

І.І. Федорчук

## Врахування далекодії при моделюванні металічних матеріалів

*Інститут перспективних технологій, економіки і фундаментальних наук  
Вінницького державного педагогічного університету імені Михайла Коцюбинського,  
вул. Острозького, 31, 21001 Вінниця, Україна*

Розглянуто проблему моделювання структури металічних матеріалів і розрахунку сил в змодельованих фізичних системах. Проаналізовано методику розрахунку далекодіючих (сіткових) сил при моделюванні металічних і іонних кристалів. З'ясовано можливі підходи до розв'язання еліптичних рівнянь поля на просторових сітках з використання Фур'є перетворень, функції Гріна, згорток і процедури Евальда. Проаналізовано результати моделювання металічних (Al) і іонних (CuO) систем. Розглянуто методику вибору параметрів для розрахунку далекодіючих і короткодіючих сил і відповідних параметрів для процедури Евальда.

*Стаття постуила до редакції 07.06.2007; прийнята до друку 15.06.2008.*

### Вступ

Питання математичного моделювання властивостей речовин і створення відповідних комплексів програм є складовою частиною пріоритетного завдання сучасного наукового знання - створення нових металічних матеріалів із заздалегідь заданими властивостями.

Синтез подібних матеріалів у більшості випадків може бути ефективним лише на основі знання процесів, що протікають у рідкій фазі між компонентами металічних сплавів і сумішей, а також врахування їх взаємодії з шлаками і поверхневими оксидними плівками. Основою більшості металургійних шлаків є оксидні розплави, з яких утворюються поверхневі шари (плівки) і визначають актуальність дослідження цих об'єктів.

Потреби новітніх технологій у металургії, скляній промисловості, ядерній енергетиці призвели до дослідження ситуацій, для яких натурні експерименти в цій предметній області вкрай утруднені або нездійсненні, а чисто теоретичний аналіз надто складний. Цей розрив між можливостями теорії й експерименту успішно заповнює математичне моделювання із застосуванням ЕОМ.

Одним з перспективних методів комп'ютерного моделювання є метод молекулярної динаміки, що дозволяє визначити цілий комплекс властивостей (структурні, термодинамічні, транспортні) і досліджувати їх взаємозв'язок. При цьому точність одержаних результатів визначається використовуваними математичними моделями й

розмірністю (числом частинок) системи, що моделюється.

При розробці моделей металічних матеріалів, що відносяться до сильно взаємодіючих систем, доводиться враховувати ряд специфічних особливостей. Велика кривизна потенціальних функцій біля мінімуму вимагає суттєвого зменшення кроку інтегрування рівнянь руху для збереження стійкості. Але основною причиною різкого збільшення часу моделювання є врахування далекодіючих сил в міжчастинкових взаємодіях.

За останнє десятиліття рядом авторів [1-4] були розроблені підходи, що використовуються в локальних програмних комплексах [1-3] і дозволяють моделювати конденсовані системи кількості частинок порядку  $\sim 10^3$ . Але зараз актуальне завдання розробки обчислювальних моделей систем великої розмірності (з кількістю частинок  $\sim 10^5$ - $10^6$  і більше) з використанням нових інформаційних технологій.

### I. Методика розрахунку далекодіючих сіткових сил

Ядром комплексної моделі є метод класичної молекулярної динаміки, в основі якого лежить модель частинок побудована на основі алгоритму частинка-частинка-частинка-сітка (P<sup>3</sup>M). Метод заснований на чисельному інтегруванні рівнянь руху для системи  $N$  частинок, які описуються за допомогою ряду параметрів (атрибутів).

Враховуючи відносну зовнішню простоту моделювання процесів структуроутворення металічних матеріалів на основі P<sup>3</sup>M-алгоритму,

можемо описати початковий і кінцевий стан системи в межах одного циклу по часу через положення частинок на початку циклу –  $\{\mathbf{x}_n, \mathbf{P}_{n-1/2}\}$  і в кінці –  $\{\mathbf{x}_{n+1}, \mathbf{P}_{n+1/2}\}$ . Логічну структуру алгоритму зображено на рис. 1.

