

Міністерство освіти та науки України
Криворізький державний педагогічний університет
Запорізький інститут економіки та інформаційних
технологій

Комп'ютерне моделювання
та інформаційні технології
в науці, економіці та освіті

Збірник наукових праць

Том 1

Кривий Ріг
Видавничий відділ КДПУ
2001

Комп'ютерне моделювання та інформаційні технології в науці, економіці та освіті: Збірник наукових праць: В 2-х томах. – Кривий Ріг: Видавничий відділ КДПУ, 2001. – Т. 1. – 305 с.

Перший том збірника містить статті з різних аспектів застосування комп'ютерного моделювання та мережних технологій у наукових дослідженнях. Значну увагу приділено економіко-математичному моделюванню та інформаційним технологіям у ринковій економіці.

Для студентів вищих навчальних закладів, аспірантів, наукових та педагогічних працівників.

Редакційна колегія:

В.М. Соловійов, доктор фізико-математичних наук
Є.Я. Глушко, доктор фізико-математичних наук
О.І. Олейніков, доктор фізико-математичних наук
Я.В. Шрамко, доктор філософських наук, професор
В.І. Хорольський, доктор технічних наук, професор
О.А. Учитель, доктор технічних наук, професор
І.О. Теплицький, відповідальний редактор
С.О. Семеріков, відповідальний секретар

Рецензенти:

В.М. Назаренко – д-р техн. наук, професор, завідувач кафедри інформатики, автоматики та систем управління Криворізького технічного університету
А.Ю. Ків – д-р фіз.-мат. наук, професор, завідувач кафедри теоретичної фізики Південноукраїнського державного педагогічного університету (м. Одеса)

Затверджено Вченою радою Криворізького державного педагогічного університету (протокол №7 від 08.02.2001 р.)

ISBN 966-8302-44-1

ЭМПИРИЧЕСКИЕ ПОТЕНЦИАЛЫ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ РАЗУПОРЯДОЧЕННЫХ СТРУКТУР

В.Н. Соловьев¹, С.А. Томилин²

¹ г. Запорожье, Запорожский институт экономики и информационных технологий

² г. Кривой Рог, Криворожский государственный педагогический университет

Метод молекулярной динамики, являющийся одним из численных методов физики твердого тела, позволяет получить полную картину эволюции молекулярных систем [1]. Основу метода составляет численное интегрирование уравнений Ньютона для системы частиц (материальных точек), под которыми понимаются отдельные атомы или фрагменты молекул, взаимодействие между которыми определяется выбранным потенциалом. Задание координат и скоростей всех частиц в исходный момент времени полностью определяет дальнейшее поведение системы. Усреднение пространственных конфигураций частиц по траекториям их движения, а также скоростей и энергетических характеристик позволяет получить информацию о структуре ансамбля частиц, о термодинамических и кинетических свойствах системы, дает возможность рассчитывать макроскопические свойства материалов.

Для интегрирования уравнений движения был выбран аддитивный алгоритм Верле [2]. Он характеризуется повышенной устойчивостью и быстрой релаксацией системы к равновесному положению, при этом выбор потенциала межатомного взаимодействия является решающим фактором, обеспечивающим точность расчетов в методе молекулярной динамики.

Потенциал должен как можно точнее соответствовать реальному взаимодействию частиц в кристалле. Хотя методы *ab initio* приобретают все более важное значение, моделирование кластеров размером в несколько тысяч атомов, содержащих к тому же структурные несовершенства на длительных промежутках времени, проблематично. По этой причине поиск новых потенциалов межатомного взаимодействия, является актуальным.

Существует несколько десятков видов функциональных

форм потенциалов. Их выбор зависит от природы связей исследуемого вещества и характера задачи исследования. Самыми известными и широко используемыми функциональными формами являются потенциалы Китинга [10], Стиллинджера-Вебера [3], Терсова [4] и другие, которые хорошо адаптированы к расчетам равновесных конфигураций. Поэтому актуальным становится использование потенциала, параметры которого подгоняются под *ab initio* расчеты для типичных неупорядоченных конфигураций.

