



Численное моделирование соударения железного шарика с тонким алюминиевым экраном методом молекулярной динамики

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: Рассматривается задача о соударении железной наносферы с тонким алюминиевым экраном вдоль нормали к нему. Задача решается в трехмерной постановке методом молекулярной динамики. Численное решение получено с применением новой симплектической четырехстадийной схемы расщепления FR50 типа Рунге–Кутты семейства Фореста–Рута. Схема имеет четвертый порядок точности. При соударении железной наносферы с алюминиевым экраном происходит сквозное пробитие мишени. Выполнено сравнение результатов расчета с экспериментальными данными, имеющимися в литературе. В частности, остаточная скорость ударника после пробития мишени отличается от полученной в эксперименте на 2.54%. Далее, относительное остаточное утоньшение ударника в направлении его движения после пробития мишени на 6.6% больше, чем в эксперименте. Для решения рассматриваемой задачи применена также схема Верле, которая имеет второй порядок точности. Эта схема демонстрирует значительный дрейф полной энергии даже при временном шаге, который в 4 раза меньше, чем в случае схемы FR50. Приводятся профили средних составляющих вектора скорости ударника, температур ударника и преграды в процессе его проникновения в преграду и после выхода в запреградное пространство как функций времени.

Ключевые слова: сквозное пробитие мишени, молекулярная динамика, уравнения Гамильтона, симплектические разностные схемы.

Благодарности: Работа выполнена в рамках государственного задания ИТПМ СО РАН (номер государственной регистрации 124021400036–7).

Для цитирования: Ворожцов Е.В. Численное моделирование соударения железного шарика с тонким алюминиевым экраном методом молекулярной динамики // Вычислительные методы и программирование. 2026. 27, № 3. 337–358. doi 10.26089/NumMet.v27r322.

Numerical modeling of the collision of an iron ball with a thin aluminum shield by the molecular dynamics method

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 collision of an iron nanosphere with a thin aluminum shield along the normal to it is considered. The problem is solved in a three-dimensional formulation using molecular dynamics. The numerical solution is obtained using a new symplectic four-stage splitting scheme FR50 of the Runge–Kutta type of the Forest–Ruth family. The scheme has a fourth-order accuracy. The collision of the iron nanosphere with the aluminum shield results in a through-penetration of the target. The calculation results are compared with experimental data available in the literature. In particular, the residual velocity of the striker after penetrating the target differs from that obtained experimentally by 2.54%. Furthermore, the relative residual thinning of the striker in the direction of its motion after penetrating the target is 6.6% greater than that obtained experimentally. The Verlet scheme, which has second-order accuracy, was also used to solve this problem. This scheme demonstrates a significant drift in total energy even with a time step that is four times smaller than that of the FR50 scheme. Profiles of the average components of the striker velocity vector, striker temperature, and target temperature during its penetration and after exiting the target are presented as functions of time.

Keywords: through-penetration of the target, molecular dynamics, Hamilton equations, symplectic difference schemes.

Acknowledgements: The research was carried out within the state assignment of the ITAM SB RAS (No. of state registration: 124021400036–7).

For citation: E. V. Vorozhtsov, “Numerical modeling of the collision of an iron ball with a thin aluminum shield by the molecular dynamics method,” *Numerical Methods and Programming*. 27 (3), 337–358 (2026). doi 10.26089/NumMet.v27r322.

1. Введение. Процессы, протекающие в твердых телах при ударно-волновом нагружении, являются предметом постоянных фундаментальных и прикладных исследований [1]. В этих исследованиях все чаще применяются численные методы, разработанные в рамках молекулярной динамики (МД). При использовании МД-метода не требуется формулировать уравнения состояния. Как известно, получение этих уравнений является одной из сложнейших задач механики сплошных сред [2]. 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 [3]. Физические процессы, сопутствующие высокоскоростному соударению тел, определяются наличием контактных и свободных границ.

Формулировка начальных и краевых условий, а также подбор определяющих соотношений существенно усложняются для материалов и конструкций со сложной структурой, что накладывает более строгие требования на процесс тестирования и в целом на проверку адекватности математического моделирования и компьютерного моделирования путем сравнения результатов численных расчетов с имеющимися в литературе экспериментальными данными. В этом плане значительный интерес представляет книга [4], в которой приводятся многочисленные экспериментальные данные по высокоскоростному соударению, полученные на экспериментальных баллистических установках НИИ ПММ ТГУ (г. Томск).

Что касается расчетных методов для численного моделирования высокоскоростного взаимодействия тел в рамках механики деформируемых твердых тел, здесь получили распространение такие лагранже-



вы методы, как метод Уилкинса и метод Джонсона [4, 5]. Эйлера численный метод, основанный на конечно-разностной схеме Мак-Кормака и методе маркеров, применялся в [4]. Однако, как отмечалось в [6], нарушение континуальности материалов при сильном деформировании и разрушении создает серьезные сложности в описании подобных процессов в рамках механики сплошной среды.

Метод МД можно рассматривать как еще один достаточно общий подход к численному исследованию процессов высокоскоростного взаимодействия твердых тел. В [7] было отмечено шесть аспектов в пользу привлекательности МД-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.

Уравнения МД — обыкновенные дифференциальные уравнения Гамильтона, описывающие взаимодействие материальных частиц. В работах [8–13] имеется подробный обзор методов построения симплектических схем для решения уравнений гамильтоновой механики, в которых гамильтониан взаимодействующих частиц распадается на сумму кинетической и потенциальной энергии. При этом рассматривались семейства явных схем Рунге–Кутты–Нистрема [14] и Фореста–Рута [15, 16]. Второе семейство можно рассматривать как семейство явных схем расщепления. При этом сначала решаются уравнения импульсов частиц и на i -й стадии находится импульс $p^{(i)}$ каждой частицы. Затем в разностные уравнения движения частиц на i -й стадии подставляются только что найденные значения $p^{(i)}$. В зарубежной литературе это семейство называют семейством схем расщепления типа Рунге–Кутты (PRK-схемы). В работе [15] были предложены двух- и трехстадийные PRK-схемы второго и третьего порядков точности. В [16] подход, предложенный в [15], был обобщен на случай K -стадийных PRK-схем, где K — количество стадий метода типа Рунге–Кутты, которое может превышать значение $K = 3$. В данной статье применяются в практических расчетах четырехстадийные PRK-схемы, описанные в общем виде в работе [16]. В дальнейшем мы будем называть эти схемы кратко схемами Фореста–Рута (FR-схемами).

В работе [16] показано, что задача построения симплектических схем заданного порядка точности с фиксированным количеством стадий сводится к задаче нахождения корней системы полиномиальных уравнений, возникающих из требования обращения в нуль полиномиальных выражений для коэффициентов погрешности аппроксимации схемы. В [8–13] показано, что использование техники базисов Гребнера [17–19], реализованной в пакете программ Mathematica [20], позволяет находить корни больших систем полиномиальных уравнений.

В K -стадийных FR-схемах ($K > 1$) на каждой стадии выполняются однотипные арифметические операции и их количество одинаково на каждой стадии. Поэтому ясно, что машинное время, потребное для вычислений на всех K стадиях, пропорционально числу стадий K . Тем не менее, использование FR-схем с увеличенным числом стадий может давать значительную экономию машинного времени компьютера за счет увеличения временного шага без потери точности численного решения благодаря высокому порядку точности метода.

В работе [21] было рассмотрено семейство пятистадийных FR-схем. Показана невозможность получения пятистадийных FR-схем пятого порядка точности. Максимальный порядок точности, который может быть достигнут в пятистадийной FR-схеме, равен четырем. В то же время пятистадийные схемы, полученные в [21], имеют функционалы локальной погрешности, которые в три раза меньше, чем у лучших четырехстадийных FR-схем, полученных в [13]. Поэтому представляет интерес применение новых пятистадийных FR-схем при численном решении прикладных задач молекулярной динамики.

В [9, 10, 12, 13] было проведено сравнение точности явных симплектических схем порядков точности от второго до пятого на примере задачи Кеплера двух тел, имеющей аналитическое решение. В качестве схемы второго порядка точности использовалась для сравнения известная схема Верле [22]. 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.

Явные симплектические схемы накладывают существенные ограничения на временной шаг из требования устойчивости. Даже если счет происходит устойчиво, может развиваться во времени явление дрейфа полной энергии системы частиц [23, 24]. Суть этого явления, возникающего при использовании приближенных симплектических интеграторов, состоит в постепенном изменении величины полной энергии в замкнутой системе с течением времени несмотря на то, что теоретически энергия должна быть константой движения и не должна изменяться [25]. В этих случаях приходится делать пробные расчеты

задачи с уменьшающимися временными шагами. Явление дрейфа полной энергии является недостатком явных симплектических схем.

Ниже осуществлено численное моделирование МД-методом задачи о высокоскоростном соударении железного шарика с тонким алюминиевым экраном. Выбор именно этой задачи связан с тем, что для нее имеются экспериментальные данные в [4].

2. Основные уравнения. В МД расчет трехмерного движения N частиц ($N \geq 1$) осуществляется путем решения уравнений Гамильтона [26]:

$$\frac{dx_{\alpha l}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_{\alpha l}}, \quad \frac{dp_{\alpha l}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_{\alpha l}}, \quad (1)$$

$$H(x_{\alpha l}, p_{\alpha l}) = \mathcal{K}(p_{\alpha l}) + V(x_{\alpha l}), \quad (2)$$

$$\mathcal{K}(p_{\alpha l}) = \sum_{l=1}^N \sum_{\alpha=1}^3 \frac{p_{\alpha l}^2}{2m_l}, \quad (3)$$

где t — время, (x_{1l}, x_{2l}, x_{3l}) — пространственные координаты l -й частицы, l — номер частицы, $l = 1, \dots, N$, $\alpha = 1, 2, 3$. Величина $\mathcal{K}(p_{\alpha l})$ в (2), (3) — кинетическая энергия, где $p_{\alpha l}$ — количество движения l -й частицы вдоль оси x_{α} , m_l — масса l -й частицы; $V(x_{\alpha l})$ — 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 от начального состояния к конечному состоянию

$$x_{\alpha l} = x_{\alpha l}(x_{\alpha l}^0, p_{\alpha l}^0, t), \quad p_{\alpha l} = p_{\alpha l}(x_{\alpha l}^0, p_{\alpha l}^0, t). \quad (4)$$

Для удобства дальнейшего изложения перепишем уравнения Гамильтона (1) для одной частицы в виде

$$dx/dt = p/m, \quad dp/dt = f(x), \quad H = p^2/(2m) + V(x), \quad (5)$$

где $f(x)$ — сила, действующая на частицу, $f(x) = -\partial V(x)/\partial x$.

Как будет показано ниже, 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:

$$\mathbf{f}_i = -\sum_{j \neq i} \mathbf{f}_{ij} = -\sum_{j \neq i} \frac{\partial V(r_{ij})}{\partial \mathbf{r}_{ij}} = -\sum_{j \neq i} \left(\frac{\partial V_i(r_{ij})}{\partial r_{ij}} + \frac{\partial V_j(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \right) \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}}, \quad (6)$$

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

3. Постановка задачи о соударении железной наносферы с алюминиевым экраном. Рассматривается задача о высокоскоростном соударении стального шарика с тонким алюминиевым экраном (рис. 1). Соответствующие экспериментальные исследования были выполнены на гладкоствольной баллистической установке в НИИ ПММ ТГУ (г. Томск) [4, с. 303–304]. В эксперименте была зафиксирована начальная скорость стального сферического ударника $v_0 = 2.094$ км/с и скорость его остатка с точностью до 1%. Диаметр ударника $d_s = 9.6$ мм и толщина алюминиевой пластины $b = 2$ мм. Сторона пластины, обращенная к ударнику, располагалась в плоскости $x_2 = 0$. Будем называть ее лицевой стороной. Пластина предполагалась квадратной в плоскости $x_2 = 0$. Длина стороны пластины не указана в [4, с. 303–304].