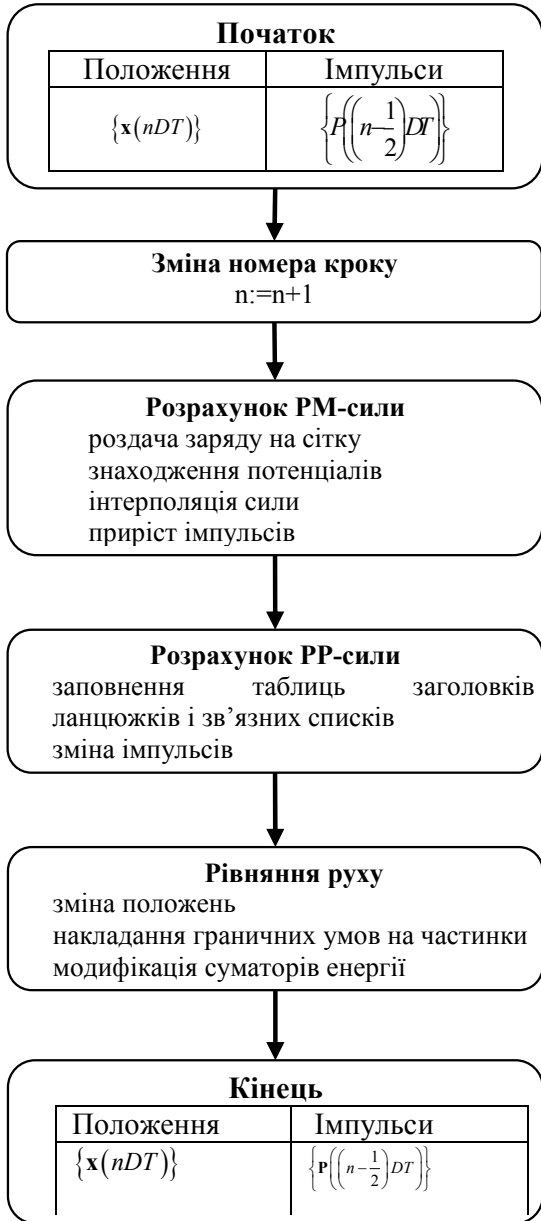


Рис. 1. Цикл по часовому кроку в алгоритмі  $P^3M$ .

Для підвищення точності розрахунку взаємодія частинок (атомів, молекул, електронів) розкладається на сіткову (РМ) [2] і короткодіючу (РР) [3,5] складові. РМ-частина розрахунку сили є варіантом РМ-алгоритму розрахунку сили, застосовуваного для моделей системи без зіткнень, і володіє підвищеною точністю [2,3]. РР-частина повністю відділена від обчислення РМ-сили, її можна було б використати самостійно для розрахунку сили міжчастинкової взаємодії при відсутності далекодіючої сили. Фундаментальною проблемою  $P^3M$ -методу, у

застосуванні до сильновзаємодіючих систем є адекватний опис потенціалу міжчастинкової взаємодії.

Наближення для потенціалу визначає вид математичної моделі. У випадку іонної моделі основою є іон з характеристиками:  $m_i$  – маса,  $q_i$  – заряд,  $\sigma_i$  – радіус жорсткої сфери,  $r_i$  – радіус-вектор,  $v_i$  – швидкість;  $\varphi(r_{ij})$  – парний, сферично-симетричний потенціал,  $U(r_1, r_2, \dots, r_n) = \sum \varphi(r_{ij})$  – потенціальна енергія системи,

$$F_i = \sum_j - \left( \frac{d\varphi}{dr} \right)_{r_{ij}} \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}} \approx \sum_{j=1}^{N_p} \mathbf{R}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$$
 – сила, що діє на частинку.

Існує багато різновидів модельних іонних потенціалів, які застосовуються при  $P^3M$ -модельованні, що відтворюють основні особливості потенціальної кривої [6-8].

У потенціалі  $\varphi(r_{ij})$  звичайно виділяють два основних внески. На відстанях, менших  $r_0$ , основну роль відіграє відштовхування, викликане квантовими ефектами, що часто описується швидко спадаючою експонентною або степеневою залежністю, а при  $r > r_0$  переважає далекодіюча кулонівська взаємодія, що пропорційна  $1/r$ , яка повільно спадає з відстанню. Тому іонна модель містить моделі близько- і далекодії:  $\varphi(r_{ij}) = \varphi^{kop}(r_{ij}) + \varphi^{kul}(r_{ij})$ .

У моделі близькодії, починаючи з деякої відстані  $r^{kop}$ , відштовхувальним внеском у потенціал можна знехтувати. У цьому випадку розглядається взаємодія лише найближчих частинок, у сфері радіусу  $r^{kop}$ , так званого «радіуса відсікання».

