$, где выражение для V_i дается формулой (15). В случае схемы Верле и $h = 0.015$ дрейф полной энергии начинается практически сразу после завершения

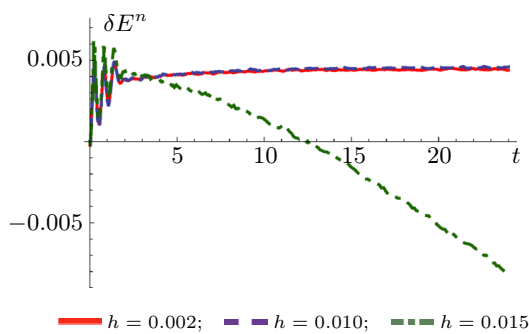


Рис. 3. Кривые $\delta E^n(t)$, полученные по схеме Верле при различных шагах h

Fig. 3. The curves $\delta E^n(t)$ obtained by the Verlet scheme at different steps h

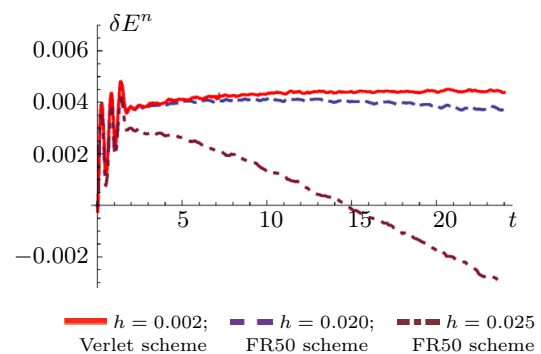


Рис. 4. Кривые $\delta E^n(t)$, полученные по схемам Верле и FR50 при различных шагах h

Fig. 4. The curves $\delta E^n(t)$ obtained by the Verlet and FR50 schemes at different steps h



активной фазы взаимодействия между атомами сферической наночастицы и атомами пластины (при $t \approx 2.5$). С увеличением времени t дрейф продолжается почти монотонно, и при $t = 24$ погрешность δE^n достигает значения $\delta E^n \approx -0.008206$. На тот же момент времени погрешность $\delta E^n \approx 0.004587$ при задании шага $h = 0.01$, т.е. она почти в два раза меньше по абсолютной величине по сравнению со случаем, когда $h = 0.015$. Таким образом, задание значения $h = 0.015$ провоцирует раннее возникновение дрейфа полной энергии и оно неприемлемо для расчетов по методу Верле. С другой стороны, кривая $\delta E(t)$, полученная при $h = 0.01$, практически совпадает с кривой, полученной при $h = 0.002$. Таким образом, безопасным диапазоном для значений шага h с точки зрения отсутствия явления дрейфа полной энергии в рассматриваемой задаче высокоскоростного взаимодействия тел можно считать промежуток $0.001 \leq h \leq 0.01$. В размерных единицах это промежуток $1 \text{ фс} \leq h \leq 10 \text{ фс}$. Видно, что максимально допустимое значение $h = 10 \text{ фс}$ в 2.5 раза больше, чем приведенное в [40] для задач молекулярной биологии и при использовании потенциала Леннарда–Джонса. Далее, можно брать значения размерного шага h , которые удовлетворяют неравенству $h < 1 \text{ фс}$. Но тогда придется выполнить большее количество шагов по t и произойдет накопление машинных ошибок округления. Табл. 5 показывает, что при $h = 0.02$ происходит быстрый рост погрешности δE^n с увеличением времени при счете по схеме Верле. Это означает, что данная схема неустойчива при $h = 0.02$. Таким образом, критическое значение h_{cr} шага h , при превышении которого метод Верле становится неустойчивым, находится в интервале $0.015 < h_{\text{cr}} < 0.02$.

Таблица 5. Погрешность δE^n . Схема Верле, $h = 0.02$

Table 5. The error δE^n . The Verlet scheme, $h = 0.02$

n	5	10	15	17	20
t	0.1	0.2	0.3	0.34	0.4
δE^n	1.27E-3	-6.79E-3	-2.27E+2	-1.23E+3	-4.29E+3

В случае схемы FR50 и $h = 0.025$ дрейф полной энергии начинается также рано, примерно с $t \approx 2$. Однако, в отличие от схемы Верле, $\delta E^n \approx -0.00312$ при $t = 24$. Это означает, что дрейф энергии происходит намного медленнее, чем в случае схемы Верле, несмотря на то что шаг $h = 0.025$ в $\frac{5}{3}$ раз больше, чем максимальный шаг $h = 0.015$, рассмотренный в случае схемы Верле. Заметим, что значение $|\delta E^n| \approx 0.00312$ намного меньше, чем при $h = 0.002$, во всем промежутке $0 \leq t \leq 24$. Таким образом, по схеме FR50 можно продолжать расчет и при $t > 24$ до момента времени, когда $|\delta E^n|$ превысит, например, значение 0.005. Из табл. 6 следует, что схема FR50 неустойчива при $h = 0.03$. Таким образом, критическое значение h_{cr} шага h , при превышении которого метод FR50 становится неустойчивым, находится в интервале $0.025 < h_{\text{cr}} < 0.03$ (в размерном виде $0.025 \text{ пс} < h_{\text{cr}} < 0.03 \text{ пс}$).

Таблица 6. Погрешность δE^n . Схема FR50, $h = 0.03$

Table 6. The error δE^n . The FR50 scheme, $h = 0.03$

n	3	7	10	11	13
t	0.09	0.21	0.3	0.33	0.39
δE^n	8.69E-4	2.93E-3	-3.39E+2	-8.57E+2	-4.92E+3

При решении задач молекулярной динамики существует также физическое ограничение по шагу по времени. Физическое ограничение связано с тем, что за один шаг по времени каждый атом должен пройти расстояние не более половины от межатомного расстояния $\Delta x < 0.5a$, где $a \approx 10^{-10} \text{ м}$. В противном случае атомы оказываются на малом расстоянии друг от друга, что приводит к большим отталкивающим силам и нефизически большим скоростям атомов. Скорость колебания атомов — порядка скорости звука в металле $c \approx 5 \cdot 10^3 \text{ м/с}$, поэтому максимальный шаг интегрирования по времени не должен превышать $h_* \approx \Delta x/c \approx 0.04 \text{ пс}$.

8.2. Динамика процесса соударения. На рис. 5 показаны конфигурации системы сферический ударник–преграда в различные моменты времени в сечении $x = 0$. Расчет выполнен по схеме Верле с шагом $h = 0.002$. Штриховыми красными линиями показаны формы сферического ударника и пластины в начальный момент времени в сечении $x_1 = 0$. Видно, что с ростом времени пластина все заметнее выгибается в положительном направлении оси x_2 , т.е. в направлении движения сферического ударника.