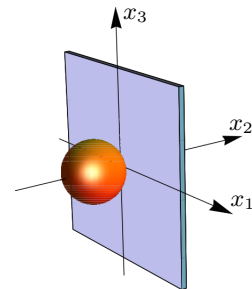


Рис. 1. Начальная конфигурация сферического ударника и преграды

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



Поэтому мы задавали ее достаточно большой с таким расчетом, чтобы в процессе пробития пластины сферическим ударником область деформации пластины не доходила до краев пластины. Отметим, что торцы алюминиевой пластины и ее тыльная сторона не были закреплены, т.е. пластина могла свободно деформироваться при ее взаимодействии с ударником.

В начальный момент времени $t = 0$ пластина находилась в состоянии покоя, поэтому в каждой ее точке составляющие v_1^0, v_2^0, v_3^0 вектора скорости были равны нулю. Вектор \mathbf{v}^0 начальной скорости ударника был направлен по нормали к пластине, поэтому $\mathbf{v}^0 = (0, v_2^0, 0)$, где $v_2^0 = 2094$ м/с в соответствии с экспериментальными данными.

Переход к постановке задачи соударения тел в рамках молекулярной динамики был осуществлен с учетом критериев подобия (раздел 5). Ударник имел заданный радиус $R_s = 29.1564 \text{ \AA}$ и его центр находился на оси x_2 (рис. 1). Вектор его начального количества движения $\mathbf{p}^0 = (0, Nm_2v_2^0, 0)$, где m_2 — масса атома алюминия, N — число атомов железа в ударнике. В эксперименте критерий подобия $\Pi_1 = d_s/b = 4.8$. В расчетах $\Pi_1 = d_s/b = 2R_s/12.1485 = 4.8$. Заметим, что $\Pi_6 = v_0/C$ — число Маха в пластине. Скорость звука в алюминии $C = 6260$ м/с, поэтому $\Pi_6 < 1$. Это означает, что возмущения в пластине распространяются с дозвуковой скоростью. В расчетах по МД-методу задавалась толщина алюминиевой пластины $b = 3a_{Al} = 12.1485 \text{ \AA}$, где a_{Al} — расстояние между атомами алюминия, лежащими в двух соседних углах одной грани кубической ячейки кристаллической решетки алюминия (подробнее см. в следующем разделе). Грани алюминиевой пластины, перпендикулярные оси x_2 , были квадратами с длиной стороны $A_2 = 45a_{Al}$. В пластине все атомы предполагались при $t = 0$ в состоянии покоя, т.е. $p_{1l}^0 = p_{2l}^0 = p_{3l}^0 = 0$ в (4).

Сталь — железо с добавками. К настоящему времени разработаны десятки марок стали. Они существенно различаются по своим прочностным и упругопластическим свойствам. К сожалению, в [4, с. 303–304] не указана марка стали, из которой был изготовлен сферический ударник. Кроме того, для моделирования методом МД нужен еще ЕАМ-потенциал, хорошо моделирующий различные свойства конкретной марки стали. В настоящее время в литературе имеются потенциалы лишь для нескольких конкретных марок стали. С учетом изложенного мы использовали в расчетах ЕАМ-потенциал железа из [31] для моделирования металла сферического ударника.

4. Выбор потенциала межатомного взаимодействия. 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. В ЕАМ-формулировке изначально заложена возможность описания систем, состоящих из атомов различных веществ. Более подробное описание ЕАМ-потенциалов, использованных в данной работе, можно найти в [3, 27].

Первоначально ЕАМ-потенциал был предложен для описания переходных металлов с гранцентрированной кубической (ГЦК) решеткой и объемноцентрированной кубической (ОЦК) решеткой [28, 29]. Затем ЕАМ-потенциал был обобщен на металлы с гексагональной плотноупакованной (ГПУ) решеткой [30]. В настоящее время имеется большое количество работ, в которых теория ЕАМ-потенциалов уточняется и развивается для переходных металлов и их сплавов.

Атомные решетки железа и алюминия имеют различия [31]. Атомная решетка железа является ОЦК решеткой; элементарная кубическая ячейка решетки железа содержит 9 атомов: 8 атомов в углах и один атом в геометрическом центре ячейки. Элементарная кубическая ячейка решетки алюминия содержит 8 атомов в углах куба и 6 атомов в центре каждой из шести граней ячейки, итого 14 атомов; атомная решетка алюминия является ГЦК решеткой.

Расстояние между атомами, лежащими на одной грани ячейки, различно для Al и Fe; оно находится с помощью рентгеноструктурного анализа и дается в справочниках, см. также [31–33]. Обозначим через a_{Fe} и a_{Al} расстояние между атомами, соответственно, железа и алюминия, лежащими в двух соседних углах одной грани. Согласно [31–33], $a_{Fe} = 2.86645 \text{ \AA}$. Аналогично, для алюминия $a_{Al} = 4.0495 \text{ \AA}$.

Перечисленные выше различия в атомных решетках железа и алюминия были учтены при разработке компьютерной программы решения задачи о соударении стальной наносферы с тонким алюминиевым экраном.

В металлах валентные электроны слабо связаны с ядрами, поэтому отрываются от них и образуют электронную ферми-жидкость [34]. 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:

$$\rho_i = \sum_{j \neq i}^{N_c} \rho_{ij}(r_{ij}), \quad (7)$$

где N_c — число атомов, заключенных в сфере с радиусом обрезания r_c . В формуле (7) 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 [31]

$$\rho_{ij}(r_{ij}) = \xi^2 \exp(-2q(r_{ij}/r_0 - 1)), \quad (8)$$

где r_0 — равновесное расстояние между ближайшими соседями, ξ , q — константы аппроксимации. Согласно теории функционала электронной плотности [35], 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 [36]:

$$F_i(\rho_i) = -\sqrt{\rho_i}. \quad (9)$$

С учетом сказанного выше выражение для потенциальной энергии, приходящейся на один атом, записывается в виде

$$V_i = F_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^{N_c} \varphi(r_{ij}). \quad (10)$$

Второй член в формуле (10) 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 [29]

$$\varphi(r_{ij}) = A \exp(-\gamma(r_{ij}/r_0 - 1)), \quad (11)$$

где A и γ — константы аппроксимации. Для подбора констант аппроксимации в формулах (8), (11) 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) [37].

Поскольку уравнение (10) 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 (8), (11), 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 (10) равен нулю при $r_{ij} > r_c$.

Радиус обрезания должен быть не меньше, чем расстояние a между двумя атомами, лежащими в концах ребра кубической ячейки атомной решетки [38, р. 58]. В случае гранецентрической решетки наибольшим расстоянием между двумя соседними атомами является расстояние между двумя атомами, лежащими на диагонали грани ячейки. Легко найти с помощью элементарного вычисления, что это расстояние равно $\sqrt{2}a$. В случае однокомпонентной системы и гранецентрической решетки радиус обрезания r_c вычислялся в практических расчетах по формуле $r_c = \sqrt{2}a$.

В случае объемноцентрированной кубической решетки наибольшее расстояние между двумя атомами ячейки решетки равно $\sqrt{3}a$ как расстояние между двумя соседними атомами, лежащими в концах



диагонали кубической ячейки. Так что для железа $r_c = \sqrt{3}a$. Ниже мы рассматриваем двухкомпонентную систему (Fe, Al). В этом случае радиус обрезания вычисляется по формуле $r_c = \max(r_c^{\text{Fe}}, r_c^{\text{Al}})$ [38, p. 75].

Таким образом, вклад в силу, действующую на i -ю частицу со стороны j -х частиц, при $r \geq r_c$ не учитывается. Это вносит ошибки в полную энергию системы частиц. Кроме того, соответствующие потенциал и силы оказываются разрывными и полная энергия системы больше не сохраняется. Можно увеличивать величину r_c до такого значения, когда амплитуды разрывов в функциях (6) и (9) при $r = r_c$ становятся достаточно малыми [38, p. 55]. Альтернативный подход состоит в том, чтобы уменьшить размеры кубических ячеек так, чтобы они были меньше, чем r_c . Но тогда большее количество ячеек оказывается внутри радиуса обрезания. Оба упомянутых выше подхода приводят к увеличению машинного времени счета из-за того, что большее количество частиц привлекается для расчета значения потенциала i -й частицы с учетом соседних частиц.

При выполнении процедуры обрезания 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 (10) по координатам r_{ij} и суммировании по всем j -м атомам, находящимся внутри сферы $r_{ij} < r_c$. Подставляя потенциал (10) в формулу (6), с учетом радиуса обрезания и формул

$$f_i = \sum_{\alpha=1}^3 f_{\alpha i} e_{\alpha}, \quad f_{ij} = \sum_{\alpha=1}^3 f_{\alpha ij} e_{\alpha}, \quad r_{ij} = \sum_{\alpha=1}^3 (x_{\alpha i} - x_{\alpha j}) e_{\alpha}$$

получаем выражение для α -компоненты силы, действующей на i -й атом [3, с. 68; 39]:

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

Здесь

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

Взаимодействие атома Fe (“11”) с атомом Al (“22”) рассчитывалось по следующим формулам [31, 38]: $\rho_{ij}^{(12)} = (\rho_{ij}^{(11)} \rho_{ij}^{(22)})^{1/2}$, $\varphi_{ij}^{(12)} = (\varphi_{ij}^{(11)} \varphi_{ij}^{(22)})^{1/2}$.

При расчетах задач высокоскоростного взаимодействия тел мы использовали константы ξ, A, q, γ, r_0 для железа и алюминия из работ [31, 40], они приведены в табл. 1.

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

Металл, источник Metal, source	ξ , эВ ξ , eV	A , эВ A , eV	q	γ	r_0 , Å
Fe, [31]	1.5418	0.1184	2.3197	10.7613	2.4824
Al, [40]	0.7981	0.0334	1.1120	14.6147	2.8119

5. Критерии подобия. 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 $\sigma_{\alpha\beta}$ [3, 27]. Это означает, что 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.

В [4, с. 101] рассматривался вопрос о формулировке критериев подобия для задачи о создании кратера глубины L_K в массивной мишени ударником в виде стержня длины l_c и диаметра d_c . Всего в задаче о кратерообразовании девять определяющих параметров: $L_K, l_c, d_c; v_0$ — начальная скорость удара; ρ_c, ρ_n — начальные плотности стержня и материала преграды; σ_c, σ_n — динамические прочностные характеристики стержня и материала преграды; C — объемная скорость звука материала преграды. Эта система из девяти определяющих параметров дает шесть критериев подобия:

$$\Pi_1 = \frac{L_K}{l_c}, \quad \Pi_2 = \frac{\rho_n C^2}{\sigma_n}, \quad \Pi_3 = \frac{l_c}{d_c}, \quad \Pi_4 = \frac{\rho_c}{\rho_n}, \quad \Pi_5 = \frac{\sigma_c}{\sigma_n}, \quad \Pi_6 = \frac{v_0}{C}. \quad (12)$$

В задаче о соударении стержня с тонкой пластиной предполагается, что в пластине вместо кратера образуется сквозное отверстие. Если ударник — шар, то вместо критерия Π_1 в (12) разумно использовать критерий $\Pi_1 = d_s/b$, где d_s — диаметр сферического ударника, b — толщина преграды [4, с. 125]. Кроме того, из критериев подобия (12) необходимо исключить критерий Π_3 .

Размерные величины обезразмеривались по следующим формулам: 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

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

Далее, из (1) получаем уравнение: $dp_{\alpha i}/dt = -\partial V/\partial x_{\alpha i}$. Перейдем в этом уравнении к безразмерным переменным:

$$d(\bar{p}_{\alpha i} \cdot m_0 v_0)/d(\bar{t} t_0) = -\partial(\bar{V} V_0)/\partial(\bar{x}_{\alpha i} x_0), \tag{13}$$

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 (13) находим: $V_0 = m_0(x_0/t_0)^2 = 1.6 \cdot 10^{-19}$ Дж = 1 эВ.

6. Четырехстадийные схемы Фореста–Рута. Предположим, что значения x^n и p^n известны на n -ом временном слое, $n = 0, 1, \dots$. Мы хотим найти решение системы (5) на $(n + 1)$ -ом временном слое $t^{n+1} = t^n + h$, где h — временной шаг. С этой целью разобьем переход с t^n к t^{n+1} на K стадий, $K \geq 1$. В семействе симплектических схем Фореста–Рута этот переход выполняется следующим образом [16]:

$$p^{(i)} = p^{(i-1)} + c_i h f(x^{(i-1)}), \quad x^{(i)} = x^{(i-1)} + d_i \frac{h}{m} p^{(i)}, \quad i = 1, \dots, K. \tag{14}$$

Уравнения (14) определяют класс явных симплектических схем, точность которых определяется числом стадий K и коэффициентами c_i, d_i . В этих уравнениях $p^{(0)} = p^n, x^{(0)} = x^n$.

