

УДК 534.22:546.3

Н. С. БЕКТУРГАНОВ, Т. СУЛЕЙМЕНОВ, Ж. Н. АТАМБАЕВ,  
Л. Ж. КАСЫМОВА, Г. С. ШАИХОВА, М. УТЕШОВА

## О ВЗАИМНЫХ СООТНОШЕНИЯХ МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ И МЕТОДА НЕПРЕРЫВНЫХ ДРОБЕЙ

Приведен сравнительный анализ метода Монте-Карло и Метода молекулярной динамики с точки зрения аппарата непрерывных дробей для теории расплавленного состояния.

Ранее было указано, что структурный фактор определяется корреляционной функцией плотность – плотность.

Запишем в явном виде эти функции

$$S(\kappa) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i \sum_j \exp[i\kappa(R_i - R_j)] \right\rangle.$$

Если принять  $R_{ij} = R_i - R_j$ , а углом между  $R_{ij}$  и  $\kappa$  является  $\theta$ , то получим выражение

$$S(\kappa) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i \sum_j \exp(i\kappa R_{ij} \cos \theta) \right\rangle \quad (1)$$

считая расплав изотропной, примем что все направления  $R_{ij}$  эквивалентны и приведем усреднено выражение (1)

$$\begin{aligned} & \langle \exp(i\kappa R_{ij} \cos \theta) \rangle_{R_{ij}} = \\ & = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \exp(i\kappa R_{ij} \cos \theta) d\theta = \frac{\sin(\kappa R_{ij})}{\kappa R_{ij}}. \end{aligned} \quad (2)$$

Подставляя (1) в (2), получим формулу для компьютерного расчета структурного фактора, т.е.

$$S(\kappa) = \frac{1}{N} \left\langle \frac{\sin(\kappa R_{ij})}{\kappa R_{ij}} \right\rangle. \quad (3)$$

С учетом симметричности функции  $\frac{\sin(\kappa R_{ij})}{\kappa R_{ij}}$  по отношению индексов  $i, j$  окончательно получим формулу для структурного фактора

$$S(\kappa) = 1 + \frac{2}{N} \left\langle \frac{\sin(\kappa R_{ij})}{\kappa R_{ij}} \right\rangle.$$

В машинном эксперименте допустимое значение  $\kappa$  обратно пропорционально длине базовой ячейки и расчеты, выполненные для меньших  $\kappa$ ,

физического смысла не имеют. Структурный фактор Фурье является - образом функции радиального распределения  $g(R)$  а это дает произвести контрольный расчет. Функция распределена  $g(R)$  вычисляется следующим образом. Пусть  $g(R)$  будет плотностью вероятности и обнаружит некоторую частицу на расстоянии  $R$  от другой в сферическом слое расплава. Тогда, принимая одну из этих частиц как центр сферы запишем

$$dW(R) = g(r) \frac{4\pi}{3} \frac{R^2 dR}{\Omega}.$$

Тогда по значению  $dW(R)$  может установить число частиц  $\Delta N(R)$ , находящихся в сферическом слое радиусом от  $R$  до  $R+dR$  от выбранной за центр, которое связано с  $g(R)$  выражением

$$\Delta N(R) = Ng(R) \frac{4\pi R^2 dR}{\Omega}.$$

Величиной, рассчитываемой в машинном эксперименте, является массив пар частиц  $G_k(R)$ , находящихся на расстоянии  $\kappa$  друг от друга, при этом

$$G_k(R) = G_k(R) + Z$$

номер ячейки  $\kappa$  определяется условием [1]

$$\kappa = \text{entier}\left(\frac{R_{ij}}{\Delta R}\right) + 1$$

выбор  $\Delta R$  определяется плотностью к получающейся  $g(R)$ .

Промежуточная функция рассеяния  $F(\kappa, t)$  вычисляется следующим образом. В общем случае функцию  $F(\kappa, t)$  представим

$$F^*(r, t) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i \sum_j \frac{\sin \kappa R_{ij}(t)}{\kappa R_{ij}(t)} \right\rangle,$$

где  $R_{ij}(t) = R_i(0) - R_j(t)$ .

Заметим, что когда  $i=j$  то он соответствует когорентному рассеянию, а  $i \neq j$  – не когорентному рассеянию.

Здесь же нам необходимо произвести сравнительный анализ метода молекулярной динамики и метода Монте-Карло. Установлено, что динамические функции в методе Монте-Карло могут быть несчитаны только с привлечением дополнительных приближений. Одним из приближений является метод непрерывных дробей [2], применяемых к уравнениям математической физики.

В данном случае функция когерентного рассения  $S(\kappa, \omega)$  может быть найдена как предел реальной части функции  $G(\kappa, z)$ :

$$S(\kappa, \omega) = \operatorname{Re} \lim_{z \rightarrow -i\omega} G_0(\kappa, z),$$

функция  $G(\kappa, z)$  - представляет собой преобразование Лапласа функции  $F(\kappa, t)$ , тогда

$$G_0(\kappa, z) = \int \exp(-ztF_0(\kappa, t)).$$

Расчет спектральной функции  $S(\kappa, \omega)$  может быть проведен решением цепочки обобщенных уравнений Ланжевена, полученных с помощью проекционного оператора. Цепочка уравнения для  $F(\kappa, t)$  выглядит следующим образом

$$\frac{\partial}{ds} F_j(\kappa, t) = - \int_0^t ds \frac{F_{j+1}(\kappa, t-s)}{F_j(\kappa, 0)} F_j(\kappa, s).$$

Для преобразования Лапласа функции  $F_j$  имеется цепочка уравнений

$$G_j(z, \kappa) = \frac{F_j(\kappa, 0)}{z + [G_{j+1}(\kappa, z)/F_j(\kappa, 0)]}. \quad (4)$$

Продолжая эту цепочку, можно получить непрерывную дробь [2]

$$G_0(z) = \frac{F_0}{z + \frac{F_1/F_0}{z + \frac{F_2/F}{z + \dots}}}.$$

При этом  $F_0$  - представляет собой статистический структурный фактор.