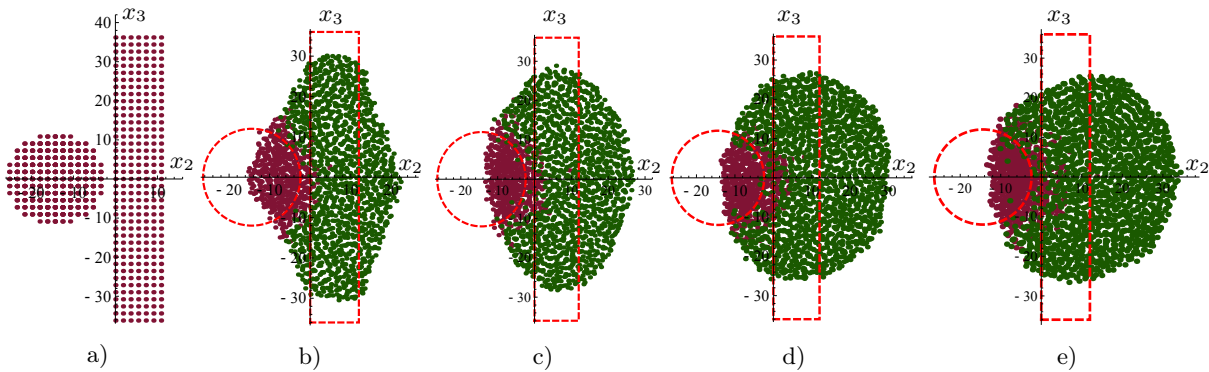


Рис. 5. Столкновение двух тел, эволюция распределения частиц во времени в проекции на сечение $x_1 = 0$:
 a) $t = 0$, b) $t = 6$, c) $t = 12$, d) $t = 18$, e) $t = 24$

Fig. 5. Collision of two bodies, time evolution of the distribution of particles in cross section $x_1 = 0$: a) $t = 0$, b) $t = 6$,
 c) $t = 12$, d) $t = 18$, e) $t = 24$

Одновременно с этим образуется кратер в пластине под ударным воздействием первоначально сферической наночастицы. Сквозного пробития пластины не происходит. Эта же задача была решена численно по методу FR50 с временным шагом $h = 0.02$, т.е. с шагом, который в 10 раз больше, чем в случае метода Верле. Как показано на рис. 4 штриховой линией, дрейф полной энергии весьма незначителен в промежутке $0 \leq t \leq 24$, поэтому по методу FR50 можно считать и с шагом $h = 0.02$. Пусть Δt — машинное время в секундах, требуемое для продвижения решения во времени на один шаг по методу Верле. Схема Верле потребовала выполнения 12000 шагов, чтобы достичь момента времени $t = 24$. По схеме FR50 для этой же цели потребовались 1200 временных шагов. Но четырехстадийная схема FR50 требует на каждом шаге машинного времени приблизительно $3.74\Delta t$. Тогда для выполнения 1200 шагов по схеме FR50 потребуется $1200 \cdot 3.74\Delta t = 4488\Delta t$ секунд. Таким образом, схема Верле потребовала для решения задачи машинного времени, которое в $\frac{12000\Delta t}{4488\Delta t} \approx 2.67$ раза больше, чем в случае схемы FR50. Полученные по методу FR50 картины эволюции во времени распределения частиц визуально не отличаются от распределений частиц, представленных на рис. 5, поэтому здесь не приводятся.

9. Соударение медной наночастицы с алюминиевой пластиной при наличии недеформируемых стенок.

9.1. О применимости некоторых ЕАМ-потенциалов. Прежде чем начинать расчеты задачи об ударе медного шарика об алюминиевую пластину, мы провели тестирование констант для меди и алюминия, приведенных в табл. 1, на задаче об ударе медного сферического ударника по алюминиевой пластине, при этом медный шарик размещался достаточно далеко от пластины, чтобы не было никакого взаимодействия между атомами шарика и пластины. Кроме того, задавалась очень малая начальная скорость медного шарика $v_0 = 0.01$ м/с. Расчеты были выполнены по схеме Верле [6], размеры пластины и шарика были взяты из раздела 3.

Как следует из формул (13)–(16), координаты частиц пластины не будут оставаться постоянными, а будут совершать некоторые малые флуктуации. Поэтому форма пластины будет почти постоянной до момента времени, когда шарик в своем движении приблизится к пластине. Сохранению формы пластины способствует также тот факт, что пластина “зажата” жесткими боковыми стенками и задней стенкой. Еще одним критерием правильности констант для алюминия является следующий: по физическому смыслу бесконечно твердых ограничивающих стенок атомы алюминия не должны проникать через эти стенки. И, наконец, есть еще третий критерий для оценки правильности констант, входящих в формулы для ЕАМ-потенциала: сферический медный ударник должен сохранять сферическую форму при его движении в направлении пластины до того времени, когда начнется взаимодействие его атомов с атомами пластины.

На рис. 6 а показана начальная конфигурация частиц шарика и пластины в сечении $x_1 = 0$. Этот рисунок был получен следующим образом: на плоскость $x_1 = 0$ проецировались все частицы, лежащие между плоскостями $x_1 = -\Delta x_1$ и $x_1 = \Delta x_1$, где $\Delta x_1 = 0.05A_2$ (A_2 — размер пластины вдоль оси x_1).

Как видно из рис. 6 б, при использовании потенциала для алюминия из работы [19], на момент времени $t = 0.5$ (250 шагов по времени) форма пластины сильно искажена; имеются частицы, которые

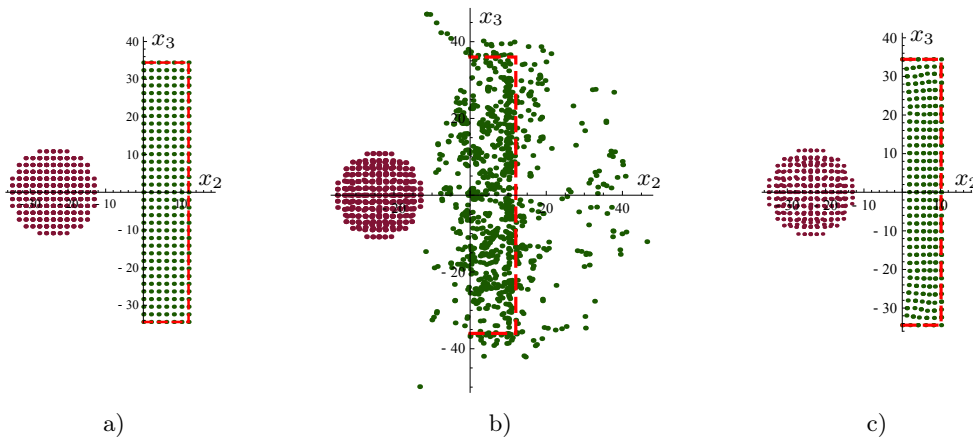


Рис. 6. Проекция частиц сферического ударника и преграды на сечение $x_1 = 0$ (плоскость (x_2, x_3)):
 а) $t = 0$, б) $t = 0.5$, результат использования потенциала для алюминия из работы [19],
 в) $t = 0.5$, результат использования потенциала для алюминия из работы [18]

Fig. 6. The configurations of the spherical projectile and obstacle in the cross section $x_1 = 0$ (the (x_2, x_3) plane):
 а) $t = 0$, б) $t = 0.5$, the result of using the potential for aluminum from the work [19],
 в) $t = 0.5$, the result of using the potential for aluminum from the work [18]