Рассмотрим схему (14) с $K \geq 1$. Пусть значение количества движения p^n известно. Решение в следующем узле $t^{n+1} = t^n + h$ вычисляется по формуле $p^{n+1} = p^n + \Delta p_{h,n}$. Формула для вычисления $\Delta p_{h,n}$ зависит от количества стадий K рассматриваемого метода и от $2K$ постоянных $c_i, d_i, i = 1, \dots, K$. С другой стороны, легко получить “точную” формулу для приращения Δp_n , используя разложение величины p^{n+1} в отрезок ряда Тейлора:

$$\Delta p_n = p(t^n + h) - p(t^n) \approx \sum_{j=1}^{N_T} \frac{h^j}{j!} \frac{d^j p(t^n)}{dt^j},$$

где N_T — целое число, задаваемое пользователем, $N_T \geq K + 1$. Если разность $\delta p_n = \Delta p_n - \Delta p_{h,n}$ удовлетворяет соотношению $\delta p_n/h = \mathcal{O}(h^\lambda)$, где $\lambda > 0$, то схема имеет порядок точности $\mathcal{O}(h^\lambda)$ [41].

В случае интегратора Фореста–Рута (14) нужно разложить $f(x^{(i-1)})$ в ряд Тейлора по степеням временного шага h относительно момента времени t^n для исследования точности интегратора при заданном числе стадий. Из формул семейства Фореста–Рута следует, что на каждой стадии выполняются однотипные арифметические операции. Коэффициенты c_j и d_j появляются только на j -й стадии FR-метода ($j = 1, \dots, K$). Авторы работ [42, 43] полагают, что за счет минимизации главного члена погрешности аппроксимации схемы можно заметно повысить точность схемы, и тогда за счет вычислений с увеличенным временным шагом можно добиться экономии машинного времени. Ясно, что увеличение числа параметров создает дополнительные возможности для минимизации погрешности схемы по сравнению со случаем меньшего числа параметров. В [42] поиск оптимальных многостадийных FR-схем осуществлялся с применением техники пропагаторов. При этом упор делался на обрабатываемые во времени (симметричные, палиндромные) схемы.

В [43] были построены симметричные шестистадийные схемы четвертого порядка точности в семействе FR, а также FR-методы шестого порядка точности с числом стадий от 7 до 15. При этом наиболее эффективным методом оказался FR-метод с 10 стадиями.



Семейство четырехстадийных схем Фореста–Рута получается из разностных уравнений (14) при $K = 4$. Четырехстадийная FR-схема содержит восемь параметров c_i, d_i ($i = 1, \dots, 4$). Соответствующая погрешность δp_n имеет следующий вид [12, 13]:

$$\begin{aligned} \delta p_n = & hP_1 f(x) + \frac{h^2}{2} P_2 u(t) f'(x) + \frac{h^3}{6} \left[\frac{P_{31}}{m} f(x) f'(x) + P_{32} u^2(t) f''(x) \right] + \\ & + \frac{h^4 u(t)}{24m} \left\{ P_{41} \cdot [f'(x)]^2 + 3P_{42} f(x) f''(x) + P_{43} m u^2(t) f^{(3)}(x) \right\} - \\ & - \frac{h^5}{120m^2} \left(3P_{51} f^2(x) f''(x) + f(x) P_{52} [f'(x)]^2 - 6P_{53} m u^2(t) f^{(3)}(x) - \right. \\ & \left. - m u^2(t) (5P_{54} f'(x) f''(x) + P_{55} m u^2(t) f^{(4)}(x)) \right), \end{aligned} \quad (15)$$

где $u(t)$ — скорость частицы. Формулы для полиномов $P_1, P_2, P_{31}, P_{32}, P_{41}, P_{42}, P_{43}, P_{51}, P_{52}, P_{53}, P_{54}, P_{55}$ даны в [12, 21], мы не будем приводить их здесь ввиду их громоздкости.

Погрешность δx_n дается формулой, полученной аналогично формуле (15):

$$\begin{aligned} \delta x_n = & \frac{hp}{m} R_1 + \frac{h^2}{2m} R_2 f(x) + \frac{h^3}{6m} R_3 u(t) f'(x) + \frac{h^4}{24m^2} [R_{41} f(x) f'(x) + R_{42} m u^2(t) f''(x)] + \\ & + \frac{h^5 u(t)}{120m^2} \left\{ R_{51} [f'(x)]^2 + 3R_{52} f(x) f''(x) + R_{53} m u^2(t) f^{(3)}(x) \right\}, \end{aligned} \quad (16)$$

где $R_1, R_2, R_3, R_{41}, R_{42}, R_{51}, R_{52}, R_{53}$ — многочлены, формулы которых приведены в [12, 21]. Из формул для погрешностей δp_n и δx_n следует, что для обеспечения четвертого порядка точности схемы (14) с $K = 4$ необходимо, чтобы восемь параметров $c_i, d_i, i = 1, \dots, 4$, удовлетворяли следующей полиномиальной системе:

$$\begin{aligned} P_1 = 0, \quad P_2 = 0, \quad P_{31} = 0, \quad P_{32} = 0, \quad P_{41} = 0, \quad P_{42} = 0, \quad P_{43} = 0, \\ R_1 = 0, \quad R_2 = 0, \quad R_3 = 0, \quad R_{41} = 0, \quad R_{42} = 0. \end{aligned} \quad (17)$$

Уравнения (17) называются условиями порядка рассматриваемой FR-схемы [44]. Количество уравнений в (17) больше, чем количество неизвестных $c_1, c_2, c_3, c_4, d_1, d_2, d_3, d_4$.

Аналогично случаю четырехстадийной схемы Рунге–Кутты–Нистрема [12] нетрудно доказать, что многочлены $R_2, R_3, R_{41}, R_{42}, R_{52}, R_{53}$ выражаются через многочлены $P_1, P_2, P_{31}, P_{32}, P_{42}, P_{43}, P_{53}, P_{55}$ по следующим формулам:

$$\begin{aligned} R_2 = P_2 - 2P_1, \quad R_3 = 3P_2 - 2P_{32}, \quad R_{41} = 4P_{31} - 3P_{42}, \\ R_{42} = 4P_{32} - 3P_{43}, \quad R_{52} = 5P_{42} - 4P_{53}, \quad R_{53} = 5P_{43} - 4P_{55}. \end{aligned} \quad (18)$$

Справедливость данных соотношений проверяется путем вычисления правой части и сравнения результата с левой частью. Например, проверим справедливость равенства $R_3 = 3P_2 - 2P_{32}$. Используя выражения для многочленов P_2 и P_{32} из [12, 21], имеем:

$$\begin{aligned} 3P_2 - 2P_{32} = & 3(-1 + 2c_2 d_1 + 2c_4 d_1 + 2c_4 d_2 + 2c_3(d_1 + d_2) + 2c_4 d_3) - \\ & - 2(-1 + 3c_2 d_1^2 + 3c_4 d_1^2 + 6c_4 d_1 d_2 + 3c_4 d_2^2 + 3c_3(d_1 + d_2)^2 + 6c_4 d_1 d_3 + 6c_4 d_2 d_3 + 3c_4 d_3^2). \end{aligned}$$

Упрощение выражения $R_3 - (3P_2 - 2P_{32})$ с помощью функции `Simplify[...]` программного пакета `Mathematica` приводит к следующей формуле:

$$R_3 - (3P_2 - 2P_{32}) = 6[c_2 d_1 + c_3(d_1 + d_2) + c_4(d_1 + d_2 + d_3)](-1 + d_1 + d_2 + d_3 + d_4). \quad (19)$$

Мы ищем решение системы (17). На ее решении должно выполняться равенство $R_1 = 0$, из которого следует равенство $d_1 + d_2 + d_3 + d_4 - 1 = 0$. Отсюда с учетом (19) следует справедливость равенства $R_3 = 3P_2 - 2P_{32}$.

С учетом (18) уравнения $R_2 = 0, R_3 = 0, R_{41} = 0, R_{42} = 0$ в (17) избыточны. Таким образом, нужно решить следующую полиномиальную систему:

$$P_1 = 0, \quad P_2 = 0, \quad P_{31} = 0, \quad P_{32} = 0, \quad P_{41} = 0, \quad P_{42} = 0, \quad P_{43} = 0, \quad R_1 = 0. \quad (20)$$

Количество уравнений в (20) равно количеству неизвестных $c_i, d_i, i = 1, \dots, 4$.

Так как мы ищем схемы четвертого порядка точности, то в качестве главных членов погрешности в формулах (15) и (16) должны рассматриваться члены порядка малости $O(h^5)$. В качестве количественной меры погрешности новых схем будем использовать следующие два функционала:

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

Здесь $\sigma_1, \dots, \sigma_5$ — множители перед многочленами P_{5j} в (15), $\sigma_1 = 3, \sigma_2 = 1, \sigma_3 = 6, \sigma_4 = 5, \sigma_5 = 1$, они не зависят от специфики решаемой задачи. Формула для $X_{5,\text{rms}}^{(l)}$ учитывает множитель 3 перед R_{52} в (16). Наконец, l — номер найденной новой схемы, $l = 1, 2, \dots$.

В [13] в семействе четырехстадийных FR-схем (14) было найдено 97 новых четырехстадийных схем четвертого порядка точности с помощью параметрических базисов Гребнера и результатов Сильвестра. Лучшими четырехстадийными FR-схемами четвертого порядка точности, найденными в [13], оказались следующие схемы: FR47, FR50, FR51, FR52.

Исследование устойчивости симплектических схем типа Рунге–Кутты обычно проводится на примере задачи о гармоническом осцилляторе. В этой задаче фигурирует только одна частица, которая осциллирует вдоль оси x_1 с ростом времени t . Поэтому аналитические вычисления с целью получения условия устойчивости сравнительно просты. Однако с увеличением числа стадий K PRK-схемы требуемый объем вычислений возрастает нелинейно.

Известно, что если симплектическая схема устойчива, то все корни ее характеристического уравнения лежат на единичной окружности комплексной плоскости. В качестве физической модели рассмотрим осциллятор с квадратичным потенциалом $V(x) = m\omega^2 x^2/2$, для которого положение равновесия находится при $x = 0, p = 0$. Подставляя данное выражение $V(x)$ в уравнения (5), получим линейные уравнения движения

$$dx/dt = p/m, \quad dp/dt = -m\omega^2 x. \quad (21)$$

Пусть $\mathbf{X}^n = (x^n, p^n)^T$ и $\mathbf{X}^{n+1} = (x^{n+1}, p^{n+1})^T$, где верхний индекс T обозначает операцию транспонирования. В матричной записи FR-схема (14), примененная к системе (21), имеет следующий вид: $\mathbf{X}^{n+1} = G\mathbf{X}^n$, где G — матрица размера 2×2 . Пусть $g_{ij}, i, j = 1, 2$ — элементы этой матрицы. Характеристическое уравнение матрицы G имеет вид: $|G - \lambda E| = \lambda^2 + \text{Tr}(G)\lambda + 1 = 0$, где $\text{Tr}(G)$ — след матрицы G , $\text{Tr}(G) = -g_{11} - g_{22}$; E — единичная матрица размера 2×2 . Величина $\text{Tr}(G)$ является функцией параметров $c_j, d_j, j = 1, \dots, K$, и числа Куранта $\kappa = \omega h$. Условиями устойчивости схемы (14) являются условия $|\lambda_i| \leq 1$, где $\lambda_i, i = 1, 2$ — собственные значения матрицы G , т.е. корни характеристического уравнения. Если дискриминант этого уравнения $D = [\text{Tr}(G)/2]^2 - 1 < 0$, то оно имеет два комплексно-сопряженных корня λ_1, λ_2 , такие, что $|\lambda_1| = |\lambda_2| = 1$ по теореме Виета. В этом случае существует ненулевая область устойчивости $|\kappa| \leq \kappa_{\text{cr}}$, где κ_{cr} — критическое число Куранта. Введем обозначение $D_2(\kappa) = |\text{Tr}(G)| - 2$. Для рассматриваемых FR-схем κ_{cr} является решением уравнения $D_2(\kappa) = 0$, а искомое условие устойчивости получается из неравенства $D_2 < 0$, вытекающего из неравенства $D < 0$. Соотношение $|G| = g_{11}g_{22} - g_{12}g_{21} = 1$ [26] использовалось для проверки правильности формул для коэффициентов характеристического уравнения.

