

всех остальных собственных чисел.

3. Находим коэффициенты полинома $p(x) = x^m (\alpha_0 + \alpha_1 x + \dots + \alpha_{m-1} x^{m-1})$,

где [2]

$$\frac{1}{\lambda_i} = p(\lambda_i),$$

$$-\frac{1}{\lambda_i^2} = p'(\lambda_i),$$

$$\dots\dots\dots$$

$$\frac{(-1)^{m-1} (m-1)!}{\lambda_i^m} = p^{(m-1)}(\lambda_i)$$

4. Находим $A^0 = p(A)$.

Приведены оценки быстродействия и точности предложенных методов.

Литература. 1. Dai L. Singular Control Systems. Lecture Notes in Control and information Sciences, Vol.118.- Berlin, Springer-Verlag, 1989. 2. Campbell S.L. Generalized inverses of linear transformations. Belmont. California 1979. 3. Асмыкович О.И., Крахотко В.В. О стабилизации линейных регулярных дескрипторных систем с запаздыванием // *Мат. V Респ. науч. конф. студ. и асп.* 18-20 марта 2002 г. Гомель, 2002, с. 153-154. 4. Крахотко В.В., Размыслович Г.М. Линейные системы с запаздыванием, неразрешенные относительно старшей производной // *Актуальные задачи теории динамических систем управления.* - Мн.1989, с.51-59.

МОДЕЛИРОВАНИЕ РОСТА КЛАСТЕРОВ МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Белко А.В., ГрГУ, г.Гродно

Фрактальные кластеры являются основным структурообразующим элементом целого ряда макроскопических систем, возникающих в результате протекания физико-химических процессов и явлений. Моделирование фрактальных кластеров является одним из способов изучения таких макроскопических систем [1-3]. Выбрав потенциал межатомного взаимодействия, можно, казалось бы, приступить к моделированию образования кластеров. Однако сразу же возникает проблема: каким численным методом решать уравнения движения? В традиционной молекулярной динамике движение системы из N частиц описывают уравнениями Ньютона:

$$m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = F_i \quad (1)$$

где $i=1, 2, \dots, N$, m_i , r_i – соответственно масса и координата i -й частицы, F_i – действующая на нее сила, которая включает в себя силу внешнего поля и силы взаимодействия между i -й и остальными частицами. Каждую силу взаимодействия находят как градиент выбранного потенциала взаимодействия.

Чтобы использовать ЭВМ, исходные уравнения движения заменяют системой $2N$ уравнений первого порядка:

$$\begin{aligned} \frac{dr_i(t)}{dt} &= v_i(t) \\ \frac{dv_i(t)}{dt} &= \frac{1}{m_i} F_i(r_1(t), \dots, r_N(t)) \end{aligned} \quad (2)$$

которые обычно записываются в декартовых координатах для каждой проекции скорости и радиус-вектора.

Существует множество способов численного интегрирования уравнений движения (2) [4]. Например, если ограничиться первым членом ряда Тейлора, то:

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= x_k + \Delta t v_k \\ v_{k+1} &= v_k + \frac{\Delta t}{m} F_k \end{aligned} \quad (3)$$

Этот метод называется методом Эйлера первого порядка точности. Здесь новое состояние вычисляют явным образом по известным значениям на предыдущем шаге. Добавив члены второго порядка точности приходим к уравнениям:

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= x_k + \Delta t v_k + \frac{(\Delta t)^2}{4m} (F_k + F_{k+1}) \\ v_{k+1} &= v_k + \frac{\Delta t}{m} (F_k + F_{k+1}) \end{aligned} \quad (4)$$

Эту систему можно решить методом последовательных приближений. Такой метод называется уточненным методом Эйлера с итерациями. Поскольку с ростом числа итераций их эффективность быстро падает, то обычно не делают более трех итераций. В принципе лучше уменьшить шаг интегрирования, чем проводить многократные корректирующие вычисления.

В обычном методе Эйлера, интерполируя вперед, используют нисходящие

разности $v_{k+1} - v_k = \frac{\Delta t}{m} F_k$. Если из точки k интерполировать назад и взять восходящие разности, то $v_k - v_{k+1} = \frac{\Delta t}{m} F_k$. Суммируя нисходящие разности с восходящими, мы получим центральные разности на двойном шаге:

$$\begin{aligned} v_{k+1} &= v_{k-1} + \frac{2\Delta t}{m} F_k \\ x_{k+2} &= x_k + 2\Delta t v_{k-1} + \frac{4(\Delta t)^2}{m} F_k \end{aligned} \quad (5)$$

В математике этот метод второго порядка точности называют уточненным методом Эйлера с двойным шагом, методом с перешагиванием или методом центральных разностей.