Несмотря на то, что функциональные формы потенциалов Стиллинджера-Вебера и Терсова достаточно гибко описывают множество равновесных конфигураций, их переносимость в более широкий класс неупорядоченных (дефектных) структур ставится проблематичной. Попытки описания неравновесных конфигураций известными потенциалами приводит к неоправданным усложнениям функциональной формы потенциала. Так, некоторые формы потенциалов содержат до четырех десятков параметров [7].

Недавно такой эмпирический потенциал, учитывающий особенности окружения (EDIP потенциал – Environment Dependent Interatomic Potential) предложен группой Кексираса [5]. Его функциональная форма содержит 13 параметров, подогнанных под расчеты неравновесных конфигураций в кремнии методом функционала электронной плотности [6].

Энергия конфигурации $\{\vec{R}_i\}$ записывается в виде суммы энергий каждого атома $E = \sum_i E_i$, содержащих, в свою очередь двух- и трехсвязные компоненты:

$$E_i = \sum_{j \neq i} V_2(R_{ij}, Z_i) + \sum_{i \neq j} \sum_{k \neq i, k > j} V_3(\vec{R}_{ij}, \vec{R}_{ik}, Z_i). \quad (1)$$

Здесь $V_2(R_{ij}, Z_i)$ – взаимодействие между i и j атомами, являющиеся ближайшими соседями, а $V_3(\vec{R}_{ij}, \vec{R}_{ik}, Z_i)$ – нецентрированное трехчастичное взаимодействие между i, j и k атомами, где j и k атомы прилегают к атому i . Оба типа взаимодействия зависят от местоположения атома i , через его эффективное координационное число:

$$Z_i = \sum_{i \neq m} f(R_{im}), \quad (2)$$

$f(R_{im})$ – функция, характеризующую вклад соседа m в координацию i -го атома. Она имеет вид

$$f(R_{im}) = \begin{cases} 1, & r < c \\ \exp\left(\frac{\alpha}{1-x^{-3}}\right), & c < r < a, \\ 0, & r > a \end{cases} \quad (3)$$

где $x=(r-c)/(a-c)$, $\alpha=3.1083847$, $a=3.1213820$, $b=3.1213820$, $c=2.5609104$.

Двухсвязный компонент V_2 включает как отталкивающую и притягивающую компоненты

$$V_2 = A \left[\left(\frac{B}{r} \right)^\rho - p(Z) \right] \exp\left(\frac{\sigma}{r-a} \right). \quad (4)$$

Компоненты в (4): $A=7.9821730$, $B=1.5075463$, $\rho=1.2085196$, $\sigma=0.5774108$, а $p(Z) = e^{-\beta Z^2}$, где $\beta=0,0070975$.

Трёхсвязная компонента V_3 состоит из радиальной и угловой частей:

$$V_3(\vec{R}_{ij}, \vec{R}_{ik}, Z_i) = g(R_{ij})g(R_{ik})h(l_{ijk}, Z_i), \quad (5)$$

где $l_{ijk} = \cos \theta_{ijk} = (\vec{R}_{ij} \cdot \vec{R}_{ik}) / (R_{ij} R_{ik})$. Радиальная составляющая представлена в форме

$$g(r) = \exp\left(\frac{\gamma}{r-a} \right), \quad (6)$$

где $\gamma=1.1247945$. Угловая компонента выражена уравнение

$$h(l, Z) = \lambda \left[\left(1 - e^{-Q(Z)(1+\tau(Z))^2} \right) + \eta Q(Z)(1+\tau(Z))^2 \right] \quad (7)$$

где $\lambda=1.4533108$, $\eta=0.2523244$, $Q(Z) = Q_0 e^{-\mu Z}$, $Q_0=312.1341346$, $\mu=0.6966326$. Зависимость $\tau(Z)$ построена путем сглаживающей интерполяции в специальных точках ($Z=2, 3, 4, 6$)

$$\tau(Z) = u_1 + u_2 (u_3 e^{-u_4 Z} - e^{-2u_4 Z}) \quad (8)$$

с параметрами $u_1=-0.165799$, $u_2=32.557$, $u_3=0.286198$, $u_4=0.66$.