У моделі далекодії для врахування кулонівського внеску необхідно враховувати вплив всіх нескінченних відображень модельного куба, у силу періодичних граничних умов Борна-Кармана, Лапласа застосовуваних при МД-модельованні.

Кулонівська енергія системи  $N$  частинок у модельному кубі з довжиною ребра  $L$  і його нескінченних повтореннями розраховується за формулою

$$U^{kul} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{q_i q_j}{r_{ij, \vec{n}}}, \quad (1)$$

де  $\vec{n} = (n_1, n_2, n_3)$  – вектор трансляції модельного куба,  $n_1, n_2, n_3$  – цілі числа.

Відстань між частинкою в модельному кубі й частинкою в репліці, визначається як:  $\vec{r}_{ij, \vec{n}} = |\vec{r}_{ij} + L \cdot \vec{n}|$  (рис. 2).

Розрахунок ведеться від вихідної комірки  $\vec{n} = (0; 0; 0)$  по всіх комірках, що оточують базову, до нескінченності. При цьому доданок при  $I = j$  опускається, коли  $n = 0$ .

Ряд (1) повільно сходиться, тому в моделі потенціальна енергія розраховується за методикою Евальда [8] і використовує методи розв'язку диференціальних рівнянь поля в  $\mathbf{k}$  – просторі через

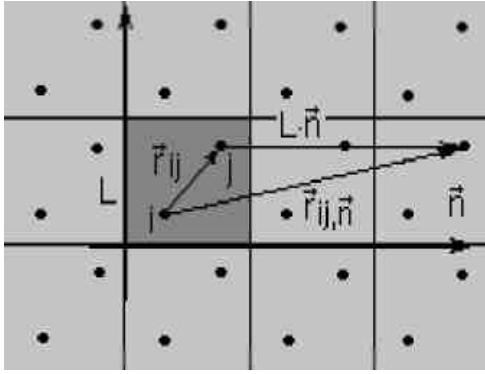


Рис. 2. Трансляції модельного куба.

згортку функції розподілу заряду з функцією Гріна, яка розроблена для розрахунку параметрів на нескінченних сітках кулонівської взаємодії.

В такому випадку сіткова густина заряду у вузлах сітки дорівнює:

$$\rho(\mathbf{x}_p) = \frac{q}{H} \int n(x')W(x_p - x')dx' = \frac{q}{V_c} \sum_{i=1}^{N_p} W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_p). \quad (2)$$

Тоді, очевидно, при переході до  $\mathbf{k}$ -простору і використовуючи згортку отримаємо:

$$\rho' \supset \hat{\rho}'(k) = \frac{q}{H} \hat{n}(k)\hat{W}(k), \quad (3)$$

де  $n(x) = \sum_{i=1}^{N_p} \delta(x - x_i)$  – густина центрів частинок одновимірної нескінченної системи, а

$\hat{W}(k) = H \text{sinc}^3\left(\frac{k}{k_g}\right)$  – Фур'є-образ функції

розподілу зарядів з використанням 3-х найближчих вузлів (рис.3). Тоді у випадку одновимірної нескінченної системи отримаємо вираз

$$\varphi(x_p) = H \sum_{p'=-\infty}^{\infty} G(x_p - x_{p'})\rho(x_{p'}), \quad (4)$$

який при переході до тривимірного простору буде представлений рівнянням

$$\varphi(\mathbf{x}_p) = V_c \sum_p G(\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_{p'})\rho(\mathbf{x}_{p'}), \quad (5)$$

що у  $\mathbf{k}$ -просторі матиме вигляд

$$\varphi(x_p) \supset \hat{\varphi}(k) = \hat{G}(k)\hat{\rho}(k). \quad (6)$$

При використанні скінченно-різницевої апроксимації лапласіана в рівнянні Пуассона функції впливу одержують шляхом безпосереднього перетворення різницевої рівнянь. Наприклад, в одновимірному випадку триточкова апроксимація

рівняння  $\varphi_{p-1} - 2\varphi_p + \varphi_{p+1} = -\frac{\rho_p H^2}{\epsilon_0}$  приведе до

відповідного вигляду в одновимірному випадку функції Гріна:

$$\hat{G}'(k) = \Pi\left(\frac{k}{k_g}\right) \frac{(H/2)^2}{\sin^2\left(\frac{kH}{2}\right)}, \quad (7)$$