Параметры c_i, d_i ($i = 1, \dots, 4$) схемы FR50 даны в табл. 2, см. также [13, 21]; дискриминант дается формулой

$$D(\kappa) = -1 + (1/4)[2 - \kappa^2 + (1/12)\kappa^4 - 0.002536488904\kappa^6 + 0.000018395117\kappa^8]^2.$$

В [13, 21] показано, что область устойчивости схемы FR50 состоит из нескольких промежутков:

$$9.82669 \leq |\kappa| \leq 9.84599; \quad 3.47141 \leq |\kappa| \leq 4.45764; \quad 0 < |\kappa| \leq 3.06662.$$

Таблица 2. Значения параметров схемы FR50

Table 2. The values of the parameters of the FR50 scheme

c_i	d_i	$P_{5,\text{rms}}^{(50)}$	$X_{5,\text{rms}}^{(50)}$
0.136825942475053071	0.5	0.0386	0.0708
-0.295364245574992759	-0.062976137694193308		
0.837926908632179149	0.440948891327570560		
0.320611394467760539	0.122027246366622748		



Эти промежутки устойчивости разделены промежутками неустойчивости. Внутри промежутка $0 < |\kappa| \leq 3.06662$ нет промежутков неустойчивости.

7. Схема Верле. В литературе имеется несколько форм схемы Верле [3, 22, 38, 45]. В [3; 45, p. 50] эта схема рассматривалась как частный случай семейства схем Рунге–Кутты–Нистрема [14], когда число стадий $K = 1$ в указанном семействе:

$$x^{(1)} = x^n + \frac{h p^n}{2m}, \quad x^{n+1} = x^n + h \frac{p^n}{m} + \frac{h^2}{2m} f(x^{(1)}), \quad p^{n+1} = p^n + hf(x^{(1)}). \quad (22)$$

Несмотря на то, что схема Верле одностадийная, она имеет второй порядок аппроксимации [3, 45]. Благодаря этому и своей простоте схема Верле была к настоящему времени реализована согласно [38] не менее чем в 21 пакете программ.

Если по схеме Верле выполнено достаточно большое число шагов по t такое, что $nh = O(1)$, то, согласно [46], изменение полной энергии системы частиц $E^n - E^0 = O(h^2)$, где E^0 — полная энергия системы частиц в начальный момент времени. Впрочем, любая симплектическая разностная схема решения задач МД не сохраняет полную энергию E [45, 47].

Пусть N — количество частиц в решаемой задаче. В [47] показано, что на каждом временном шаге схема Верле имеет вычислительную сложность порядка $O(N^2)$.

При применении схемы (22) для численного решения задачи о гармоническом осцилляторе, описываемой уравнениями (21), условие устойчивости схемы (22) получено в [48, p. 29] в виде $\kappa^2 < 4$, где $\kappa = \omega h$. С помощью элементарной процедуры легко получить из этого неравенства условие устойчивости схемы Верле в виде $0 < |\kappa| < 2$. В [9] условие устойчивости рассматриваемой схемы получено в виде $0 < |\kappa| \leq 2$. Таким образом, промежуток устойчивости схемы FR50 в полтора раза больше, чем в случае схемы Верле.

При численных расчетах по схеме Верле (22) задачи о соударении железной наносферы с тонким алюминиевым экраном использовался тот же ЕАМ-потенциал, что и в случае четырехстадийной схемы FR50.

Верификация схем FR50 и Верле была выполнена в [13] путем их применения для решения задачи Кеплера двух тел, которая имеет точное решение [26]. Результаты расчетов показали, что в случаях ненулевого эксцентриситета эллиптических орбит частиц (тел) относительная ошибка в полной энергии системы двух частиц, получаемая по методу FR50, на 5–6 десятичных порядков меньше, чем в случае схемы Верле.

8. Результаты численных расчетов задачи о соударении железной наносферы с тонким алюминиевым экраном. Постановка задачи для ее решения в рамках молекулярной динамики дана выше в разделе 3. Численные расчеты были выполнены по двум симплектическим схемам: схеме FR50 (табл. 2) и схеме Верле (22). Как было показано в [23, 24, 27], величина временного шага h существенно влияет на точность результатов расчетов по симплектическим схемам. В этой связи мы выполнили численный расчет рассматриваемой задачи четырежды. При этом задача решалась в промежутке времени $0 \leq t \leq 3.7$ пс. Этого времени оказалось достаточно для того, чтобы сферический ударник полностью пробил алюминиевый экран и вышел в запреградное пространство.

Первый расчет был выполнен дважды по схеме FR50, при этом для большинства временных шагов использовалось значение $h = 0.001$. Введем в рассмотрение следующую тройку чисел: $\{t^n, t^m, h^n\}$, где $m > n$, $t^n < t^m$, h^n — шаг интегрирования по времени в промежутке $t^n \leq t \leq t^m$. Во избежание возникновения неустойчивости в процессе счета мы использовали следующие тройки $\{t^n, t^m, h^n\}$: $\{0, 0.1, 0.7 \cdot 10^{-3}\}$, $\{0.1, 3.7, 0.001\}$.

Второй расчет был также выполнен по схеме FR50 при значении $h = 0.002$ для большинства временных шагов с использованием следующих троек $\{t^n, t^m, h^n\}$: $\{0, 0.5, 0.7 \cdot 10^{-3}\}$, $\{0.5, 0.6, 10^{-3}\}$, $\{0.6, 0.7, 1.4 \cdot 10^{-3}\}$, $\{0.7, 0.8, 1.6 \cdot 10^{-3}\}$, $\{0.8, 0.9, 1.8 \cdot 10^{-3}\}$, $\{0.9, 3.7, 0.002\}$.

Третий расчет был выполнен по схеме Верле при значении $h = 0.5 \cdot 10^{-3}$ для большинства временных шагов с использованием следующих троек $\{t^n, t^m, h^n\}$: $\{0, 0.1, 0.4 \cdot 10^{-3}\}$, $\{0.1, 3.7, 0.5 \cdot 10^{-3}\}$. Четвертый расчет был также выполнен по схеме Верле при значении $h = 0.002$ для большинства временных шагов с использованием следующих троек $\{t^n, t^m, h^n\}$: $\{0, 0.1, 0.4 \cdot 10^{-3}\}$, $\{0.1, 0.2, 1.3 \cdot 10^{-3}\}$, $\{0.2, 0.3, 1.6 \cdot 10^{-3}\}$, $\{0.3, 3.7, 0.002\}$. Отметим, что схема FR50 требует для получения численного решения на одном временном шаге машинное время, величина которого в 3.8 раза больше, чем в случае схемы Верле.

В [4, с. 304] приводятся значения только двух параметров, полученных экспериментально на баллистической установке. Первый из них — остаточная скорость сферического ударника после того, как он пробил алюминиевый экран. Второй параметр — уменьшение диаметра ударника в направлении его вектора движения после того, как ударник пробил экран. Что касается временной динамики средних температур ударника и мишени в процессе их соударения, то этих сведений нет в [4, с. 304]. Тем не менее, мы приведем соответствующие графики, чтобы показать, что при численном моделировании МД-методом эти данные также могут быть вычислены как функции времени.

Размещение атомов железа в сферическом ударнике в начальный момент времени $t = 0$ осуществлялось следующим образом. В пространстве точек (x_1, x_2, x_3) строился куб, имеющий по 46 ячеек в каждом из координатных направлений x_1, x_2, x_3 . Геометрический центр куба находился на оси x_2 на расстоянии 23 кубических ячеек от лицевой плоскости $x_2 = 0$ алюминиевого экрана. Затем в кубе строилась равномерная сетка из 46^3 кубических ячеек. Длина ребра каждой ячейки была равна $a_{Fe} = 2.86645 \text{ \AA}$. Если очередная точка (x_{1j}, x_{2j}, x_{3j}) , лежащая либо в одной из восьми вершин кубической ячейки, либо в ее геометрическом центре, находилась от центра куба на расстоянии, не превышающем радиус сферического ударника $R_s = 29.157 \text{ \AA}$, то она включалась в множество частиц ударника. Кубическая решетка в алюминиевом экране строилась аналогично и содержала $46 \cdot 46 \cdot 3$ кубических ячеек, где 3 — количество ячеек решетки в направлении оси x_2 . Параметры решеток в ударнике и в преграде были подобраны так, чтобы критерий подобия Π_1 имел то же значение, что и в эксперименте, т.е. $\Pi_1 = 4.8$ (см. подробнее в разделе 3). В МД-расчетах $\Pi_1 = 2R_s/b = 4.8$, где $b = 12.1485 \text{ \AA}$ — толщина экрана. В итоге было получено в начальный момент времени $t = 0$ распределение атомов железа в ударнике, которое содержало 8801 атомов железа. Алюминиевый экран содержал 27724 атома алюминия. На рис. 1 а показано распределение частиц в слое $|x_1| < 3 \text{ \AA}$ в проекции на плоскость $x_1 = 0$. Поскольку количество ячеек в направлении оси x_2 нечетное, плоскость $x_3 = 0$, содержащая ось x_2 , отсекала один ряд кубических ячеек на две равные части. Так как $a_{Al} = 4.0495 \text{ \AA}$, то $a_{Al}/2 \approx 2 < 3$. Поэтому на плоскость $x_1 = 0$ проектировались частицы с координатами $x_2 = \pm a_{Al}/2$. На рис. 2 а показано начальное распределение частиц ударника и преграды в проекции на плоскость $x_1 = 0$.

В эксперименте наблюдалось перемещение вещества пластины по краям отверстия в направлении, противоположном направлению движения сферического ударника, см. рис. 5.38 в [4, с. 304]. В численном расчете методом молекулярной динамики такого перемещения вещества пластины вблизи отверстия не наблюдалось. Наоборот, в окрестности отверстия лицевая сторона пластины сместилась в направлении движения ударника (рис. 2 с–е).

На рис. 2 с–е видно, что с ростом времени ударник несколько отклоняется от сферической формы. При этом диаметр ударника в направлении оси x_3 больше, чем диаметр в направлении оси x_2 . Это означает, что ударник в процессе проникания через мишень несколько сплюснулся вдоль оси x_3 . Расчет МД-методом позволяет проследить динамику изменения во времени геометрической формы ударника.