Параметры описанного потенциала подбирались, исходя из *ab initio* расчетов кремневых кластеров, содержащих типичные дефекты: точечные (вакансии, междоузельный атом) и линейные (дислокации). Апробация потенциала проводилась путем расчета тех же параметров дефектов, что и методом *ab initio*.

Сравнение результатов расчетов приведено в таблице. E_f –

энергия формирования дефекта (V – вакансии, I – муждоузельный атом в тетераэдрическом (T) или гексгональном (H) положении). E_f^{rel} – то же в отрелаксированном состоянии $\Delta E_f = E_f - E_f^{rel}$.

		<i>Ab initio</i>	EDIP	SW	T_2	T_3
V	E_f	3.3-4.3	3.47	4.63	2.83	4.10
	ΔE_f	0.4-0.6	0.25	1.81	0.02	0.40
	E_f^{rel}	2.9-3.7	3.22	2.82	2.82	3.70
I_T	E_f	3.7-4.8	6.15	12.21	5.85	6.92
	ΔE_f	0.1-0.2	2.10	6.96	0.82	3.47
	E_f^{rel}	3.6-4.6	4.05	5.25	5.03	3.45
I_H	E_f	4.3-5.0	6.68	17.10	5.39	8.22
	ΔE_f	0.6-1.1	2.70	10.15	1.72	3.61
	E_f^{rel}	3.7-3.9	3.98	6.95	3.67	4.61
Кристалл	E_c		4.65	4.63		
	a		5.430	5.431		

В конце таблицы содержатся предварительные данные наших расчетов для идеального кристалла с потенциалами Стильнджера-Вебера (SW) и EDIP потенциалами.

Анализ представленных данных позволяет надеяться, что новый потенциал более корректно описывает разупорядоченные структуры в алмазоподобных полупроводниках.

Литература

1. Метод молекулярной динамики в физической химии. – М: Наука, 1996.
2. Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике: Пер. с англ. / Под. ред. С.А. Ахманова. – М: Наука. Гл. ред. физ.- мат. лит., 1990. – 176 с.
3. L. Verlet Phys. Rev., 159, 98 (1967).
4. F.H. Stillinger and T. A. Weber, Phys. Rev. B. 31, 5262 (1985).
5. J. Tersoff, Phys. Rev. B. 38, 9902 (1988).
6. M.Z. Bazant and E. Kaxiras, Phys. Rev. Lett. 77, 4370 (1996).
7. M.Z. Bazant, E. Kaxiras, J.F. Justo, Phys. Rev. B 56, 8542 (1997).
8. J.F. Justo, M.Z. Bazant, E. Kaxiras, V.V. Bulatov, and S. Yip, Phys. Rev. B 58, 2539 (1998).
9. E. Kaxiras and L.L. Boyer, Modeling Simul. Mater. Sci. Eng. 1, 91 (1992).
10. S.M. Nakhmanson and D.A. Drabold, Phys. Rev. B 58, 15325 (1998).
11. P.N. Keating, Phys. Rev. 145, 637 (1996).
12. V. Bulatov, S. Yip, A.S. Argon, Phil. Mag., 453 (1995).