а у відповідному двовимірному випадку матимемо –

$$\hat{G}'(k_1, k_2) = \Pi\left(\frac{k_1}{k_g}\right) \Pi\left(\frac{k_2}{k_g}\right) \frac{(H/2)^2}{\sin^2\left(\frac{k_1 H}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{k_2 H}{2}\right)}, \quad (8)$$

Порівнюючи вирази (7) і (8), бачимо, що для скінченно-різницевої апроксимації короткохвильові гармоніки потенціалу одержуються набагато більшими, ніж для найкращої середньоквадратичної апроксимації, тобто похибки дискретизації і похибки розподілу заряду діють у протилежному напрямі: похибки, пов'язані з розподілом заряду, послаблюють короткохвильові компоненти, тоді, як похибки дискретизації їх підсилюють. Отже, якщо до розподіленого на сітку заряду застосовується оператор загострення і при цьому не враховується вплив похибок апроксимації в рівнянні для поля на відновлення початкової форми частинки, то в результаті можна прийти до того, що апроксимація буде гіршою порівняно з випадком, коли не було ніяких спроб корекції.

Очевидно, що вираз (6) є зручним як для загального опису залежності сіткового потенціалу від розподілу центрів електричного заряду і вигляду взаємодії (функції Гріна), так і для проведення безпосередніх розрахунків. Останнє пояснюється тим, що при переході до Фур'є образів відомих величин, згортка двох функцій в  $\mathbf{k}$ -просторі є простим по елементним добутком відповідних коефіцієнтів.

Таким чином, етапи обчислення сили можна формально представити в такому вигляді:

*Розподіл заряду:*

$$\rho^+(\mathbf{x}) = \frac{q}{V_c} \mathfrak{M}(\mathbf{x}; H)W(\mathbf{x}) * n(\mathbf{x}), \quad (9)$$

*Знаходження потенціалу:*

$$\varphi'(\mathbf{x}) = G'(\mathbf{x}) * \rho^+(\mathbf{x}). \quad (10)$$

*Диференціювання потенціалу:*

$$\mathbf{E}^+(\mathbf{x}) = -\mathfrak{M}(\mathbf{x}; H)\mathbf{D}(\mathbf{x}) * \varphi'(\mathbf{x}). \quad (11)$$

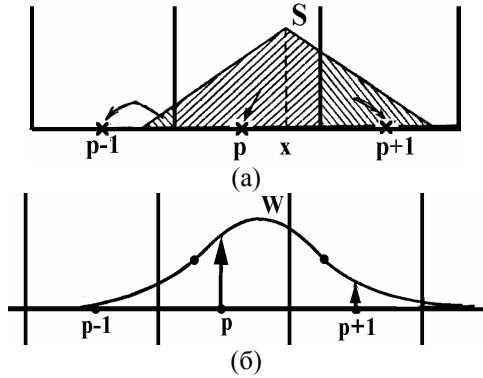
*Інтерполяція сили:*

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \frac{q}{V_c} \mathbf{W}(\mathbf{x}) * \mathbf{E}^+(\mathbf{x}) \quad (12)$$

де  $\mathfrak{M}$  – функція вибірки (гребінка  $\delta$ -функцій Дірака);  $\mathbf{D}$  – оператор впливу (диференціювання).

Найскладнішим у запропонованому алгоритмі є знаходження результуючої сили, що діє на частинки, і внутрішньої енергії системи. При цьому труднощі, котрі виникають під час розв'язання вище перерахованих задач, частково знімаються, при виконанні наступних умов.

Під час розрахунку сіткової частини сили (PM) використовувати методи розв'язку еліптичних рівнянь із застосуванням швидких перетворень Фур'є. При цьому, обмежившись простими крайовими умовами: періодичність (циклічність, нескінченність) системи  $\varphi(x) = \varphi(x + L)$ ; нульові значення потенціалу (умова Дірихле)  $\varphi(L) = \varphi(0)$ ; нульовий градієнт (умова Неймана)



**Рис. 3.** Розподіл густини заряду (одновимірний випадок) за схемою TSC (з використанням 3 найближчих вузлів). а) розподіл в  $x$ -просторі; б)  $k$ -просторі (Фур'є образ розподілу).

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{x=L} = 0$$

матимемо змогу використовувати синус- чи косинус-перетворення Фур'є, що суттєво економить час розрахунку і необхідні ресурси ЕОМ.