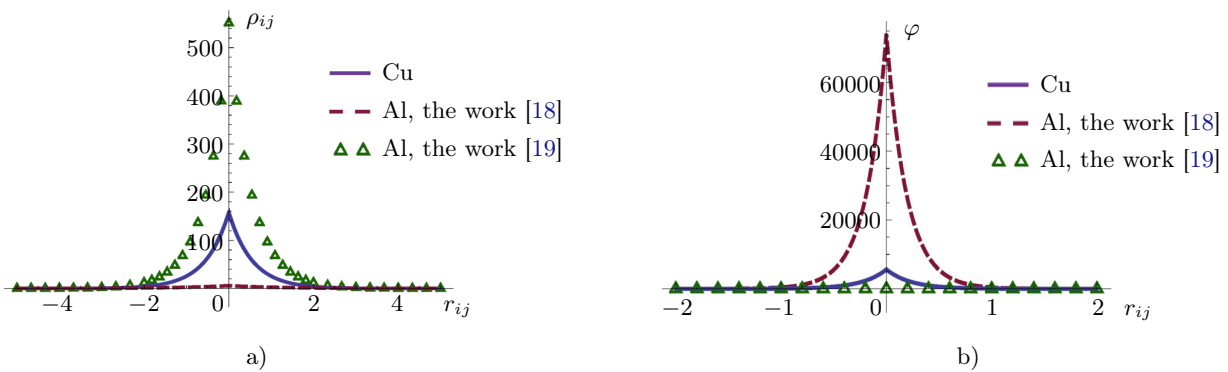


Рис. 7. Графики функций: а) $\rho_{ij}(r_{ij})$; б) $\varphi(r_{ij})$

Fig. 7. The graphs of the functions: а) $\rho_{ij}(r_{ij})$; б) $\varphi(r_{ij})$

пересекли недеформируемую тыльную стенку и боковые стенки, ограничивающие пластину. Это явление не должно иметь места в силу постановки задачи. Для того, чтобы установить его причину, предположим, что i -я частица неподвижна и лежит на оси x , т.е. данная частица имеет координаты $(x_i, 0, 0)$. Пусть j -я частица движется вдоль оси x , так что ее координаты $(x_j, 0, 0)$. Тогда $r_{ij} = |x_i - x_j|$ и легко построить графики функций $\rho_{ij}(r_{ij})$ и $\varphi(r_{ij})$ (рис. 7). Из рис. 7 б видно, что в случае констант для φ из [19] сила отталкивания, описываемая функцией $\varphi(r_{ij})$, в несколько десятков раз меньше, чем в случае констант из работы [18]. Поэтому из-за малости этой силы большое количество частиц пересекает твердую стенку и оказывается вне алюминиевой пластины. В наборе констант A и γ , предложенных в работе [19], вызывает сомнение, прежде всего, постоянная γ : в работе [18] она почти в десять раз больше. Кроме того, величина коэффициента A сильно завышена по сравнению с величиной A для меди.

На рис. 8 представлены графики относительной погрешности δE^n полной энергии рассматриваемой двухкомпонентной системы, которые были получены при использовании потенциалов межатомного взаимодействия для алюминия в работах [18, 19]. В случае потенциала [19] максимум погрешности δE^n в десять раз превышает максимум указанной погрешности при использовании потенциала [18].

Из представленных выше результатов следует, что потенциал для алюминия из [19] неприменим для численного решения задач высокоскоростного взаимодействия тел методами молекулярной динамики. В то же время при использовании потенциала для алюминия из работы [18] ни одна частица не проникла

сквозь недеформируемые стенки и начальная форма пластины сохраняется неплохо. Отметим, что потенциал для меди из [19] вполне удовлетворительно обеспечивает сферическую форму медного шарика и после 250 временных шагов, так что этот потенциал применим для расчетов.

Так как недеформируемая стенка легко программируется в компьютерной программе, реализующей те или иные симплектические схемы и ЕАМ-потенциалы, то описанная выше задача, в которой имеется недеформируемая стенка, может служить хорошим тестом применимости ЕАМ-потенциалов и помогает отбраковывать непригодные ЕАМ-потенциалы до решения основной задачи.

9.2. Динамика процесса соударения. В этом разделе мы приводим результаты трехмерных расчетов задачи о соударении медной сферы с алюминиевой пластиной, их размеры такие же, как в разделе 3. Пять из шести граней пластины являются недеформируемыми, как это описано в разделе 3. В расчетах использовался ЕАМ-потенциал, описанный в разделе 4. В начальный момент времени $t = 0$ вектор скорости частиц имел координаты $(0, v_0, 0)$, где $v_0 = 1000$ м/с, т.е. медная наночастица двигалась в положительном направлении оси x_2 (рис. 9 а). Количество атомов меди в сферической наночастице было $N_{Cu} = 602$. В алюминиевой пластине имелось $N_{Al} = 4107$ атомов. Расчеты выполнены по схеме Верле с шагом $h = 0.002$ и по схеме FR50 с шагом $h = 0.01$.

Относительная погрешность полной энергии δE^n убывает после начала процесса отскока медной наночастицы (рис. 10), и к моменту времени $t = 12$ амплитуда ее колебаний в десятки раз меньше, чем в более ранние времена, когда происходит сильное взаимодействие между ударником и преградой.

Из рис. 11 следует, что с момента времени $t \approx 1.75$ медная наночастица начинает двигаться в направлении, противоположном направлению ее движения при меньших временах t . Это означает начало явления отскока наночастицы от пластины. Увеличение глубины кратера в пластине прекращается с момента начала отскока наночастицы от пластины. Как видно на рис. 11, начиная с момента времени $t \approx 5$, скорость отскока наночастицы v_{reb} стабилизируется и становится постоянной со значением $v_{reb} = -192.55417$ м/с. Далее, кривая средней скорости наночастицы, полученная по методу FR50 с шагом $h = 0.01$ (красная штриховая линия), в пределах точности графика совпадает с кривой, полученной по методу Верле с шагом $h = 0.002$.

На рис. 12 красная и зеленая штрихпунктирные линии показывают температуры плавления, соответственно, меди (1356.55 К) и алюминия (933.5 К). Видно, что численно найденная методом МД температура

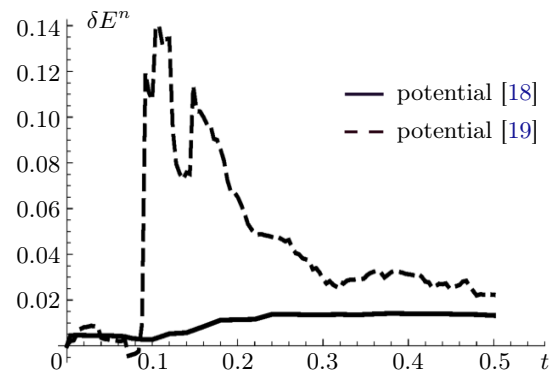


Рис. 8. Графики относительной погрешности δE^n в промежутке $0 \leq t \leq 0.5$

Fig. 8. The graphs of the relative error δE^n in the interval $0 \leq t \leq 0.5$

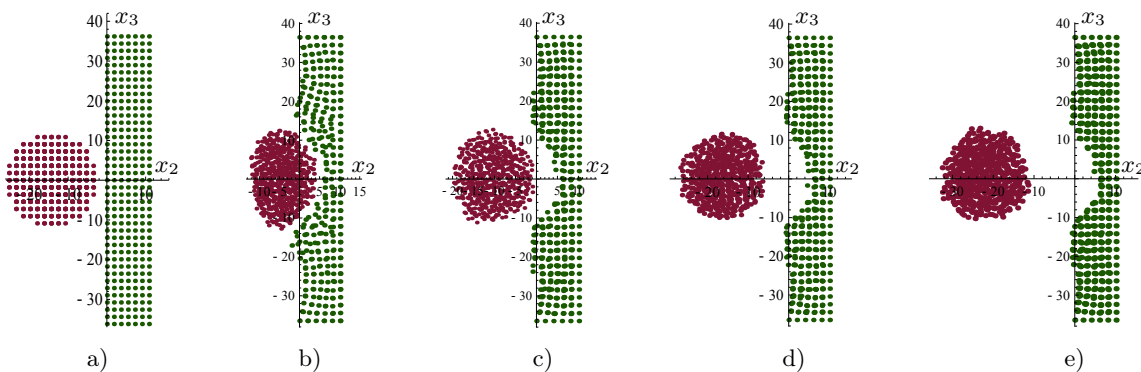


Рис. 9. Столкновение двух тел, эволюция распределения частиц во времени в сечении $x_1 = 0$:
a) $t = 0$, b) $t = 3$, c) $t = 6$, d) $t = 9$, e) $t = 12$