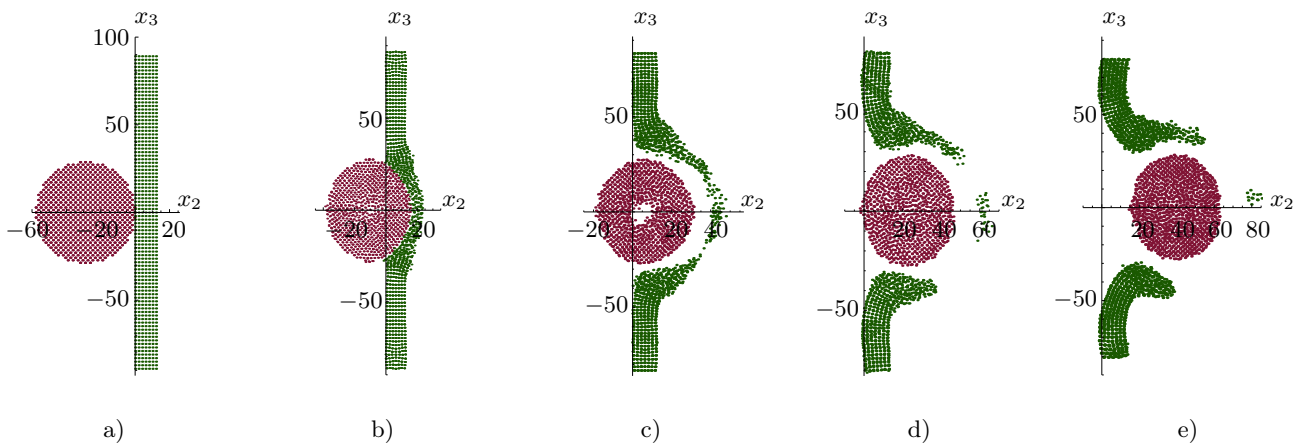


Рис. 2. Столкновение двух тел, эволюция распределения частиц во времени в проекции на сечение $x_1 = 0$:
 а) $t = 0$, б) $t = 0.9$ пс, в) $t = 1.8$ пс, д) $t = 2.7$ пс, е) $t = 3.6$ пс

Fig. 2. Collision of two bodies, time evolution of the distribution of particles projected onto the cross section $x_1 = 0$:
 а) $t = 0$, б) $t = 0.9$ ps, в) $t = 1.8$ ps, д) $t = 2.7$ ps, е) $t = 3.6$ ps



Для этого введем в рассмотрение следующие функции:

$$\xi_l(t) = \frac{(x_{l,\text{sf}})_{\text{max}} - (x_{l,\text{sf}})_{\text{min}}}{D_s}, \quad l = 2, 3; \quad \zeta(t) = \frac{\xi_2(t)}{\xi_3(t)}.$$

Здесь $D_s = 2R_s$, R_s — начальный радиус сферического ударника. Функция $\xi_2(t)$ описывает относительное изменение во времени диаметра ударника $(x_{2,\text{sf}})_{\text{max}} - (x_{2,\text{sf}})_{\text{min}}$ в направлении его движения, т.е. вдоль оси x_2 . Функция $\xi_3(t)$ описывает изменение во времени диаметра ударника $(x_{3,\text{sf}})_{\text{max}} - (x_{3,\text{sf}})_{\text{min}}$ в направлении оси x_3 , т.е. в направлении, перпендикулярном направлению движения ударника. Если бы ударник сохранял свою сферическую форму при $t > 0$, то тогда имели бы место равенства $\xi_l(t) = 1$, $\zeta(t) = 1 \forall t$.

В эксперименте, описанном в [4, с. 304], остаточный диаметр ударника в направлении оси x_2 был равен 8.6 мм. Следовательно, уменьшение диаметра ударника в направлении его движения по отношению к его начальному диаметру равно $8.6/9.6 \approx 0.896$. Согласно табл. 3, относительный остаточный диаметр $\xi_2(3.6) \approx 0.83$. Отсюда получаем относительную погрешность определения остаточного диаметра в направлении оси x_2 , полученного МД-методом: $(0.896 - 0.83) \cdot 100\% = 6.6\%$. Это означает, что в эксперименте сжатие ударника в направлении его движения было менее интенсивным, чем в расчете по методу МД. В то же время относительный остаточный диаметр ударника $\xi_3(3.6)$, полученный в расчете, отличался от его начального диаметра только на 4% (табл. 3). Таким образом, отклонение остаточной формы ударника вдоль оси x_3 от сферической было незначительным.

Так как в запреградном пространстве значения функций $\xi_2(t)$ и $\xi_3(t)$ удовлетворяют неравенству $\xi_2(t) < \xi_3(t)$, то величина $\zeta(t)$ должна удовлетворять неравенству $\zeta(t) < 1$, что и видно в табл. 4. Кроме того, согласно рис. 3, функция $\xi_3(t)$ имеет локальный минимум в промежутке $0.5 \leq t \leq 0.6$. Это означает, что в указанном временном промежутке происходит заметное сжатие ударника в направлении оси x_3 . При дальнейшем процессе пробития мишени происходит частичное восстановление диаметра ударника в направлении оси x_3 до значения, близкого к его начальному диаметру, см. также табл. 3.

Можно заметить, что с увеличением времени увеличивается зазор между ударником и мишенью (рис. 2 с–е). Этот эффект может быть объяснен тем, что имеет место отталкивание ионов вследствие парного кулоновского взаимодействия, см. выше раздел 4. Можно также отметить, что при $t = 1.8$ в окрестности геометрического центра ударника образуется пустота. Ее возникновение можно объяснить

Таблица 3. Значения функций $\xi_2(t)$ и $\xi_3(t)$ в промежутке $0 \leq t \leq 3.6$ пс

Table 3. The values of the functions $\xi_2(t)$ and $\xi_3(t)$ in the interval $0 \leq t \leq 3.6$ ps

t	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
$\xi_2(t)$	0.98	0.95	0.91	0.87	0.80	0.88	0.82	0.86	0.87	0.87	0.92
$\xi_3(t)$	0.98	0.95	0.93	0.91	0.87	0.84	0.84	0.89	0.94	0.97	0.98
t	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6	1.7	1.8	1.9	2.0	2.1
$\xi_2(t)$	0.94	0.93	0.91	0.85	0.87	0.90	0.87	0.86	0.82	0.83	0.82
$\xi_3(t)$	0.98	0.98	0.98	0.96	0.95	0.94	0.94	0.93	0.93	0.93	0.94
t	2.2	2.3	2.4	2.5	2.6	2.7	2.8	2.9	3.0	3.1	3.2
$\xi_2(t)$	0.83	0.83	0.82	0.82	0.82	0.82	0.84	0.82	0.84	0.82	0.82
$\xi_3(t)$	0.95	0.94	0.94	0.94	0.95	0.96	0.95	0.95	0.95	0.95	0.95
t	3.3	3.4	3.5	3.6	3.7						
$\xi_2(t)$	0.83	0.83	0.83	0.83	0.83						
$\xi_3(t)$	0.95	0.95	0.96	0.96	0.96						

Таблица 4. Значения функции $\zeta(t)$ в промежутке $0 \leq t \leq 3.6$ пс

Table 4. The values of the function $\zeta(t)$ in the interval $0 \leq t \leq 3.6$ ps

t	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0	1.2	1.4	1.6	1.8
$\zeta(t)$	1.0	0.98	0.91	0.98	0.93	0.94	0.96	0.88	0.96	0.92
t	2.0	2.2	2.4	2.6	2.8	3.0	3.2	3.4	3.6	3.7
$\zeta(t)$	0.89	0.88	0.87	0.88	0.89	0.89	0.86	0.87	0.87	0.88

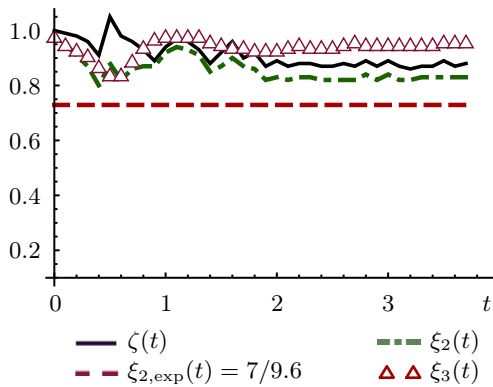


Рис. 3. Графики функций $\zeta(t)$, $\xi_2(t)$, $\xi_3(t)$

Fig. 3. The graphs of the functions $\zeta(t)$, $\xi_2(t)$, $\xi_3(t)$

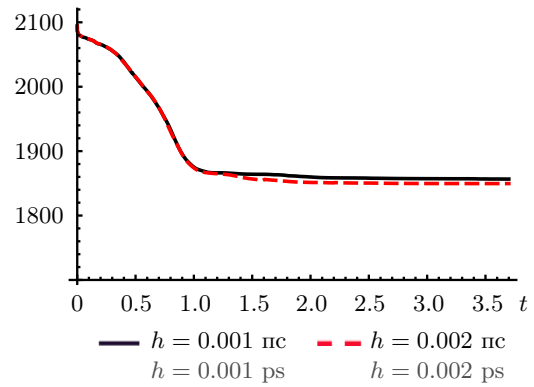


Рис. 4. Графики средней скорости железного сферического ударника $v_{2,\text{mean}}(t)$

Fig. 4. The graphs of the mean velocity of the iron spherical striker $v_{2,\text{mean}}(t)$

тем, что в процессе проникания ударника в преграду он сначала сжимается, а затем начинает восстанавливать свою прежнюю форму. При этом в центре ударника возникает область разрежения вещества, т.е. здесь проявляется упругость ударника. Пустота как раз возникает в процессе восстановления формы ударника. Однако в процессе дальнейшего продвижения ударника эта пустота исчезает (рис. 2 d, e), так как ударник уже почти восстановил свою прежнюю форму и остался почти круглым.

На рис. 4 представлен график средней скорости железного ударника $v_{2,\text{mean}}(t)$. Введем обозначения: $h_1 = 0.001$, $h_2 = 0.002$, $v_2^{(1)} = v_2(h_1)$, $v_2^{(2)} = v_2(h_2)$. На момент времени $t = 3.6$ пс по схеме FR50 были получены следующие результаты: $v_2^{(1)} = 1856.63$ м/с, $v_2^{(2)} = 1849.64$ м/с. В эксперименте [4, с. 304] была получена остаточная скорость ударника $v_{2,\text{exp}} = 1905$ м/с. Относительное отклонение значения $v_2^{(1)}$ от $v_{2,\text{exp}}$ составляет 2.54%. Линейная интерполяционная/экстраполяционная формула имеет следующий вид:

$$v_2(h) = v_2^{(1)} + (h - h_1)(v_2^{(2)} - v_2^{(1)}) / (h_2 - h_1). \quad (23)$$

Если $h \in [h_1, h_2]$, то (23) — формула линейной интерполяции. Если $h \notin [h_1, h_2]$, то (23) — линейная экстраполяционная формула. Мы предполагаем, что симплектическая схема FR50 обеспечивает сходимость численного решения к точному решению уравнений Гамильтона при $h \rightarrow 0$. Зададим $h = 0$ в (23). В результате получаем значение $v_2(0) = 1863.63$ м/с. Относительное отклонение этой величины от экспериментального значения составляет 2.17%.

В начальный момент времени $t = 0$ составляющие v_1^0 , v_3^0 скорости ударника равны нулю. Однако в процессе расчета взаимодействия ударника с преградой указанные составляющие скорости ударника отличны от нуля и их абсолютные значения имеют тенденцию возрастать с увеличением времени t . Имеются два источника погрешностей, которые влияют на размеры погрешностей в $|v_1^n|$, $|v_3^n|$. Одним из источников являются погрешности в константах, входящих в ЕАМ-потенциалы. В [27] было показано, что эти погрешности могут приводить к нефизическим эффектам при практическом применении таких ЕАМ-потенциалов. Вторым источником погрешностей в значениях величин $|v_1^n|$, $|v_3^n|$ являются погрешности аппроксимации применяемого симплектического интегратора. Метод Верле имеет погрешность $O(h^2)$, а метод FR50 — погрешность $O(h^4)$. Поэтому можно ожидать, что погрешности в $|v_1^n|$, $|v_3^n|$ будут больше в случае метода Верле. На рис. 5 значения составляющих скорости ударника даны в м/с. Они были получены при расчете по методу FR50 с шагом $h = 0.001$. Максимальное значение обеих компонент равно примерно 2, что составляет 0.1% от остаточной скорости ударника, полученной в эксперименте.