Перед початком розрахунку перейти до безрозмірних величин, зокрема, якщо використати систему, в якій крок сітки заряду-потенціалу  $H = 1$ . Тоді інтерполяційна функція приймає вигляд

$$W(\mathbf{x}) = w(x)w(y)w(z). \quad (13)$$

Крім цього ми уникнемо додаткових часових витрат і комп'ютерних витрат на додаткові операції множення і ділення на  $r^2$ .

Для спрощення моделі заряди вільних електронів у розчинах (розплавах) металів можуть бути розподілені на просторовій сітці заряду-потенціалу, що утворить деякий негативний фон і позбавить нас необхідності розраховувати їх траєкторії руху. Таке спрощення є допустимим і навіть необхідним з точки зору економії комп'ютерного часу і ресурсів, хоча й вносить деякий негативний вплив у процес формування структури металічних тіл. У випадку ковалентних (іонних) зв'язків задача суттєво спрощується через відсутність вільних електронів.

У випадку використання для проведення досліджень спеціалізованих математичних пакетів на зразок MatLab по можливості відмовитись від використання циклічних структур, замінивши їх можливостями спеціалізованих математичних пакетів. Єдині додаткові обмеження, які при цьому накладаються на змодельовану систему, - максимальний розмір просторових сіток, а отже і максимальна кількість частинок у системі. Без використання спеціалізованих векторних процесорів, мейнфреймів чи масово-паралельних суперкомп'ютерів максимально-допустима кількість частинок в системі не може перевищувати  $10^6-10^7$ . В цьому випадку розміри просторових сіток будуть в межах  $128^3-512^3$ . Обробка таких масивів вимагає великих об'ємів оперативної пам'яті і потужностей центрального процесора. Для обробки сітки  $128^3$  необхідно приблизно 1-2 GB оперативної пам'яті і 4-6GB – віртуальної.

## II. Обговорення результатів

Для істотного збільшення розмірів модельних систем і продуктивності обчислень пропонується паралельна реалізація Р<sup>3</sup>М-алгоритму, з проведенням розрахунків на основі системи Matlab R2007 на основі технології кластерних систем з розпаралеленням розрахункових процесів і використання переваг 64-бітних та n-ядерних процесорів. Розподілені дані представляються у вигляді набору однотипних об'єктів, які проводять розрахунок потенціалів і сил одночасно на всіх ЕОМ в обчислювальній мережі. При цьому можливе масштабування обчислювальної потужності дослідної системи, причому, час розрахунку великих систем скорочується пропорційно кількості задіяних ПК. Оптимізація параметрів моделювання може здійснюватись в автоматичному чи візуальному режимах.

Вибір Фур'є перетворень і параметрів у процедурі Евальда є компромісом між точністю й швидкістю обчислень, що у свою чергу визначаються алгоритмічною реалізацією. Для оптимізації алгоритму і прискорення розрахунків проводиться відсікання сум у  $x$ -просторі, при цьому число доданків у  $x$ -просторі зменшується за рахунок збільшення їх у  $k$ -просторі.

Для Р<sup>3</sup>М-методу визначальною є точність обчислення сил. Тому для знаходження оптимальних параметрів процедури Евальда необхідно, щоб у прямому й зворотному просторі відносний порядок  $\varepsilon$  відкинутих доданків був однаковий. Для розрахунку сил з точністю до 1% можна вибрати  $\varepsilon \approx 10^{-3}$  і оптимізувати параметри розрахунків змодельованої системи.

Для більших систем, що містять  $\sim 10^4$  частинок і більше оптимальним є значенням для  $r^{Кул} = 14 \text{ \AA}$ . Зменшення радіуса обрізання - істотно збільшує час рахунку в оберненому просторі, при збільшенні радіуса обрізання - різко зростає час рахунку у прямому просторі.

Наприклад, у системі з  $N = 50^3$  при виборі невеликого радіуса обрізання ( $r^{Кул} = 8 \text{ \AA}$ ) потрібно в кілька десятків ( $\sim 40$ ) раз більше часу для розрахунку сил і енергії в  $k$ -просторі, ніж в  $x$ -просторі, а при  $r^{Кул} = 20 \text{ \AA} = L/7$  час моделювання у прямому просторі майже в 4 рази перевищує час у оберненому.