Fig. 9. Collision of two bodies, time evolution of the distribution of particles in cross section $x_1 = 0$:
a) $t = 0$, b) $t = 3$, c) $t = 6$, d) $t = 9$, e) $t = 12$

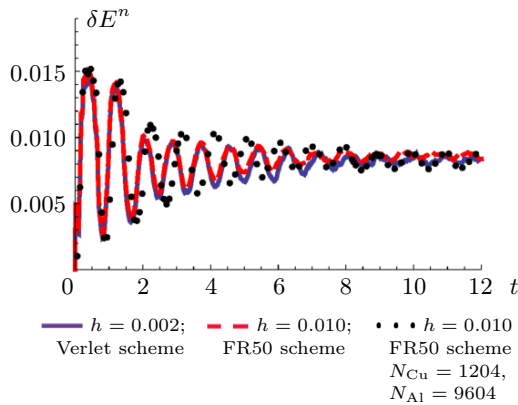


Рис. 10. Кривые $\delta E^n(t)$, полученные по схеме Верле при различных шагах h

Fig. 10. The curves $\delta E^n(t)$ obtained by the Verlet scheme at different steps h

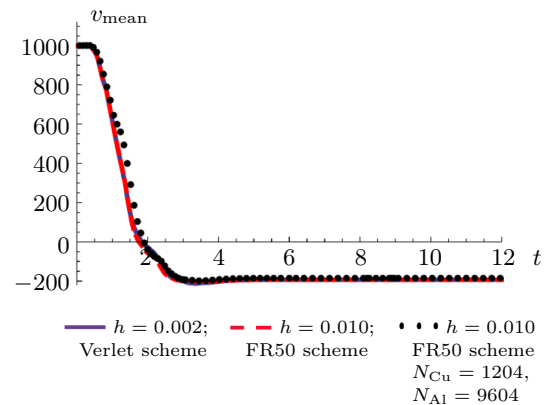


Рис. 11. Средняя размерная скорость частиц ударника v_{mean}

Fig. 11. The mean dimensional velocity of projectile particles v_{mean}

медной наночастицы при $t > 2$ мало отличается от температуры плавления меди. Отметим, что в применяемом в расчетах ЕАМ-потенциале учитывается только теплообмен между металлическими телами и не учитывается теплопередача от нагретых твердых тел окружающему воздуху.

На рис. 9 показаны конфигурации системы сферический ударник–преграда в различные моменты времени в сечении $x_1 = 0$. Как видно на серии трехмерных рис. 13 а–d, в начальные периоды времени после столкновения медного ударника с преградой он несколько сплющивается вдоль оси x_2 , но при дальнейшем движении отскока сферическая форма ударника частично восстанавливается.

По нашему мнению, продолжение расчета на моменты времени $t > 12$ не имеет смысла по двум причинам: (i) прекращено взаимодействие между атомами ударника и преграды из-за слишком большого расстояния между ними, поэтому после начала отскока глубина кратера не увеличивается; (ii) скорость отскока становится постоянной, при этом ее значения в различные моменты времени совпадают в первых 14 цифрах мантиссы машинных чисел с плавающей запятой.

Картины эволюции во времени распределения частиц в сечении $x_3 = 0$ (плоскость (x_1, x_2)) качественно аналогичны распределению частиц в сечении $x_1 = 0$, поэтому здесь не приводятся для краткости.

9.3. МД-моделирование с применением увеличенной ГЦК-решетки. На рис. 9, 13 можно заметить некоторую асимметрию формы наночастицы и кратера относительно оси x_2 . Одна из причин этой асимметрии, по нашему мнению, состоит в следующем: поверхность сферической наночастицы аппроксимируется ступенчатой поверхностью. Расстояния между атомами в этой решетке нельзя изменять произвольно, они свои для каждого конкретного металла. Особенно хорошо ступенчатый характер поверхности сферической наночастицы виден на рис. 9 а. Этот ступенчатый характер аппроксимации сферической поверхности остается и при увеличении числа атомов в ГЦК-решетке. Отклонение ступенчатой поверхности сферы от сферичности можно описать параметром a/R , где a — расстояние между двумя атомами, лежащими в концах любого из 12 ребер кубической ячейки (для меди $a = 3.6147 \text{ \AA}$ согласно [19]), R — радиус сферической наночастицы. Из выражения a/R ясно, что относительное отклонение от сферичности при аппроксимации сферы ступенчатой поверхностью уменьшается с ростом радиуса сферы. Другая причина состоит в том, что при заметном сближении двух частиц между ними начинают