Полная энергия системы частиц должна сохраняться при $t > 0$. В процессе счета рассматриваемой задачи относительная погрешность δE^n полной энергии системы частиц ударника и преграды вычислялась по формуле: $\delta E^n = (E^n - E^0) / E^0$, где E^0 — полная энергия системы частиц в начальный момент времени $t = 0$, E^n — величина полной энергии в момент времени $t^n = t^{n-1} + h$, $n = 1, 2, \dots$. Величина E^n вычислялась как значение гамильтониана (2) при $t = t^n$. Потенциальная энергия i -й частицы вычислялась по формуле (10). Для получения значения потенциальной энергии V^n всех частиц ударника вычислялась

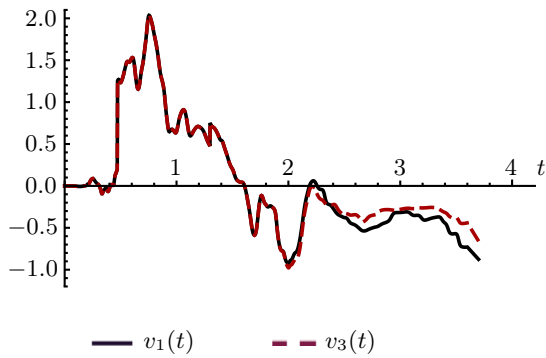


Рис. 5. Составляющие $v_1(t)$ и $v_3(t)$ средней скорости ударника

Fig. 5. The components $v_1(t)$ and $v_3(t)$ of the striker mean velocity

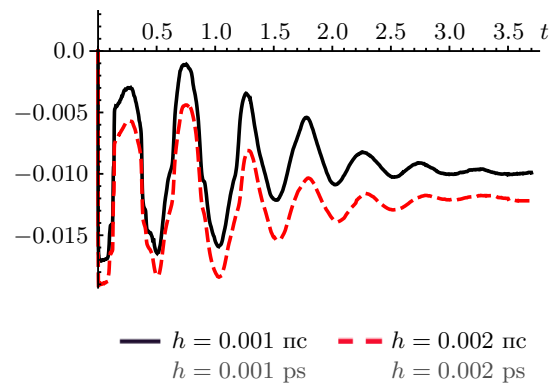


Рис. 6. Схема FR50. Графики относительной погрешности $\delta E^n(t)$

Fig. 6. The FR50 scheme. The graphs of the relative error $\delta E^n(t)$

величина $\sum_{i=1}^{N_{sf}} V_i^n$, где N_{sf} — количество частиц в ударнике. Потенциальная энергия алюминиевого экрана вычислялась аналогично с использованием всех частиц экрана. Кинетическая энергия (3) всех частиц экрана равна нулю в начальный момент времени $t = 0$, так как все частицы пластины находятся в состоянии покоя при $t = 0$. На рис. 6 представлены графики относительной погрешности $\delta E^n(t)$, полученные по схеме FR50 при $h = 0.001$ и $h = 0.002$. При $h = 0.001$ среднеарифметическая относительная погрешность в полной энергии, вычисленная в промежутке $0 \leq t \leq 3.7$, составила менее одного процента.

Обозначим через T_1 и T_2 средние температуры, соответственно, ударника и преграды, вычисленные по методу FR50. Далее, обозначим через T_{Fe} и T_{Al} температуры плавления, соответственно, железа и алюминия: $T_{Fe} = 1811.15$ К и $T_{Al} = 933.5$ К. На рис. 7 приведены графики величин T_1, T_2 в промежутке $0 \leq t \leq 3.7$ пс. На рис. 7b представлен фрагмент рис. 7a в промежутке $0 \leq t \leq 0.1$ пс для того, чтобы показать, что в этом промежутке кривая $T_1(t)$ осциллирующая. Это поведение температуры ударника объясняется в [7, с. 10] флуктуациями температуры. Они имеют порядок $O(1/\sqrt{N_f})$, где N_f — количество степеней свободы, $N_f = 3N - 3$ для системы из N частиц с постоянным суммарным импульсом. При величине N_f порядка $10^2 - 10^3$ статистические отклонения температуры составляют 5–10%. В нашем случае ударник содержит порядка 10^3 частиц, а экран — порядка 10^4 частиц. На рис. 7a видно, что в промежутке $[2.0, 3.7]$ значения функции $T_2(t)$ мало отличаются от температуры плавления алюминия.

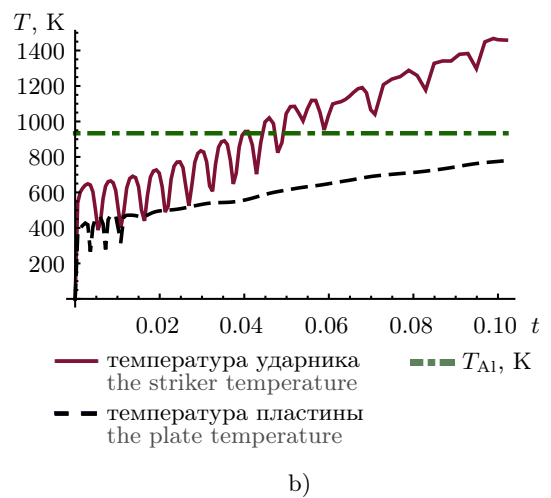
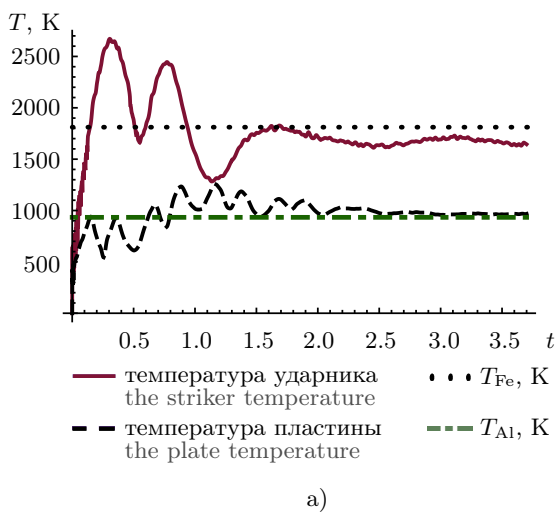


Рис. 7. Средние температуры ударника и преграды: а) в промежутке $0 \leq t \leq 3.7$ пс; б) в промежутке $0 \leq t \leq 0.1$ пс

Fig. 7. The mean temperatures of the striker and obstacle: а) in the interval $0 \leq t \leq 3.7$ ps; б) in the interval $0 \leq t \leq 0.1$ ps

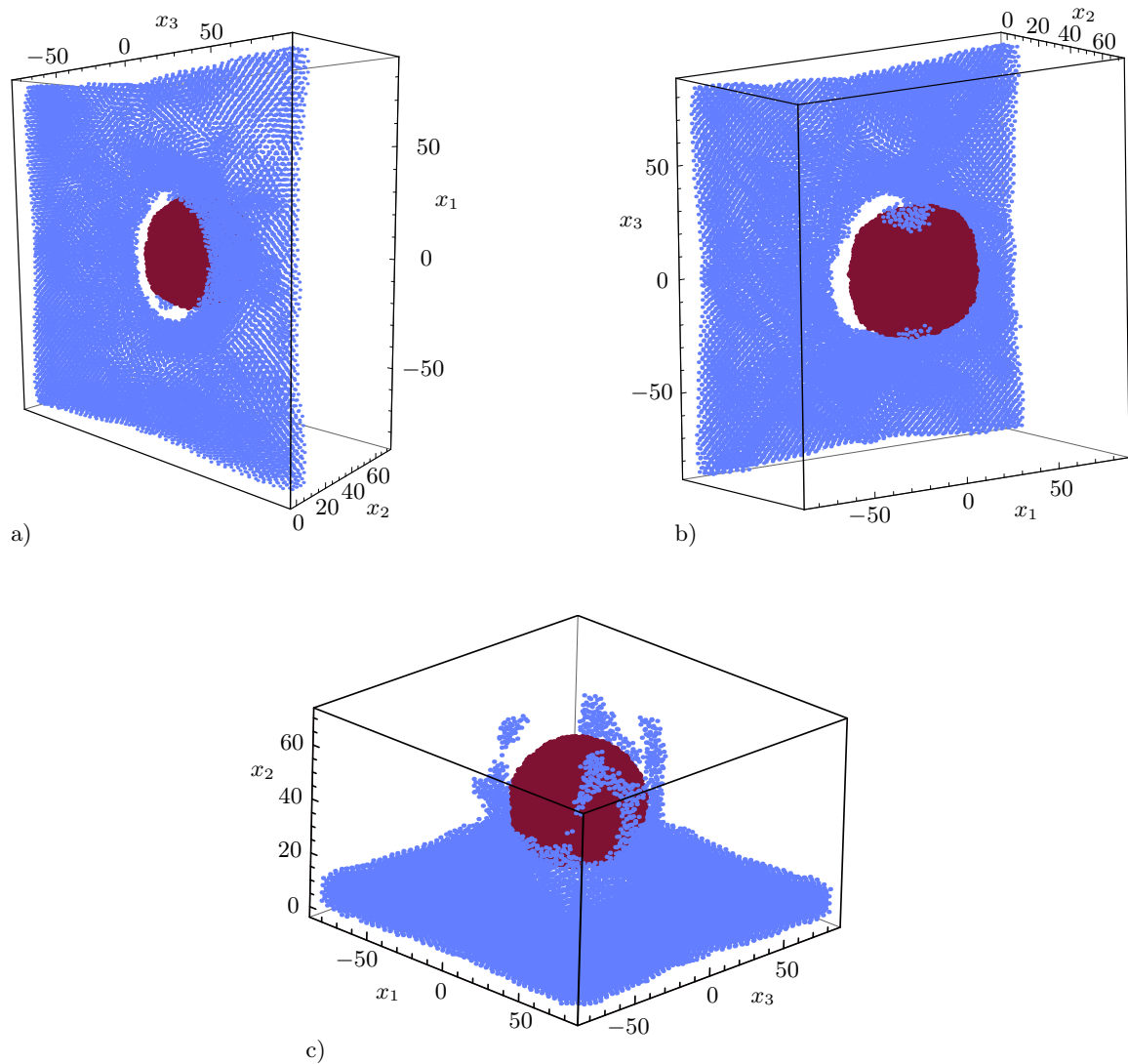


Рис. 8. Система ударник-преграда при $t = 3.7$ пс: а) лицевая сторона пластины; б) вид на ударник и экран из запреградного пространства; в) вид на систему ударник-экран сбоку

Fig. 8. The striker-obstacle system at $t = 3.7$ ps: a) the plate right side; b) the view of the striker and shield from a point in the space behind the shield; c) the view of the striker-shield system from the side

На рис. 8 представлены трехмерные картины системы ударник–экран с трех разных точек зрения. Обращает на себя внимание, прежде всего, рис. 8 в. На нем видно запреградное облако частиц алюминиевого экрана, которые были выбиты ударником. В работе [4] эти частицы называются осколками. Отметим, что среди запреградных осколков нет частиц ударника (это легко определяется по цвету частиц). Это означает, что в процессе пробития мишени ударник сохранил свою целостность. Кроме того, начальная сферическая форма ударника подверглась незначительным изменениям. Этот факт был отмечен также в эксперименте [4, с. 304]: “После пробития экрана ударник слабо деформирован и не разрушен”.

На рис. 9 представлены некоторые результаты расчетов по схемам FR50 и Верле. Видно, что при обоих использованных значениях временного шага h имеет место значительный дрейф полной энергии системы частиц железа и алюминия при использовании схемы Верле. В момент времени $t = 3.7$ пс погрешность $|\delta E^n(t)|$, полученная по схеме Верле, в 6 раз больше погрешности $|\delta E^n(t)|$, полученной по схеме FR50.