Зміст

<i>А.А. Архипенко, Е.Я. Глушко, Д.В. Дедюлин.</i> Измерение слабых токов в ультрадисперсных средах	3
<i>І.В. Бакушевич, В.П. Мартинюк, В.М. Гора.</i> Комп'ютерне моделювання оцінки стану економічної безпеки регіонів України.....	7
<i>О.Г. Белз.</i> Формування стратегій управління підприємством.....	11
<i>В.А. Бельский.</i> Решение прямой томографической задачи при помощи сплайнов	17
<i>А.А. Блажко, А.А. Завалин, И.А. Головатюк.</i> Моделирование систем управления асинхронным тиражированием данных.....	20
<i>О.А. Бойченко.</i> Дослідження та розробка систем пошуку інформації	26
<i>Н.В. Витюк.</i> Использование мер структурного подобия в анализе связи «структура – свойство (активность)»	31
<i>Н.В. Витюк.</i> Анализ связи «структура – вкусовые свойства» производных бензола на основе топологической модели молекулы	38
<i>А.А. Витязь, В.П. Логвинчук, В.А. Платоненко.</i> UML как основа построения поля корпоративных знаний	46
<i>В.М. Гиковатый.</i> Метод определения синергетического эффекта в задачах управления развитием	53
<i>Е.Я. Глушко, С.Л. Легуша.</i> Электромагнитное тушение в 1D фотонных кристаллах: запертые моды и прошедшее излучение ...	58
<i>Е.Я. Глушко, Н.А. Слюсаренко.</i> Спектр электронов сродства в наноглеродном монослое.....	65
<i>И.И. Давыдов, Р.С. Ракша.</i> Приемы компьютерного моделирования нелинейных колебаний узлов и конструкций составных сооружений	72
<i>Т.І. Демківська.</i> Алгоритмізація статистичного вибору структури ARIMA моделей	78
<i>А.А. Добровольский.</i> Теоретические вопросы стратегического управления банком.....	86
<i>А.М. Дроздов, Е.А. Дроздов.</i> Развитие концепции абсолютного мира.....	92
<i>В.М. Євсіков.</i> Комп'ютерне моделювання математичних більярдів у плоских фігурах.....	94
<i>В.Н. Евтеев.</i> Особенности предельного перехода от конечной к бесконечной модели кристалла.....	95

<i>О.К. Елисеєва, О.В. Пошивалова.</i> Применение системы управления качеством продукции – одно из важнейших условий конкурентоспособности изделий	99
<i>А.О. Жолос.</i> Застосування методу нейронних мереж при визначенні напрямку операцій на ринку цінних паперів	101
<i>Л.Л. Жукова, І.І. Копайгора, О.О. Федоренко.</i> Моделювання соціального статусу викладача вузу	108
<i>Л.М. Карпуков, С.Н. Романенко, А.С. Романенко.</i> Система квазистатического моделирования полосковых структур многослойных интегральных схем СВЧ	114
<i>А.Е. Ків, V.N. Solovyov, S.A. Tomilin.</i> Formation of Si precipitates in neutron irradiated Al.....	119
<i>Ю.А. Ковалев, К.В. Зацелкин.</i> О подходе к автоматизации проектирования и моделирования микропрограммных автоматов ...	127
<i>С.М. Коваленко, О.В. Король, В.А. Дяченко, О.Д. Стадник.</i> Імітаційне та математичне моделювання для освітніх і наукових цілей	134
<i>С.В. Кукліна, Н.В. Моїсеєнко.</i> Нові інформаційні технології в курсі фізики твердого тіла	138
<i>Т.С. Лось.</i> Экономико-математическое моделирование и информационные технологии в рыночной экономике	143
<i>Г.Ю. Маклаков, Г.Г. Маклакова.</i> Семиотический подход к компьютерному моделированию структуры литературных и генетических текстов.....	150
<i>О.М. Марченко, С.П. Алексєєвич.</i> Впровадження початків економіко-математичного моделювання на основі інформаційних технологій в середньому навчальному закладі нового типу.....	155
<i>Е.П. Никонова, В.Н. Соловьёв.</i> Временная зависимость низкотемпературной теплоемкости структурно-неупорядоченных материалов.....	160
<i>П.Ф. Овчинников, Г.В. Налева.</i> Содержание и место математического моделирования как предмета в вузе	165
<i>И.Д. Павлов, Е.Ю. Антипенко.</i> Вероятностная оценка NPV проекта, основанная на коэффициентах корреляции элементов денежных потоков по периодам выполнения проекта	169
<i>И.Д. Павлов, И.А. Арутюнян.</i> Разработка плана организационно-технического развития методом оптимального программирования	175