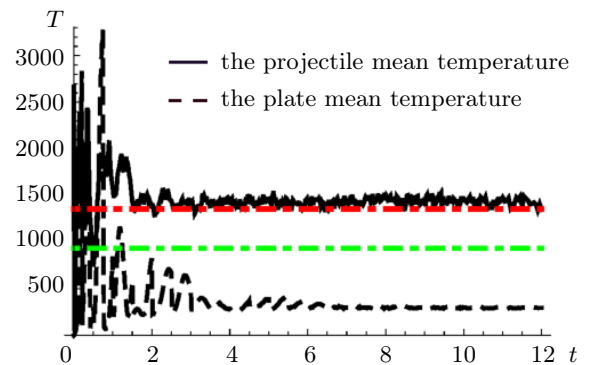


Рис. 12. Средние температуры ударника и пластины

Fig. 12. Mean temperatures of the projectile and plate

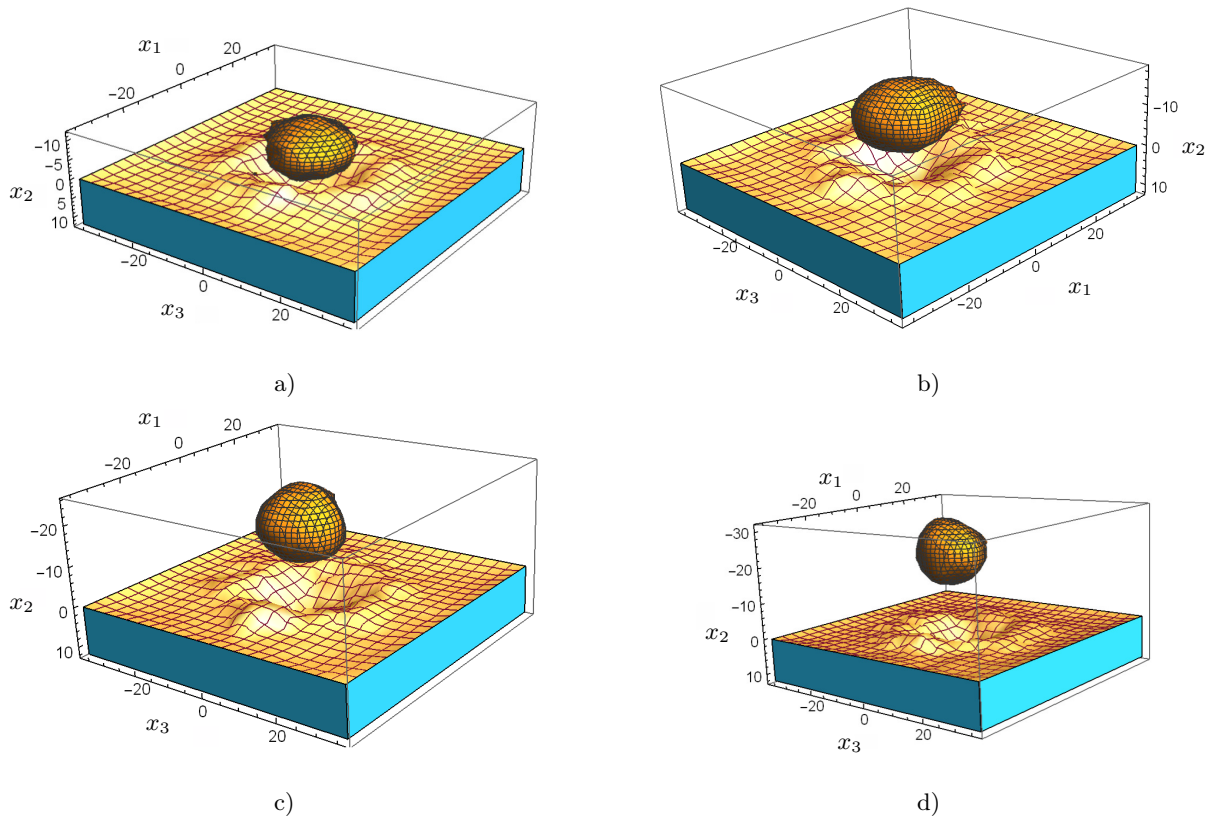


Рис. 13. Движение медной наночастицы в процессе ее отскока от алюминиевой пластины:
 а) $t = 3$, б) $t = 6$, в) $t = 9$, г) $t = 12$

Fig. 13. The motion of the copper nanoparticle in the process of its rebound from the aluminum plate:
 а) $t = 3$, б) $t = 6$, в) $t = 9$, г) $t = 12$

действовать силы отталкивания, и они отдаляются друг от друга. Можно уменьшать расстояние между этими частицами, задавая меньший временной шаг. Но тогда увеличится время счета задачи. Поэтому в вопросе задания оптимального шага h приходится принимать компромиссные решения (ведь еще нужно заботиться о том, чтобы не возникал дрейф полной энергии).

Таким образом, для уменьшения асимметрии сферической наночастицы при ее деформации в процессе ее соударения с пластиной желательно увеличивать количество атомов в начальный момент времени. Для того чтобы можно было сравнивать между собой результаты МД-моделирования при различных количествах атомов в системе ударник–преграда, необходимо соблюдать равенство критериев подобия. Рассмотрим критерии подобия, входящие в формулы (21). Ясно, что для обеспечения подобия достаточно умножить все линейные размеры, входящие в выражения для параметров подобия \bar{R} , \bar{A}_1 , \bar{A}_2 , на один и тот же коэффициент θ . Возьмем, для примера, $\theta = 1.25$. Тогда легко показать, что количество атомов в сфере увеличится по сравнению со случаем, когда $\theta = 1$, в $(5/4)^3 \approx 2$ раза. При этом максимальный момент безразмерного времени, до которого ведется расчет на увеличенной ГЦК-решетке, нужно тоже умножить на коэффициент θ . Так что расход машинного времени, требуемого для решения задачи на увеличенной ГЦК-решетке, составит $t_1\theta^4$ при счете без использования распараллеливания, где t_1 — машинное время, затраченное при $\theta = 1$.

На рис. 11, 10 и 14 приведены результаты расчетов задачи об отскоке медной наносферы от алюминиевой пластины при следующих количествах атомов в наносфере и в пластине: $N_{Cu} = 1204$, $N_{Al} = 9604$. Эти количества были получены при увеличении всех линейных размеров в системе ударник–преграда в 1.25 раз. В случае рис. 10 и 11 значения на оси t , полученные на увеличенной решетке, предварительно умножались на множитель $1/1.25 = 4/5$ для того, чтобы привести их к промежутку $0 \leq t \leq 12$, в котором задача об отскоке наночастицы от преграды считалась при меньшем числе частиц. На рис. 10 в промежутке $[1, 7]$ наблюдается сдвиг во времени локальных экстремумов погрешности δE^n . Однако зна-

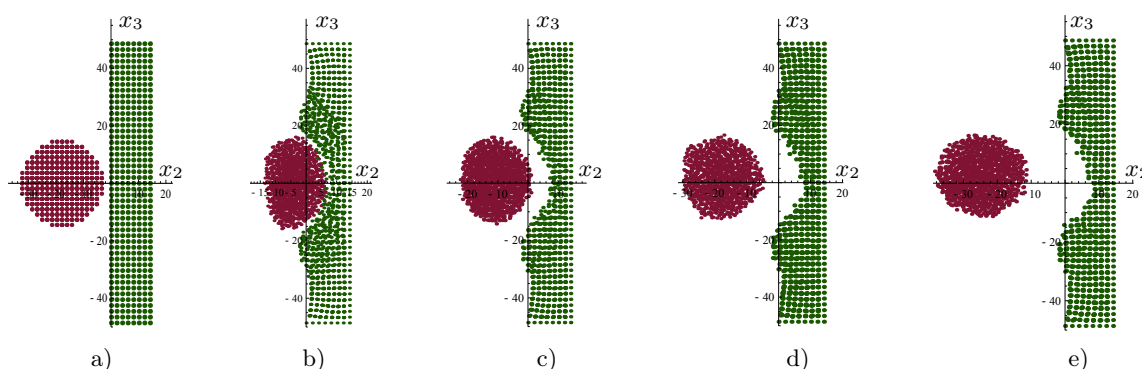


Рис. 14. Соударение наночастицы с пластиной и последующий отскок наночастицы от пластины. $N_{Cu} = 1204$, $N_{Al} = 9604$. Сечение $x_1 = 0$: а) $t = 0$, б) $t = 3.75$, в) $t = 7.5$, д) $t = 11.25$, е) $t = 15$

Fig. 14. Collision of the nanoparticle with a plate and a subsequent nanoparticle rebound from the plate. Cross section $x_1 = 0$: а) $t = 0$, б) $t = 3.75$, в) $t = 7.5$, д) $t = 11.25$, е) $t = 15$

чения погрешности в точках экстремумов близки к полученным при меньшем числе частиц. Рисунок, аналогичный рис. 12, полученный на увеличенной ГЦК-решетке, здесь не приводится для краткости. Все эти рисунки показывают, что теория подобия прекрасно работает при ее применении к моделированию методом МД.

Результаты, приведенные на рис. 14, получены расчетом по схеме FR50 с временным шагом $h = 0.01$. Маркировка осей соответствует увеличенным размерам системы ударник–преграда.

10. Выводы. Можно сформулировать следующие выводы из результатов, представленных выше.

