

# Статистический анализ погрешностей конечно-разностной схемы в методе молекулярной динамики

Е.С.Длиннова, В.В.Стегайлов

ВШЭ

Конечно-разностная аппроксимация классических уравнений движения приводит к появлению погрешностей, которые накапливаются в процессе молекулярно-динамических расчетов. Однако непосредственно схема численного интегрирования сохраняет среднее значение энергии системы, именно поэтому эти погрешности существенно отличаются от некоторого случайного шума. Численные ошибки приводят к тому, что ньютоновская динамика сохраняется в МД только приблизительно. Обратная задача состоит в нахождении уравнений, которые удовлетворяют численным МД-траектории. Мы модифицировали систему дифференциальных уравнений Ньютона добавив в их правую часть дополнительные слагаемые, которые вытекают из конечно-разностной аппроксимации уравнений движения и зависят от временного шага численного интегрирования. Смысл этих слагаемых - в том, чтобы при их добавлении решения модифицированного уравнения совпадают с точками конечно-разностного численного решения. В данной работе мы провели анализ дополнительных слагаемых для скоростей и сил межатомного взаимодействия и показали особенности их статистического распределения.