

**Погрешности конечно-разностной аппроксимации в молекулярной динамике:
их влияние на силы, действующие на атомы**

Е.С. Длиннова¹, В.В. Стегайлов^{1,2,3}

¹Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

²Московский физико-технический институт (ГУ)

³Объединённый институт высоких температур РАН

Метод классической молекулярной динамики (МД) широко используется в различных приложениях и зарекомендовал себя как мощный вычислительный алгоритм, который имеет предсказательную силу и согласуется с экспериментальными расчетами.

Тем не менее, как и любой численный метод, он предполагает некоторые неточности и погрешности. Закон сохранения энергии выполняется только в среднем: по факту же полная энергия системы флуктуирует. Более того, вы не можете найти точное решение уравнений движения Ньютона (задача Коши) для системы с количеством частиц $N > 3$. Кроме того, имеет место явление экспоненциальной неустойчивости траекторий. При этом траектории частиц, рассчитанные с заданными начальными условиями, но с разными шагами численного интегрирования, не соответствуют одной ньютоновской динамической траектории. Траектории экспоненциально разбегаются друг от друга. Оказывается, что метод, который был предназначен для решения задачи Коши, приводит к пучку экспоненциально разбегающихся траекторий.

В работах [1-3] авторы проанализировали взаимосвязь между динамическими и стохастическими свойствами молекулярно-динамических траекторий, которые обусловлены Ляпуновской неустойчивостью уравнений Ньютона, конечно-разностными погрешностями и ошибками округления в численном интегрировании. Также было введено понятие динамической памяти.

Мы рассмотрели модифицированное уравнение Ньютона, которое строго соответствует молекулярно-динамической траектории. Таким образом, мы определили погрешности в расчете межатомных сил $\delta F_i(t)$ которые возникают в связи с конечно-разностной аппроксимацией. Предложена схема для определения этих силовых компонент в МД-расчете с использованием пакета LAMMPS. Мы проанализировали распределение этих силовых компонент для модели жидкости с Леннард-Джонсовким потенциалом, варьируя временной шаг численного интегрирования. В результате обнаружили, что эти компоненты силы имеют распределение, которое сильно отличается от нормального распределения.

Литература

1. Валуев А.А., Норман Г.Э., Подлипчук В.Ю. Метод молекулярной динамики: теория и приложения // Математическое моделирование: Физико-химические свойства вещества. – М., 1989.
2. Норман Г.Э., Стегайлов В.В. Стохастические свойства молекулярно-динамической леннард-джонсовской системы в равновесном и неравновесном состояниях // ЖЭТФ. – 2001. – Т. 119.
3. Норман Г.Э., Стегайлов В.В. Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики, Матем. моделирование, 2012, том 24, номер 6, 3–44.