1. Численно смоделировано явление отскока медной наночастицы от алюминиевой пластины.
2. Для схемы Верле и новой симплектической схемы FR50 найдены промежутки $[h_{\min}, h_{\max}]$, такие, что при задании временного шага h в этих промежутках не происходит дрейфа полной энергии. При этом дрейф полной энергии возникает в случае схемы FR50 при гораздо больших шагах h , чем в случае метода Верле.
3. На примере задачи об отскоке наночастицы от пластины показана работоспособность критериев подобия, предложенных ранее в [32], при моделировании задач высокоскоростного взаимодействия тел методом молекулярной динамики.
4. Предложен быстрый простой компьютерный тест для отбраковки EAM-потенциалов до начала решения основной МД-задачи. В частности, показано, что потенциал межатомного взаимодействия, предложенный в работе [19] для алюминия, неприменим для задач высокоскоростного взаимодействия тел, так как приводит к нефизическим результатам.

При попытке применения вышеописанных симплектических схем к задачам высокоскоростного соударения тел, для которых в литературе имеются экспериментальные данные, оказалось, что для этих задач требуется большое количество частиц. Например, для задачи о нормальном соударении железной наносферы с тонким алюминиевым диском потребовалось 31316 частиц. С использованием имеющихся в [32] экспериментальных данных было найдено, что для полного решения этой задачи, когда крайняя тыльная точка наносферы покидает пластину в результате сквозного пробития последней, потребовалось бы, как минимум, 350 часов машинного времени персонального компьютера.

Несмотря на такую высокую вычислительную трудоемкость метода МД, в [41] было отмечено шесть аспектов в пользу привлекательности этого метода как способа изучения свойств веществ. Один из этих аспектов состоит в том, что методом МД можно исследовать на одном и том же компьютере различные свойства вещества, в то время как в натуральных экспериментах потребовалось бы множество специализированных установок.

С учетом изложенных выше соображений, касающихся численного моделирования методом МД процессов, в которых участвуют частицы в количествах порядка $O(10^4)$ и более, очень желательно использование распараллеливания. В настоящее время имеется обширная литература по распараллеливанию процессов решения разнообразных задач молекулярной динамики, см., в частности, работы [42–44] и списки литературы в них.

Из предыдущего текста ясно, что вопрос о прямом сопоставлении результатов численного моделирования методом МД с имеющимися экспериментальными данными заслуживает отдельного рассмотрения.

Дальнейшее развитие вышеописанных исследований применительно к задачам механики твердого тела имеет многочисленные приложения. Это, например, холодное газодинамическое напыление [33, 34, 44], сквозное пробитие металлических мишеней, пробитие разнесенных преград и многослойных преград [32], моделирование защитных элементов для легкобронированной техники и личного состава (в частности, бронежилетов) [32] и т.д. Применение моделирования методом МД в этих областях представляет значительный интерес, так как позволит лучше понять физику протекающих процессов.

Благодарности. Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации. Автор благодарит проф. С. П. Киселева (ИТПМ СО РАН, г. Новосибирск) за полезные обсуждения работы.

Список литературы

1. Kiselev S.P., Vorozhtsov E.V., Fomin V.M. Foundations of fluid mechanics with applications: problem solving using mathematica. Boston: Birkhäuser, 1999.
2. Ландау Л.Д., Lifshits E.M. Теоретическая физика. Т. 1. Механика. М.: Наука, 1973.
3. Годунов С.К., Киселёв С.П., Куликов И.М., Мали В.И. Моделирование ударно-волновых процессов в упругопластических материалах на различных (атомный, мезо и термодинамический) структурных уровнях. Москва–Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2014.
4. Ворожцов Е.В., Киселев С.П. Явные схемы высоких порядков точности для задач молекулярной динамики // Вычислительные методы и программирование. 2021. 22, № 2. 87–109. doi 10.26089/NumMet.v22r207.
5. Vorozhtsov E.V., Kiselev S.P. Higher-order symplectic integration techniques for molecular dynamics problems // J. Comput. Phys. 2022. 452. Article ID 110905. doi 10.1016/j.jcp.2021.110905.
6. Verlet L. Computer “experiments” on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard–Jones molecules // Phys. Rev. 1967. 159, N 1. 98–103. doi 10.1103/PhysRev.159.98.
7. Сурис Ю.Б. О каноничности отображений, порождаемых методами Рунге–Кутты при интегрировании систем $\ddot{x} = -\partial U/\partial x$ // Журн. вычисл. матем. и матем. физ. 1989. 29, № 2. 202–211.
8. Adams W.W., Loustaunau P. An introduction to Gröbner bases. Graduate studies in mathematics. Vol. 3. Providence: Amer. Math. Soc., 1996.
9. Ruth R.D. A canonical integration technique // IEEE Trans. Nuclear Sci. 1983. NS-30, N 4. 2669–2671.
10. Forest E., Ruth R.D. Fourth-order symplectic integration // Physica D. 1990. 43, N 1. 105–117. doi 10.1016/0167-2789(90)90019-L.
11. Vorozhtsov E.V., Kiselev S.P. An efficient method of finding new symplectic schemes for Hamiltonian mechanics problems with the aid of parametric Gröbner bases // J. Comput. Phys. 2024. 496. Article ID 112601. doi 10.1016/j.jcp.2023.112601.
12. Дубровин Б.А., Новиков С.П., Фоменко А.Т. Современная геометрия: методы и приложения. М.: Наука, 1986.
13. Хайпер Э., Нёрсетт С., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. М.: Мир, 1990.
14. Sanz-Serna J.M., Calvo M.P. Numerical Hamiltonian problems. London: Chapman and Hall, 1994.
15. Leimkuhler B., Reich S. Simulating Hamiltonian dynamics. Cambridge: Cambridge University Press, 2004.
16. Hairer E., Wanner G., Lubich C. Geometric numerical integration: structure-preserving algorithms for ordinary differential equations. Berlin: Springer, 2006. doi 10.1007/3-540-30666-8.
17. Baskes M.I., Melius C.F. Pair potential for fcc metals // Phys. Rev. B. 1979. 20, N 8. 3197–3204.
18. Papanicolaou N.I., Kallinteris G.C., Evangelakis G.A., Papaconstantopoulos D.A. Second-moment interatomic potential for aluminum derived from total-energy calculations and molecular dynamics application // Computational Materials Science. 2000. 17, N 2–4. 224–229. doi 10.1016/S0927-0256(00)00028-8.
19. Karolewski M.A. Tight-binding potentials for sputtering simulations with fcc and bcc metals // Radiation Effects and Defects in Solids. 2001. 153, N 3. 239–255. doi 10.1080/10420150108211842.
20. West A.R. Solid state chemistry and its applications. New York: Wiley, 1984.
21. Foiles S.M. Calculation of the surface segregation of Ni-Cu alloys with the use of the embedded-atom method // Phys. Rev. B. 1985. 32, N 12. 7685–7693. doi 10.1103/PhysRevB.32.7685.