При збільшенні радіуса обрізання, час рахунку по прямому просторі монотонно зростає, по оберненому – монотонно спадає. Їхня сума дає загальний час моделювання, що досягає оптимального значення при певному  $r^{Кул}$ . У багатьох випадках оптимальним може бути вибір  $r^{Кул} = L/4$ .

В процесі математичного комп'ютерного експерименту були розглянуті наступні матеріали Al -100% трьох валентний (чистий матеріал з урахуванням електронного впливу і без нього), а також оксид міді CuO. Моделювання процесів

структурування алюмінію проводилось в одному них випадках з урахуванням присутніх електронів, але проводився розрахунок траєкторій руху лише атомів (іонів) алюмінію на фоні рівномірно-розподіленого негативного заряду (негативного поля створюваного електронами). В цьому випадку бала розглянута проста форма потенціалу взаємодії, яка впливала з розв'язку рівнянь поля і підлягала під опис далекодіючих взаємодій, що описуються на основі закону Кулона. В іншому випадку проводилось моделювання без урахування негативного поля електронного газу утвореного валентними електронами, але форма потенціалу взаємодії була обрана у формі

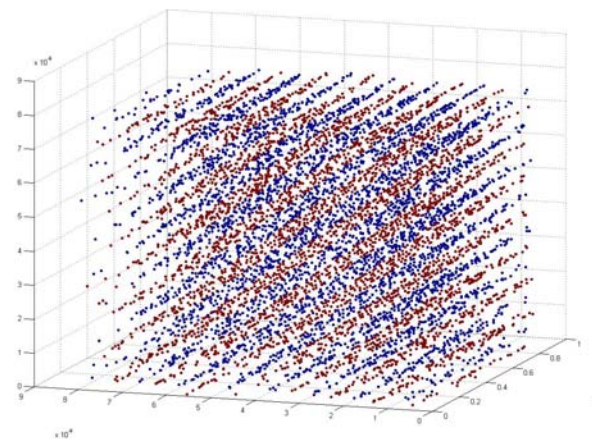
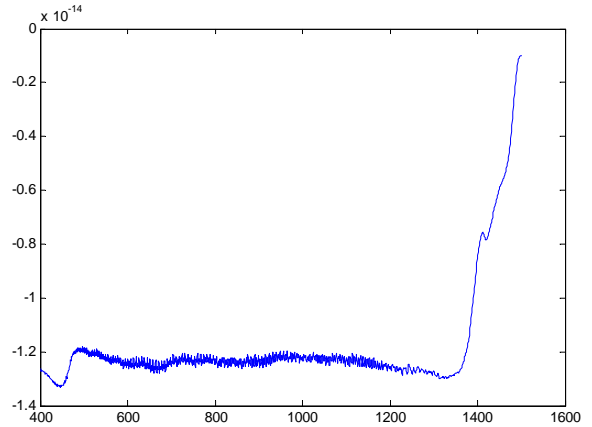
$$U(r_{ij}) = \varepsilon \left[ \left( \frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_0}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (14)$$

де  $r_{ij}$  - відстань між іонами, а  $\varepsilon$  і  $r_0$  - визначають глибину потенціальної ями та рівноважну відстань між атомами. Аналогічна форма потенціалу була обрана під час моделювання оксиду міді CuO. У всіх випадках в процесі математичного комп'ютерного експерименту проводився підбір деяких констант, часу релаксації та швидкості охолодження систем. Теоретично обґрунтовано і експериментально обрано швидкість охолодження  $\approx 0.5 \div 1K$  за один цикл по часу та 5000-10000 циклів для приведення системи в рівноважний стан. При цьому розрахунки Потенціальної енергії робились як інтегральні по останніх 500-1000 циклах релаксації системи. Отримані результати, графічна форма яких представлена на рис.4 дають змогу стверджувати, що при великих швидкостях охолодження проходить класичний варіант стікловання металу, без утворення кристалічної структури, і при зниженні швидкостей охолодження (збільшення циклів стабілізації системи до 15000-20000), починає спостерігатись виділення кристалічних структур з утворенням порядку в системі. При температурах  $\approx 1000K$  починаємо спостерігати процес утворення кристалічних структур в розплаві металу, який супроводжується виділенням теплоти (збільшення внутрішньої енергії) при зниженні температури системи. Кількість виділеної теплоти еквівалентна теплоті плавлення (кристалізації) матеріалу.