Из сравнения рис. 7 а и рис. 10 видно, что различие между средней температурой пластины $T_2(t)$, вычисленной по схеме Верле, и средней температурой $T_2(t)$, вычисленной по схеме FR50, невелико. В то

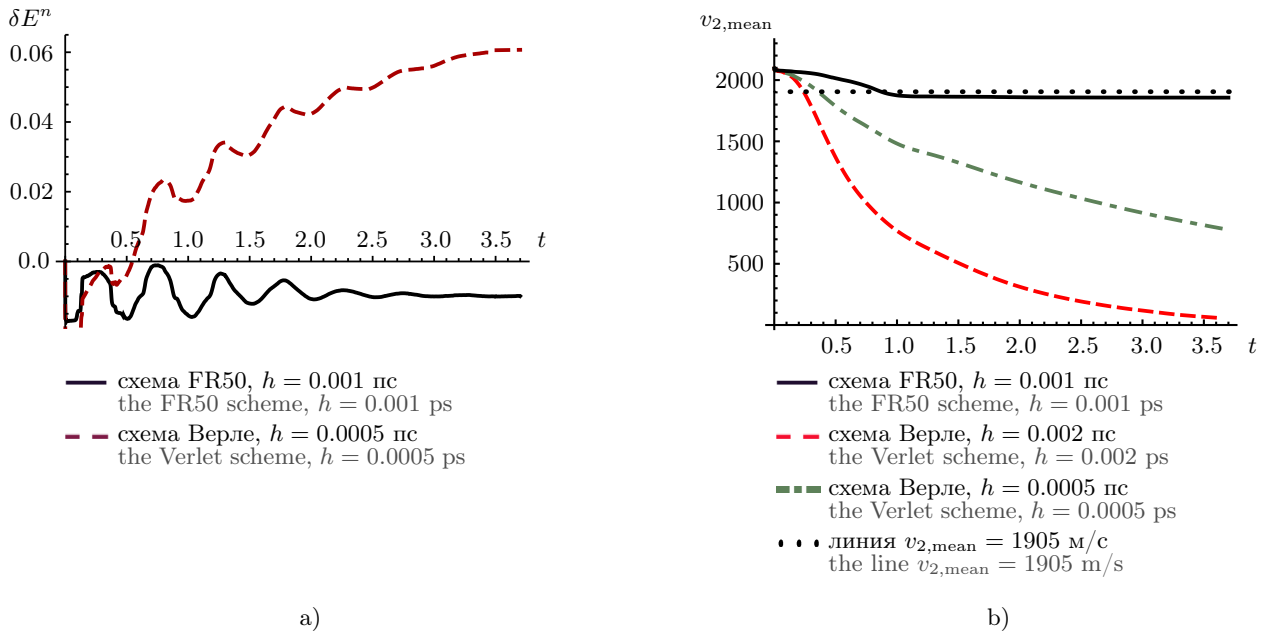


Рис. 9. Результаты расчетов по схемам FR50 и Верле: а) относительная погрешность $\delta E^n(t)$;
 б) средняя скорость железного ударника

Fig. 9. Numerical results obtained by the FR50 and Verlet schemes: а) the relative error $\delta E^n(t)$;
 б) the iron striker mean velocity

же время средняя температура ударника $T_1(t)$, вычисленная по схеме Верле, более заметно отличается от средней температуры $T_1(t)$, вычисленной по схеме FR50.

В работе [25, р. 628] был рекомендован для расчетов по схеме Верле следующий диапазон значений шага h : $0.5 \text{ фс} \leq h \leq 4 \text{ фс}$. Значение $h = 0.5 \cdot 10^{-3} \text{ пс} = 0.5 \text{ фс}$ входит в рекомендованный диапазон. Но в случае конкретной скорости ударника порядка 2 км/с значение шага h слишком большое. Нужны вычислительные эксперименты, чтобы найти для схемы Верле значение h , при котором дрейф энергии будет незначительным. Отметим, что все расчеты и по схеме FR50, и по схеме Верле были выполнены на персональном компьютере, имеющем тактовую частоту в диапазоне [3.6, 4.1] ГГц. На этом компьютере выполнение одного временного шага по схеме FR50 требует $426 \text{ с} \approx 7 \text{ мин}$. По этой схеме было выполнено 3720 временных шагов для того, чтобы достичь момента времени $t = 3.7 \text{ пс}$ с основным шагом $h = 0.001 \text{ пс}$. Таким образом, общие затраты машинного времени составили $26040 \text{ мин} \approx 434 \text{ ч}$.

Расчет одного шага по схеме Верле происходит в 3.8 раз быстрее, чем по схеме FR50. Но при вычислительных экспериментах с целью поиска оптимального шага h , меньшего, чем 0.5 фс, также потребуется значительный расход машинного времени. Решением этой проблемы является применение распараллеливания на параллельной архитектуре, имеющей десятки или сотни процессоров. Распараллеливание не применялось нами при выполнении всех описанных выше расчетов.

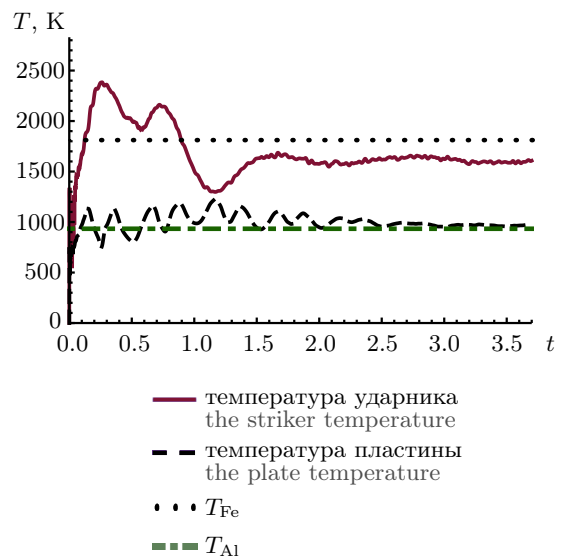


Рис. 10. Схема Верле, $h = 0.0005$ пс. Средние температуры ударника и экрана в промежутке $0 \leq t \leq 3.7 \text{ пс}$

Fig. 10. The mean temperatures of the striker and obstacle in the interval $0 \leq t \leq 3.7 \text{ ps}$

9. Выводы. Численное решение задачи о высокоскоростном соударении наносферического железного ударника с тонким алюминиевым экраном показало применимость МД-метода для решения задач данного класса при условии использования достаточно малого временного шага, гарантирующего отсутствие явления дрейфа полной энергии системы частиц.

Выполнено сравнение остаточной скорости ударника, полученной в расчете МД-методом, с соответствующим параметром, полученным в баллистическом эксперименте. Относительная погрешность расчета указанного параметра в сравнении с экспериментальным значением составила 2.54%. Показана намного более высокая точность вычисления остаточной скорости ударника по симплектической схеме FR50 четвертого порядка точности по сравнению со схемой Верле. При тех временных шагах, которые применялись в расчетах по схеме Верле, имел место значительный дрейф полной энергии.

Расчетом по МД-методу получены как функции времени средняя скорость ударника и средние температуры ударника и алюминиевого экрана. Как и в эксперименте, деформация ударника после пробития им пластины была незначительной.

Практическая осуществимость численного моделирования МД-методом существенно зависит от наличия формул потенциалов межатомного взаимодействия для каждого конкретного материала.

Список литературы

1. Орлов М.Ю., Глазырин В.П., Орлов Ю.Н. Исследование процесса разрушения твердых тел. Итоги работы лаборатории прочности НИИ ПММ ТГУ // IX Всероссийская молодежная научная конференция 'Актуальные проблемы современной механики сплошных сред и небесной механики - 2019', Томск, ноябрь 18–20, 2019. Томск: Изд-во Томского гос. ун-та, 2020. 25–28.
2. Kiselev S.P., Vorozhtsov E.V., Fomin V.M. Foundations of fluid mechanics with applications: problem solving using Mathematica. Boston: Birkhäuser, 1999.
3. Годунов С.К., Киселев 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. Герасимов А.В., Барашков В.Н., Глазырин В.П., и др. Теоретические и экспериментальные исследования высокоскоростного взаимодействия тел. Томск: Изд-во Том. ун-та, 2007.
5. Walters W.P., Zukas J.A. Fundamentals of Shaped Charges. Baltimore: CMC Press, USA, 1989.
6. Кривцов А.М., Кривцова Н.В. Метод частиц и его использование в механике деформируемого твердого тела // Дальневосточный матем. журн. 2002. 3, № 2. 254–276. <https://www.mathnet.ru/rus/dvmg134>. Дата обращения: 21 июня 2026.
7. Агафонов А.Н., Еремин А.В. Метод классической молекулярной динамики в моделировании физико-химических процессов. Самара: Изд-во Самарского ун-та. 2017.
8. Vorozhtsov E.V., Kiselev S.P. Comparative study of the accuracy of higher-order difference schemes for molecular dynamics problems using the computer algebra means // International Workshop on Computer Algebra in Scientific Computing. CASC 2020, Linz, Austria, September 14–18, 2020. Lecture Notes in Computer Science, Vol. 12291, pp. 600–620. Springer, 2020.
9. Ворожцов Е.В., Киселев С.П. Сравнительное исследование точности и устойчивости разностных схем высоких порядков точности для задач молекулярной динамики // Вычислительные методы и программирование. 2021. 22, № 2. 87–109. doi 10.26089/NumMet.v22r207.
10. Vorozhtsov E.V., Kiselev S.P. Optimal four-stage symplectic integrators for molecular dynamics problems // International Workshop on Computer Algebra in Scientific Computing. CASC 2021, Sirius Mathematics Center, Sochi, September 13–17, 2021. Lecture Notes in Computer Science, Vol. 12865, pp. 420–441. Springer, 2021. doi 10.1007/978-3-030-85165-1_24.
11. Vorozhtsov E.V., Kiselev S.P. A general method of finding new symplectic schemes for Hamiltonian mechanics // International Workshop on Computer Algebra in Scientific Computing. CASC 2022, Gebze, Turkey, August 22–26, 2022. Lecture Notes in Computer Science, Vol. 13366, pp. 353–376. Springer, 2022. doi 10.1007/978-3-031-14788-3_20.
12. Vorozhtsov E.V., Kiselev S.P. Higher-order symplectic integration techniques for molecular dynamics problems // J. Comput. Phys. 2022. 452, N 2. Article ID 110905. doi 10.1016/j.jcp.2021.110905.
13. 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, N 8. Article ID 112601. doi 10.1016/j.jcp.2023.112601.



14. *Nyström E.J.* Ueber die numerische Integration von Differentialgleichungen // Acta Soc. Sci. Fenn. 1925. **50**, N 13. 1–54.
15. *Ruth R.D.* A canonical integration technique // IEEE Trans. Nuclear Sci. 1983. **NS-30**, N 4. 2669–2671. doi [10.1109/TNS.1983.4332919](https://doi.org/10.1109/TNS.1983.4332919).
16. *Forest E., Ruth R.D.* Fourth-order symplectic integration // Physica D: Nonlinear Phenomena. 1990. **43**, N 1. 105–117. doi [10.1016/0167-2789\(90\)90019-L](https://doi.org/10.1016/0167-2789(90)90019-L).
17. *Adams W.W., Loustanaou P.* An Introduction to Gröbner Bases. Graduate Studies in Mathematics, vol. 3. Providence: Amer. Math. Soc., 1996.
18. *Cox D., Little J., O’Shea D.* Ideals, varieties, and algorithms. Fifth ed., Switzerland: Springer International Publishing, 2025. doi [10.1007/978-3-031-91841-4](https://doi.org/10.1007/978-3-031-91841-4).
19. *Cox D., Little J., O’Shea D.* Using Algebraic Geometry. N.Y.: Springer, Science+Business media, Inc., 2005.
20. Wolfram Mathematica 10.4.0.0 (2016). <https://gtorrent.cc/programmy/veb-razrabotka-i-programmirovanie/18629-wolfram-mathematica-10400-multi.html>. Cited June 27, 2026.
21. *Ворожцов Е.В.* Новые симплектические пятистадийные схемы для задач молекулярной динамики // Матем. структуры и моделирование. 2024. **4**, № 72. 23–47.
22. *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](https://doi.org/10.1103/physRev.159.98).
23. *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](https://doi.org/10.1103/physreve.61.4587).
24. *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](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2004.12.009).
25. LAMMPS Documentation 31 Mar 2017 version Sandia National Laboratories. <https://www.afs.enea.it/software/lammps/doc17/html/Manual.html>. Cited June 27, 2026.
26. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. Т. 1. Механика. М.: Наука, 1973.
27. *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](https://doi.org/10.26089/NumMet.v25r217).
28. *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](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.33.7983).
29. *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](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.48.22).
30. *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](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.68.024102).
31. *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](https://doi.org/10.1080/10420150108211842).
32. *Baskes M.I., Melius C.F.* Pair potential for fcc metals // Phys. Rev. B. 1979. **20**, N 8. 3197–3204. doi [10.1103/PhysRevB.20.3197](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.20.3197).
33. *West A.R.* Solid state chemistry and its applications. New York: Wiley, 1984.
34. *Анималу А.* Квантовая теория кристаллических твердых тел. М.: Мир, 1981.
35. *Carlsson A.E.* Beyond pair potentials in elemental transition metals and semiconductors // Solid State Phys. 1990. **43**. 1–91.
36. *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](https://doi.org/10.1080/01418618408244210).
37. *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](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.3393).
38. *Griebel M., Knapek S., Zumbusch G.* Numerical simulation in molecular dynamics: numerics, algorithms, parallelization, applications. Berlin: Springer, 2007. doi [10.1007/978-3-540-68095-6](https://doi.org/10.1007/978-3-540-68095-6).
39. *Волегов П.С., Герасимов Р.М., Давлятшин Р.П.* Модели молекулярной динамики: обзор ЕАМ-потенциалов. Часть 1: Потенциалы для однокомпонентных систем // Вестник Пермского национального политехнического университета. Механика. 2017. № 4. 214–237. doi [10.15593/perm.mech/2017.4.14](https://doi.org/10.15593/perm.mech/2017.4.14).
40. *Papancicolaou 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](https://doi.org/10.1016/S0927-0256(00)00028-8).