22. Foiles S.M., Baskes M.I., Daw M.S. Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys // Phys. Rev. B. 1986. **33**, N 12. 7983–7991. doi 10.1103/PhysRevB.33.7983.
23. Johnson R.A. Alloy models with the embedded-atom method // Phys. Rev. B. 1989. **39**, N 17. 12554–12559. doi 10.1103/PhysRevB.39.12554.
24. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // Phys. Rev. B. 1993. **48**, N 1. 22–33. doi 10.1103/PhysRevB.48.22.
25. Zope R.R., Mishin Y. Interatomic potentials for atomistic simulations of the Ti-Al system // Phys. Rev. B. 2003. **68**, N 2. 024102-1–024102-14. doi 10.1103/PhysRevB.68.024102.
26. Анималы А. Квантовая теория кристаллических твердых тел. М.: Мир, 1981.
27. Carlsson A.E. Beyond pair potentials in elemental transition metals and semiconductors // Solid State Phys. 1990. **43**. 1–91. doi 10.1016/S0081-1947(08)60323-9.
28. Finnis M.W., Sinclair J.E. A simple empirical *N*-body potential for transition metals // Philos. Mag. A. 1984. **50**, N 1. 45–55. doi 10.1080/01418618408244210.
29. Mishin Y., Farkas D., Mehl M.J., Papaconstantopoulos D.A. Interatomic potentials for monoatomic metals from experimental data and *ab initio* calculations // Phys. Rev. B. 1999. **59**, N 5. 3393–3407. doi 10.1103/PhysRevB.59.3393.
30. Griebel M., Zumbusch G., Knappek S. Numerical simulation in molecular dynamics: numerics, algorithms, parallelization, applications. Berlin: Springer, 2007. doi 10.1007/978-3-540-68095-6.
31. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Ч. 1. М.: Наука, 1976.
32. Герасимов А.В., Барашков В.Н., Глазырин В.П. и др. Теоретические и экспериментальные исследования высокоскоростного взаимодействия тел. Томск: Изд-во Томск. гос. ун-та, 2007.
33. Алхимов А.П., Косарев В.Ф., Папырин А.Н. Метод “холодного” газодинамического напыления // Докл. АН СССР. 1990. **315**, № 5. 1062–1065.
34. Алхимов А.П., Клинков С.В., Косарев В.Ф., Михатулин Д.С., Полежаев Ю.В. Гетерогенные технологии: проблемы взаимодействия частиц с преградой // Теплофизика и аэромеханика. 2005. **12**, № 3. 415–432.
35. Feng K. Difference schemes for Hamiltonian formalism and symplectic geometry // J. Comput. Math. 1986. **4**, N 3. 279–289.
36. Киселев С.П. Метод молекулярной динамики в механике деформированного твердого тела // Прикл. мех. техн. физ. 2014. **55**, № 3. 113–139.
37. Wolfram S. The mathematica book. Champaign: Wolfram Media, 2003.
38. Gans J., Shalloway D. Shadow mass and the relationship between velocity and momentum in symplectic numerical integration // Physical Review E. 2000. **61**, N 4. 4587–4592. doi 10.1103/physreve.61.4587.
39. Engle R.D., Skeel R.D., Drees M. Monitoring energy drift with shadow Hamiltonians // J. Comput. Phys. 2005. **206**, N 2. 432–452. doi 10.1016/j.jcp.2004.12.009.
40. LAMMPS Users Manual 31 Mar 2017 version. Sandia National Laboratories. <https://usermanual.wiki/Document/Manual.1256620837/help>. Cited May 8, 2024.
41. Агафонов А.Н., Еремин А.В. Метод классической молекулярной динамики в моделировании физико-химических процессов. Самара: Изд-во Самарского гос. ун-та. 2017.
42. Rovigatti L., Šulc P., Reguly I.Z., Romano F. A comparison between parallelization approaches in molecular dynamics simulations on GPUs // J. Comput. Chem. 2015. **36**, N 1. 1–8. doi 10.1002/jcc.23763.
43. Mathur P., Azad H.K., Sangaraju S.H.V., Agrawal E. Parallelization of molecular dynamics simulations using Verlet algorithm and OpenMP // Lecture Notes in Network and Systems. Vol. 832. Singapore: Springer, 2024. 263–274. doi 10.1007/978-981-99-8129-8_22.
44. Подрыга В.О., Поляков С.В. Параллельная реализация многомасштабного подхода для расчета микротечений газа // Вычислительные методы и программирование. 2016. **17**, № 2. 147–165. doi 10.26089/NumMet.v17r214.

Поступила в редакцию
16 февраля 2024 г.

Принята к публикации
17 апреля 2024 г.

Информация об авторе

Евгений Васильевич Ворожцов — д.ф.-м.н., вед. науч. сотр.; Институт теоретической и прикладной механики имени С. А. Христиановича СО РАН, ул. Институтская, 4/1, 630090, Новосибирск, Российская Федерация.

References

1. S. P. Kiselev, E. V. Vorozhtsov, and V. M. Fomin, *Foundations of Fluid Mechanics with Applications: Problem Solving Using Mathematica* (Birkhäuser, Boston, 1999).
2. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Course of Theoretical Physics*, Vol. 1: *Mechanics* (Nauka, Moscow, 1973; Pergamon, Oxford, 1977).
3. S. K. Godunov, S. P. Kiselev, I. M. Kulikov, and V. I. Mali, *Modeling of Shockwave Processes in Elastic-Plastic Materials at Different (Atomic, Meso and Thermodynamic) Structural Levels* (Inst. Komp'yut. Issled., Moscow–Izhevsk, 2014) [in Russian].
4. E. V. Vorozhtsov and S. P. Kiselev, “Explicit Higher-Order Schemes for Molecular Dynamics Problems,” *Vychisl. Metody Program. (Numerical Methods and Programming)* **22** (2), 87–109 (2021). doi 10.26089/NumMet.v22r207.
5. E. V. Vorozhtsov and S. P. Kiselev, “Higher-Order Symplectic Integration Techniques for Molecular Dynamics Problems,” *J. Comput. Phys.* **452**, Article ID 110905 (2022). doi 10.1016/j.jcp.2021.110905.
6. L. Verlet, “Computer ‘Experiments’ on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard–Jones Molecules,” *Phys. Rev.* **159** (1), 98–103 (1967). doi 10.1103/PhysRev.159.98.
7. Yu. B. Suris, “The Canonicity of Mappings Generated by Runge–Kutta Type Methods when Integrating the Systems $\ddot{x} = -\partial U/\partial x$,” *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.* **29** (2), 202–211 (1989) [*USSR Comput. Math. Math. Phys.* **29** (1), 138–144 (1989)]. doi 10.1016/0041-5553(89)90058-X.
8. W. W. Adams and P. Loustaunau, *An Introduction to Gröbner Bases*, Vol. 3: *Graduate Studies in Mathematics* (Amer. Math. Soc., Providence, 1996).
9. R. D. Ruth, “A Canonical Integration Technique,” *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **NS-30** (4), 2669–2671 (1983).
10. E. Forest and R. D. Ruth, “Fourth-Order Symplectic Integration,” *Physica D* **43** (1), 105–117 (1990). doi 10.1016/0167-2789(90)90019-L.
11. E. V. Vorozhtsov and S. P. Kiselev, “An Efficient Method of Finding New Symplectic Schemes for Hamiltonian Mechanics Problems with the Aid of Parametric Gröbner Bases,” *J. Comput. Phys.* **496**, Article ID 112601 (2024). doi 10.1016/j.jcp.2023.112601.
12. B. A. Dubrovin, S. P. Novikov, and A. T. Fomenko, *Modern Geometry — Methods and Applications* (Nauka, Moscow, 1986; Springer, New York, 1992).
13. E. Hairer, S. P. Nørsett, and G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems* (Springer, Berlin, 1987; Mir, Moscow, 1990).
14. J. M. Sanz-Serna and M. P. Calvo, *Numerical Hamiltonian Problems* (Chapman and Hall, London, 1994).
15. B. Leimkuhler and S. Reich, *Simulating Hamiltonian Dynamics* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2004).
16. E. Hairer, G. Wanner, and C. Lubich, *Geometric Numerical Integration: Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations* (Springer, Berlin, 2006). doi 10.1007/3-540-30666-8.
17. M. I. Baskes and C. F. Melius, “Pair Potentials for fcc Metals,” *Phys. Rev. B* **20** (8), 3197–3204 (1979).
18. N. I. Papanicolaou, G. C. Kallinteris, G. A. Evangelakis, and D. A. Papaconstantopoulos, “Second-Moment Interatomic Potential for Aluminum Derived from Total-Energy Calculations and Molecular Dynamics Application,” *Comput. Mater. Sci.* **17** (2–4), 224–229 (2000). doi 10.1016/S0927-0256(00)00028-8.
19. M. A. Karolewski, “Tight-Binding Potentials for Sputtering Simulations with fcc and bcc Metals,” *Radiat. Eff. Defects Solids* **153** (3), 239–255 (2001). doi 10.1080/10420150108211842.
20. A. R. West, *Solid State Chemistry and Its Applications* (Wiley, New York, 1984).
21. S. M. Foiles, “Calculation of the Surface Segregation of Ni-Cu Alloys with the Use of the Embedded-Atom Method,” *Phys. Rev. B* **32** (12), 7685–7693 (1985). doi 10.1103/PhysRevB.32.7685.
22. S. M. Foiles, M. I. Baskes, and M. S. Daw, “Embedded-Atom-Method Functions for the fcc Metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and Their Alloys,” *Phys. Rev. B* **33** (12), 7983–7991 (1986). doi 10.1103/PhysRevB.33.7983.
23. R. A. Johnson, “Alloy Models with the Embedded-Atom Method,” *Phys. Rev. B* **39** (17), 12554–12559 (1989). doi 10.1103/PhysRevB.39.12554.
24. F. Cleri and V. Rosato, “Tight-Binding Potentials for Transition Metals and Alloys,” *Phys. Rev. B* **48** (1), 22–33 (1993). doi 10.1103/PhysRevB.48.22.
25. R. R. Zope and Y. Mishin, “Interatomic Potentials for Atomistic Simulations of the Ti-Al System,” *Phys. Rev. B* **68** (2), 024102-1–024102-14 (2003). doi 10.1103/PhysRevB.68.024102.
26. A. O. E. Animalu, *Intermediate Quantum Theory of Crystalline Solids* (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1977; Mir, Moscow, 1981).