В данном случае выражение  $R_3 = \frac{R\kappa}{\kappa}$  представляет собой компоненту вектора  $R$  в направлении вектора  $\kappa$ ;  $n$  - плотность;  $V(R)$  - парный потенциал взаимодействия.

Коэффициенты  $F_2$  и  $F_3$  вычисляются с помощью интеграла

$$I_1 = \left\langle f(R)h(R')g_3(R, R')d^3R d^3R' \right\rangle$$

методом Монте-Карло. Здесь функция  $f(R)$  и  $h(R')$  - производные потенциала,  $g_3(R, R')$  - трехчастичная корреляционная функция. Явное выражение для  $I_1$  выглядит

$$\begin{aligned} I_1 &= \\ &= \left\langle \int f(R)h(R') \frac{1}{N^2} \sum_{i < j < k} \delta(R - R_{ij}) \delta(R - R_{ik}) dR dR' \right\rangle = \\ &= \left\langle \frac{1}{N^2} \sum_{i < j} f(R_{ij}) h(R_{ik}) \right\rangle = \\ &= \left\langle \frac{1}{N^2} \left( \sum_{i < j} f(R_{ij}) * \left( \sum_{i < j} h(R_{ik}) \right) - \frac{1}{N} \sum_{i < j} f(R_{ij}) h(R_{ik}) \right) \right\rangle \end{aligned}$$

и заменяется суммой

$$I = \left\langle \sum_{i < j} f(R_{ij}) \right\rangle,$$

но при этом корреляционная функция  $g(R)$  должна иметь вид  $\delta$ -функции, т.е.

$$g(R) = \left\langle \sum_{i < j} \delta(R - R_{ij}) \right\rangle.$$

Как показано в работе [3],  $G_3(z)$  является постоянной, по  $z$  и объясняется это тем, что она просто представляет собой функцию памяти, являющейся ядром одного из обобщенных уравнений Ланжевена. Эта функция может быть описана при  $z=0$ , поскольку  $F_3(t)$  в области рассматриваемых  $\kappa$  локализована при  $t=0$ . В рамках теории псевдопотенциала и метода Монте - Карло может быть осуществлен расчет коэффициента  $F_3$ . Что касается функции  $G_4(z)$ , то следуя авторам работ [3], ее можно считать константой или

$$G_4(z) = \alpha.$$

Это эквивалентно экспоненциальному убыванию функции  $F_3(t)$ :

$$F_3(t) = F_3 \exp\left(-\frac{\alpha t}{F_3}\right).$$

На основании вышеприведенных рассуждений для динамического структурного фактора можно записать следующую формулу:

$$\begin{aligned} S(r, \omega) &= \alpha \left\{ [\omega^4 - \omega^2 \left( \frac{F_3}{F_2} + \frac{F_2}{F_1} + \frac{F_1}{F_0} \right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{F_1 F_3}{F_0 F_2}]^2 + \left[ \frac{\omega^3 \alpha}{F_3} - \frac{\omega \alpha}{F_3} \left( \frac{F_2}{F_1} + \frac{F_1}{F_0} \right) \right]^2 \right\}^{-1}. \end{aligned}$$

Для оценки  $\alpha$  применяется выражение

$$G_4(0) = \left(\frac{F_3}{F_2}\right)^2 G_2(0).$$

Это представляет результат уравнения (4) и оценки интеграла

$$G_2(0) = \int_0^{\infty} F_2(t) dt. \quad (5)$$

Функция  $F_2$  приближенно может быть представлена параболой

$$F_2(t) \approx F_2 + \frac{1}{2} F_3 t^2$$

при этом коэффициенты  $F_2$  и  $F_3$  уже известны. После интегрирования (5) получается окончательный результат

$$\frac{\alpha}{F_3} = \frac{G_4(0)}{F_3} = 0,944 \left(\frac{F_3}{F_2}\right)^{1/2}.$$

Заключая, следует подчеркнуть, что достоинством непрерывных дробей является решение задачи статических корреляционных функций и

проверка корректности результатов метода молекулярной динамики.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Фишер И.З., Прохоренко В.К. О флюктуационных координационных числах в растворах. Труды Совещания. М.: Изд-во АН СССР, 1960. С. 142-147.
2. Арфкен Г. Математические методы в физике. М.: Атомиздат, 1970. С. 712.
3. Прохоренко В.К., Фишер И.З. Микроструктура простых жидкостей // ЖФХ. 1959. Т. 33, №8. С. 1852-1858.

## Резюме

Балқыған күйлердің теориясындағы қолданылатын Монте-Карло және молекулалық динамика әдістері үздіксіз бөлшектер аппараты арқылы салыстырмалы талданған.

## Summary

The comparative analysis of a Monte-Carlo method and Method of molecular dynamics is adduced from the point of view of the vehicle of continuous fractions for the theory of molten condition.

Поступила 10.06.08г.