41. Hairer E., Lubich C., Wanner G. Geometric numerical integration: structure-preserving algorithms for ordinary differential equations. Second ed. Springer Series in Computational Mathematics, vol. 31. Berlin: Springer, 2006. doi 10.1007/3-540-30666-8.
42. Omelyan I.P., Mryglod I.M., Folk R. Optimized Verlet-like algorithms for molecular dynamics simulations // Phys. Rev. E. 2002. **65**. Article Number 056706. doi 10.1103/PhysRevE.65.056706.
43. Blanes S., Moan P. Practical symplectic partitioned Runge–Kutta and Runge–Kutta–Nyström methods // J. Comput. Appl. Math. 2002. **142**. 313–330. doi 10.1016/S0377-0427(01)00492-7.
44. Okunbor D.I., Skeel R.D. Canonical Runge–Kutta–Nyström methods of orders five and six // J. Comput. Appl. Math. 1994. **51**, N 3. 375–382. [https://doi.org/10.1016/0377-0427\(92\)00119-T](https://doi.org/10.1016/0377-0427(92)00119-T). Cited June 27, 2026.
45. Blanes S., Casas F. A Concise introduction to geometric numerical integration. Boca Raton: CRC Press, 2016.
46. Киселев С.П. Метод молекулярной динамики в механике деформированного твердого тела // Прикл. мех. техн. физ. 2014. **55**, № 3. 113–139.
47. Брагин М.Д., Иванов А.В. Локально-адаптивный выбор шага интегрирования в задачах молекулярной динамики. Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша. № 62. Москва: Изд-во ИПМ им. М.В. Келдыша, 2013. <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2013-62>. Cited June 27, 2024.
48. Leimkuhler B., Reich S. Simulating Hamiltonian dynamics. (Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics, Series Number 14). Cambridge: Cambridge University Press, 2004.

Получена
8 мая 2026 г.

Принята
25 мая 2026 г.

Опубликована
7 июля 2026 г.

Информация об авторе

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

References

1. M. Yu. Orlov, V. P. Glazyrin, and Yu. N. Orlov, “Investigation of the Rupture Process of Solid Bodies. Summary of the Work of the Strength Laboratory of the Research Institute of the Applied Mathematics and Mechanics of the Tomsk State University,” in *IX All-Russian Youth Scientific Conference 'Current issues of Continuum Mechanics and Celestial Mechanics - 2019'*. Tomsk, November 18–20, 2019 (Tomsk State University Press, Tomsk, 2020), pp. 25–28. [in Russian].
2. S. P. Kiselev, E. V. Vorozhtsov, and V. M. Fomin, *Foundations of Fluid Mechanics with Applications: Problem Solving Using Mathematica* (Birkhäuser, Boston, 1999).
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’ut. Issled., Moscow–Izhevsk, 2014) [in Russian].
4. 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].
5. W. P. Walters and J. A. Zukas, *Fundamentals of Shaped Charges* (CMC Press, Baltimore, USA, 1989).
6. A. M. Krivtsov and N. V. Krivtsova, “Method of particles and its application to mechanics of solids,” *Far-Eastern Math. J.* **3** (2), 254–276 (2002) [in Russian].
7. A. N. Agafonov and A. V. Eremin, *The Method of the Classical Molecular Dynamics in the Modeling of Physical and Chemical Processes* (Samara University Press, Samara, 2017) [in Russian].
8. E. V. Vorozhtsov and S. P. Kiselev, “Comparative Study of the Accuracy of Higher-Order Difference Schemes for Molecular Dynamics Problems Using the Computer Algebra Means,” in *International Workshop on Computer Algebra in Scientific Computing. CASC 2020, Linz, Austria, September 14–18, 2020 Lecture Notes in Computer Science, Vol. 12291* (Springer, 2020), pp. 600–620.
9. E. V. Vorozhtsov and S. P. Kiselev, “Comparative Study of the Accuracy and Stability of Higher-Order Difference Schemes for Molecular Dynamics Problems,” *Vychisl. Metody Program. (Numerical Methods and Programming)* **22** (2), 87–109 (2021). doi 10.26089/NumMet.v22r207.
10. E. V. Vorozhtsov and S. P. Kiselev, “Optimal Four-Stage Symplectic Integrators for Molecular Dynamics Problems,” in *International Workshop on Computer Algebra in Scientific Computing. CASC 2021, Sirius Mathematics Center, Sochi, September 13–17, 2021 Lecture Notes in Computer Science, Vol. 12865* (Springer, 2021), pp. 420–441. doi 10.1007/978-3-030-85165-1_24.



11. E. V. Vorozhtsov and S. P. Kiselev, “A General Method of Finding New Symplectic Schemes for Hamiltonian Mechanics,” in *International Workshop on Computer Algebra in Scientific Computing. CASC 2022, Gebze, Turkey, August 22–26, 2022 Lecture Notes in Computer Science, Vol. 13366* (Springer, 2022), pp. 353–376. doi [10.1007/978-3-031-14788-3_20](https://doi.org/10.1007/978-3-031-14788-3_20).
12. E. V. Vorozhtsov and S. P. Kiselev, “Higher-Order Symplectic Integration Techniques for Molecular Dynamics Problems,” *J. Comput. Phys.* **452** (2), Article ID 110905 (2022). doi [10.1016/j.jcp.2021.110905](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2021.110905).
13. 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** (8), Article ID 112601 (2024). doi [10.1016/j.jcp.2023.112601](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2023.112601).
14. E. J. Nyström, “Ueber die numerische Integration von Differentialgleichungen,” *Acta Soc. Sci. Fenn.* **50** (13), 1–54 (1925).
15. R. D. Ruth, “A Canonical Integration Technique,” *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **NS-30** (4), 2669–2671 (1983). doi [10.1109/TNS.1983.4332919](https://doi.org/10.1109/TNS.1983.4332919).
16. E. Forest and R. D. Ruth, “Fourth-Order Symplectic Integration,” *Physica D: Nonlinear Phenomena* **43** (1), 105–117 (1990). doi [10.1016/0167-2789\(90\)90019-L](https://doi.org/10.1016/0167-2789(90)90019-L).
17. W. W. Adams and P. Loustaunau, *An Introduction to Gröbner Bases (Graduate Studies in Mathematics. Vol. 3)* (Amer. Math. Soc., Providence, 1996).
18. D. Cox, J. Little, and D. O’Shea, *Ideals, Varieties, and Algorithms. Fifth ed.* (Springer International Publishing, Switzerland, 2025). doi [10.1007/978-3-031-91841-4](https://doi.org/10.1007/978-3-031-91841-4).
19. D. Cox, J. Little, and D. O’Shea, *Using Algebraic Geometry* (Springer, Science+Business media, N.Y., 2005).
20. Wolfram Mathematica 10.4.0.0 (2016). <https://gtorrent.cc/programmy/veb-razrabotka-i-programmirovanie/18629-wolfram-mathematica-10400-multi.html>. Cited June 27, 2026.
21. E. V. Vorozhtsov, “New Symplectic Five-Stage Schemes for Molecular Dynamics Problems,” *Math. Structures and Modeling* **4** (72), 23–47 (2024) [in Russian].
22. 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](https://doi.org/10.1103/PhysRev.159.98).
23. 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).
24. 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).
25. LAMMPS Documentation 31 Mar 2017 version Sandia National Laboratories. <https://www.afs.enea.it/software/lammps/doc17/html/Manual.html>. Cited June 27, 2026.
26. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Course of Theoretical Physics Vol. 1: Mechanics* (Nauka, Moscow, 1973; Pergamon, Oxford, 1977).
27. 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,” *Vychisl. Metody Program. (Numerical Methods and Programming)* **25** (2), 214–237 (2024). doi [10.26089/NumMet.v25r217](https://doi.org/10.26089/NumMet.v25r217).
28. 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](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.33.7983).
29. 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](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.48.22).
30. 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](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.68.024102).
31. 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](https://doi.org/10.1080/10420150108211842).
32. M. I. Baskes and C. F. Melius, “Pair potentials for fcc metals,” *Phys. Rev. B* **20** (8), 3197–3204 (1979). doi [10.1103/PhysRevB.20.3197](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.20.3197).
33. A. R. West, *Solid State Chemistry and Its Applications* (Wiley, New York, 1984).
34. A. O. E. Animalu, *Intermediate Quantum Theory of Crystalline Solids* (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1977; Mir, Moscow, 1981).
35. A. E. Carlsson, “Beyond Pair Potentials in Elemental Transition Metals and Semiconductors,” *Solid State Phys.* **43**, 1–91 (1990).
36. 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).

37. 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).
38. M. Griebel, S. Knapek, and G. Zumbusch, *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).
39. P. S. Volegov, R. M. Gerasimov, and R. P. Davlyatshin, “Models of molecular dynamics: a review of EAM potentials. Part 1: Potentials for one-component systems,” Digest of the Perm National Polytechnic University. Mechanics. N 4, 214–237 (2017). doi [10.15593/perm.mech/2017.4.14](https://doi.org/10.15593/perm.mech/2017.4.14) [in Russian].
40. 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](https://doi.org/10.1016/S0927-0256(00)00028-8).
41. E. Hairer, C. Lubich, and G. Wanner, *Geometric Numerical Integration: Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations Springer Series in Computational Mathematics, vol. 31* (Springer, Berlin, 2006). doi [10.1007/3-540-30666-8](https://doi.org/10.1007/3-540-30666-8).
42. I. P. Omelyan, I. M. Mryglod, and R. Folk, “Optimized Verlet-like algorithms for molecular dynamics simulations,” *Phys. Rev. E* **65**, Article Number 056706 (2002). doi [10.1103/PhysRevE.65.056706](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.65.056706).
43. S. Blanes and P. Moan, “Practical symplectic partitioned Runge–Kutta and Runge–Kutta–Nyström methods,” *J. Comput. Appl. Math.* **142**, 313–330 (2002). doi [10.1016/S0377-0427\(01\)00492-7](https://doi.org/10.1016/S0377-0427(01)00492-7).
44. D. I. Okunbor and R. D. Skeel, “Canonical Runge–Kutta–Nyström methods of orders five and six,” *J. Comput. Appl. Math.* **51** (3), 375–382 (1994). doi [10.1016/0377-0427\(92\)00119-T](https://doi.org/10.1016/0377-0427(92)00119-T). Cited June 27, 2026.
45. S. Blanes and F. Casas, *A Concise Introduction to Geometric Numerical Integration* (CRC Press, Boca Raton, 2016).
46. S. P. Kiselev, “Method of molecular dynamics in mechanics of deformable solids,” *Zh. Prikl. Mekh. Tekh. Fiz.* 2014. **55** (3), 113–139. [*J. Appl. Mech. Tech. Phys.* **55** (3), 470–493 (2014)]. doi [10.1134/S0021894414030109](https://doi.org/10.1134/S0021894414030109).
47. M. D. Bragin and A. V. Ivanov, *Locally Adaptive Choice of the Integration Step in Molecular Dynamics Problems. Preprint No 62* (M.V. Keldysh Institute of Applied Mathematics, Moscow, 2013) [in Russian]. <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2013-62>. Cited June 27, 2024.
48. B. Leimkuhler and S. Reich, *Simulating Hamiltonian Dynamics (Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics, Series Number 14)* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2004).

Received
May 8, 2026

Accepted
May 25, 2026

Published
July 7, 2026

Information about the author

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