27. A. E. Carlsson, “Beyond Pair Potentials in Elemental Transition Metals and Semiconductors,” *Solid State Phys.* **43**, 1–91 (1990). doi [10.1016/S0081-1947\(08\)60323-9](https://doi.org/10.1016/S0081-1947(08)60323-9).
28. M. W. Finnis and J. E. Sinclair, “A Simple Empirical N -body Potential for Transition Metals,” *Philos. Mag. A* **50** (1), 45–55 (1984). doi [10.1080/01418618408244210](https://doi.org/10.1080/01418618408244210).
29. Y. Mishin, D. Farkas, M. J. Mehl, and D. A. Papaconstantopoulos, “Interatomic Potentials for Monoatomic Metals from Experimental Data and *ab initio* Calculations,” *Phys. Rev. B* **59** (5), 3393–3407 (1999). doi [10.1103/PhysRevB.59.3393](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.3393).
30. M. Griebel, G. Zumbusch, and S. Knapek, *Numerical Simulation in Molecular Dynamics: Numerics, Algorithms, Parallelization, Applications* (Springer, Berlin, 2007). doi [10.1007/978-3-540-68095-6](https://doi.org/10.1007/978-3-540-68095-6).
31. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Course of Theoretical Physics, Vol. 5: Statistical Physics, Part 1* (Nauka, Moscow, 1976; Pergamon, Oxford, 1980).
32. A. V. Gerasimov, V. N. Barashkov, V. P. Glazyrin, et al., *Theoretical and Experimental Investigations of the High-Velocity Interaction of Bodies* (Tomsk Gos. Univ., Tomsk, 2007) [in Russian].
33. A. P. Alkhimov, V. F. Kosarev, and A. N. Papyrin, “A Method of Cold Gas-Dynamic Spraying,” *Dokl. Akad. Nauk SSSR* **315** (5), 1062–1065 (1990).
34. A. P. Alkhimov, S. V. Klinkov, V. F. Kosarev, et al., “Heterogeneous Technologies: Particle-Obstacle Interaction Problems,” *Teplofiz. Aeromekh.* **12** (3), 415–432 (2005) [*Thermophys. Aeromech.* **12** (3), 387–402 (2005)].
35. K. Feng, “Difference Schemes for Hamiltonian Formalism and Symplectic Geometry,” *J. Comput. Math.* **4** (3), 279–289 (1986).
36. S. P. Kiselev, “Method of Molecular Dynamics in Mechanics of Deformable Solids,” *Zh. Prikl. Mekh. Tekh. Fiz.* **55** (3), 113–139 (2014) [*J. Appl. Mech. Tech. Phys.* **55** (3), 470–493 (2014)]. doi [10.1134/S0021894414030109](https://doi.org/10.1134/S0021894414030109).
37. S. Wolfram, *The Mathematica Book* (Wolfram Media, Champaign, 2003).
38. J. Gans and D. Shalloway, “Shadow Mass and the Relationship between Velocity and Momentum in Symplectic Numerical Integration,” *Phys. Rev. E* **61** (4) 4587–4592 (2000). doi [10.1103/physreve.61.4587](https://doi.org/10.1103/physreve.61.4587).
39. R. D. Engle, R. D. Skeel, and M. Drees, “Monitoring Energy Drift with Shadow Hamiltonians,” *J. Comput. Phys.* **206** (2), 432–452 (2005). doi [10.1016/j.jcp.2004.12.009](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2004.12.009).
40. *LAMMPS Users Manual 31 Mar 2017 version*. Sandia National Laboratories. <https://usermanual.wiki/Document/Manual.1256620837/help>. Cited May 8, 2024.
41. A. N. Agafonov and A. V. Eremin, *The Method of Classical Molecular Dynamics in the Simulation of Physical and Chemical Processes* (Samara Gos. Univ., Samara, 2017) [in Russian].
42. L. Rovigatti, P. Šulc, I. Z. Reguly, and F. Romano, “A Comparison between Parallelization Approaches in Molecular Dynamics Simulations on GPUs,” *J. Comput. Chem.* **36** (1), 1–8 (2015). doi [10.1002/jcc.23763](https://doi.org/10.1002/jcc.23763).
43. P. Mathur, H. K. Azad, S. H. V. Sangaraju, and E. Agrawal, “Parallelization of Molecular Dynamics Simulations Using Verlet Algorithm and OpenMP,” in *Lecture Notes in Network and Systems* (Springer, Singapore, 2024), Vol. 832, pp. 263–274. doi [10.1007/978-981-99-8129-8_22](https://doi.org/10.1007/978-981-99-8129-8_22).
44. V. O. Podryga and S. V. Polyakov, “Parallel Implementation of Multiscale Approach to the Numerical Study of Gas Microflows,” *Vychisl. Metody Program. (Numerical Methods and Programming)* **17** (2), 147–165 (2016). doi [10.26089/NumMet.v17r214](https://doi.org/10.26089/NumMet.v17r214).

Received
February 16, 2024

Accepted for publication
April 17, 2024

Information about the author

Evgenii V. Vorozhtsov — Dr. Sci., Leading Scientist; Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics SB RAS, ulitsa Insitutskaya, 4/1, 630090, Novosibirsk, Russia.