<i>И.Д. Павлов, Д.Ю. Мамотенко.</i> Управление проектами универсальным алгоритмом на основе сетевого моделирования	180
<i>И.Д. Павлов, М.Д. Терех.</i> Моделирование оптимального сопротивления теплопередаче ограждающих конструкций зданий в новых экономических условиях	188
<i>А.В. Погорілецька.</i> Моделювання у дослідженні соціальних явищ	193
<i>С.С. Поливцев.</i> Экспериментально-статистические модели физико-механических свойств дегтебетона	197
<i>А.П. Полищук, С.А. Семериков.</i> Некоторые особенности программной реализации методов экспериментальной идентификации линейных процессов	202
<i>В.М. Порохня, Ю.В. Головка.</i> Математична модель оптимізації зміни тарифів за послуги, що надаються організаціям та населенню	211
<i>Н.А. Рашевский.</i> Вычислительный эксперимент в теоретических исследованиях (о проблеме Фробениуса)	216
<i>Н.О. Ризун.</i> Экспертная система планирования работы горно-транспортного комплекса железорудного карьера	218
<i>Н.І. Соколянська.</i> Моделювання автоматизації документообігу з позицій корпоративного менеджменту	225
<i>В.Н. Соловьев, С.А. Семериков, И.А. Теплицкий.</i> Особенности компьютерного моделирования в социально-гуманитарных науках	230
<i>В.Н. Соловьев, С.А. Томилин.</i> Эмпирические потенциалы для моделирования разупорядоченных структур	237
<i>С.П. Сонько, А.А. Попов, І.О. Єрмілов.</i> Електронна картографічна модель як перший крок до створення багатозальної ГІС Кривбасу	241
<i>В.Н. Стаценко.</i> Проблемы формализации социально-экономических процессов	245
<i>А.Н. Сташатов.</i> Компьютерная реализация экспертной системы подготовки и планирования производства в визуальной объектно-ориентированной среде программирования	250
<i>О.Б. Стефановський, Є.В. Сніжко.</i> Алгоритмізація розробки нагрівачів робочого газу спрощених модифікацій двигунів Стирлінга	257
<i>Э.В. Терещенко, В.А. Терещенко.</i> Задачи анализа скрытых зако-	

номерностей эмпирических данных	262
<i>О.В. Федорова.</i> Комп'ютерне моделювання хімічної дифузії..	267
<i>Е.А. Черкас.</i> Моделирование структуры межфазного слоя волокнистого металлокомпозита	272
<i>В.Ф. Шапо.</i> Построение и анализ вычислительных сетей на основе сетевой технологии Wideband	276
<i>Е.Я. Швец, Ю.С. Оселдчик, Т.Н. Точилина, Н.В. Свитанько.</i> Виртуальный лабораторный практикум по общей физике	281
<i>Я.В. Шрамко.</i> Онтологическая модель истинностных значений	287
<i>Т.А. Щербак.</i> Моделювання процесу формування планових завдань виробництва готової продукції підприємства в умовах ринку	298

Наукове видання

**Комп'ютерне моделювання
та інформаційні технології
в науці, економіці та освіті**

В 2-х томах

Том 1

Підп. до друку 12.04.2001
Бумага офсетна №1
Ум. друк. арк. 16,08

Формат 80x84 1/16.
Зам. №4-1107
Наклад 500 прим.

Видавничий відділ Криворізького державного педагогічного університету
КДПУ, 50086, Кривий Ріг-86, пр. Гагаріна, 54

E-mail: cc@kpi.dp.ua