Ввиду низкой точности метод Эйлера первого порядка не целесообразно применять при моделировании образования кластеров. Метод Эйлера с двойным шагом лежит в основе большинства алгоритмов молекулярной динамики.

Метод Эйлера с итерациями физики обычно называют методом средней силы. Чтобы найти первое приближение в методе средней силы, требуется почти вдвое больше вычислений, чем в методе центральных разностей. Однако метод средней силы дает меньшие погрешности и более устойчив. Кроме того, в методе средней силы и координаты, и скорости относятся к одному и тому же моменту времени и потому их легко корректировать. Описанные выше методы позволяют моделировать образование кластеров в очень узком временном интервале. Для того чтобы расширить временной интервал образования кластера можно применить алгоритм Верле в скоростной форме [5]:

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= x_k + \Delta t v_k + \frac{(\Delta t)^2}{2m} F_k \\ v_{k+1} &= v_k + \frac{\Delta t}{2m} (F_k + F_{k+1}) \end{aligned} \quad (6)$$

Время образования фрактальных кластеров в газовой фазе порядка $\sim 10^{-2}$ [6]. На основе проведенных экспериментов по образованию кластеров установлено, что моделирование образования кластеров методом Верле в скоростной форме позволяет увеличить временной интервал на два порядка в сравнении с

выше перечисленными методами.

Литература. 1. Белашенко Д.К. Компьютерное моделирование некристаллических веществ методом молекулярной динамики // Соросовский образовательный журнал. 2001. Т.7. № 8. С.44–51. 2. Фракталы в физике. 6 Международный симпозиум по фракт. в физике / Под ред. Пьетронеро. – М.: МИР, 1988. – 670 с. 3. Белко А.В., Никитин А.В. Методы построения объектов с фрактальной структурой. // Вестник ГрГУ. Серия 2. -2002. - №2. – С.52-56. 4. Мелькер А.И. Моделирование эксперимента. – М.: Знание. –1991. – 64 с. 5. Гульд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике: В 2-х ч. Ч.2: - М.: МИР, 1990. - 380 с. 6. Смирнов Б.М. Энергетические процессы в макроскопических фрактальных структурах // Успехи физических наук: – 1991. – Т.161. – вып.2. – С.171–200.

ИССЛЕДОВАНИЕ СКОРОСТИ СХОДИМОСТИ ПЕРВОГО МОМЕНТА ОЦЕНКИ СПЕКТРАЛЬНОЙ ПЛОТНОСТИ

Василенко Ж. В., БГУ, Минск

Рассмотрим действительный стационарный в широком смысле случайный процесс $X(t)$, $t \in \mathbb{Z}$, с математическим ожиданием $m = MX(t) = 0$, ковариационной функцией $R(\tau) = MX(t+\tau)X(t)$, $\tau \in \mathbb{Z}$, и спектральной плотностью

$$f(\lambda) = \frac{1}{2\pi} \sum_{\tau=-\infty}^{+\infty} R(\tau) e^{-i\lambda\tau}, \quad \lambda \in \Pi = [-\pi, \pi].$$

Пусть $X(0), X(1), \dots, X(T-1)$ – T последовательных, полученных через равные промежутки времени наблюдений за процессом $X(t)$, $t \in \mathbb{Z}$. В качестве оценки спектральной плотности рассмотрим статистику вида:

$$I_T(\lambda) = |d_T(\lambda)|^2, \quad (1)$$

где

$$d_T(\lambda) = \frac{1}{2\pi \sum_{t=0}^{T-1} h_t^2} \Delta_T(\lambda) \overline{\Delta_T(\lambda)},$$

$$\Delta_T(\lambda) = \sum_{t=0}^{T-1} h_t(t) X(t) e^{-i\lambda t},$$

$\lambda \in \Pi$, $h_t(t) = h\left(\frac{t}{T}\right)$ — некоторая функция, называемая окном просмотра данных. Заметим, что если $h_t(t) = 1$, то статистику $I_T(\lambda)$ называют периодограммой.