Зрозуміло, що для використання запропонованої моделі необхідно провести детальніші дослідження поведінки системи. Особливо важливим є правильний вибір початкових параметрів системи, кроку по часу  $dt \approx 10^{-15} \div 10^{-17} c$ , швидкості охолодження за один крок по часу  $dT \approx 0.01 \div 1K$ , що є еквівалентним  $DT \approx 10^{14} \div 10^{18} K/c$ , та кількості циклів релаксації системи  $N_{rel} \approx 10^3 \div 10^6$ .

## Висновки

Для реалізації молекулярно-динамічного моделювання сильно взаємодіючих систем великої



**Рис. 4** Охолодження (кристалізація) розплаву оксиду міді (CuO, Cu(II)-50%, O(II)-50%,  $\Delta T = 0,25K$ ) – іонна система.

розмірності ( $N \approx 10^5 \div 10^6$  частинок) з використанням розпаралеленого алгоритму та алгоритму P<sup>3</sup>M для розрахунку кулонівських взаємодій може бути корисним використання алгоритму побудованого на основі процедури Евальда. Для прискорення збіжності сум у прямому просторі застосовується методика відсікання членів послідовності за межею сфери певного радіуса (радіуса відсікання). Запропонована методика для розрахунку оптимальних параметрів процедури Евальда залежно від числа частинок, що забезпечує задану точність розрахунку кулонівських сил.

Проведено тестові експерименти в середовищі MatLab по визначенню оптимальних значень параметрів для систем NaCl, CuO, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> залежно від числа частинок у системі й радіуса обрізання в прямому просторі. З результатів експериментів слідує, що: для систем малих розмірів ( $N \approx 10^3$ ) у силу періодичних граничних умов радіус обрізання варто вибирати порядку половини ребра розрахункового куба  $r^{Kyn} = L/2$ ;

-для великих систем ( $N \approx 10^4 \div 10^6$ ) радіус обрізання варто вибирати  $r^{Kyn} = L/4$ , або  $r^{Kyn} \approx 6 - 14 \text{ \AA}$ . Таке значення радіуса обрізання істотно зменшує число розрахунків парних взаємодій у прямому просторі й прискорює збіжність сум. При цьому забезпечується

точність розрахунку сил ~0.1-1%, що цілком прийнятним для тлумачення отриманих результатів.

**Федорчук І.І.** – старший викладач кафедри інформаційних технологій та інноваційних методик.

- [1] Л.И. Воронова., О.И. Бухтояров, Г.П. Вяткин. Расчет параметров потенциала Ме-О методом MNDO для МД моделирования в ионно-ковалентном приближении: 1. Анализ применимости MNDO-расчетов для построения потенциальных кривых // *Расплавы*, (6), сс. 50-57, (1994).
- [2] О.П. Зильберман, А.Н. Черников, П.Ф. Зильберман, В.С. Знаменский. Исследование контактного плавления в системе KCL-NaI-KI // *Материалы 5-го Российского семинара "Компьютерное моделирование расплавов и стекол"*. Курган, сс. 107-108, (2000).
- [3] А.Н. Лагарьков, В.М. Сергеев/ Метод молекулярной динамики в статистической физике. // *УФН*, **125**(3), сс. 409-448, (1978)..
- [4] И.И. Федорчук Использование спектральных методов для расчета сетевых параметров при моделировании физических систем // *Актуальные проблемы физики твердого тела*: сб. докл. Междунар. науч. конф., 26-28 окт.2005г., Минск. В 2 т. Т. 2/ редкол.: Н.М. Олехнович (пред.) [и др.]. – Мн.: Изд. Центр БГУ, – сс. 226-230, (2005).
- [5] Р Хокни. *Методы расчета потенциала и их предложения*. – В кн. Вычислительные методы в физике плазмы, под ред. Б. Очдера, С. Фернбаха и М. Рогенберга. Мир, М. сс. 143-151, (1974)
- [6] J.W. Eastwood, R.W. Hockney, D.N. Lawrence P3M3DP - the three-dimensional periodic article-particle, particle-mesh program. // *Comp.Phys.Comm.*, **19**, (2), pp. 215-261 (1980).
- [7] M.J.L. Sangster, M. Dixon Interionic potentials in alkali halides and their use simulation of molten salts. // *Adv.Phys.*, **25**(3), pp. 247-342 (1976).
- [8] T. F.Soules. A molecular dynamics calculation of the structure of sodium silicate glass. // *J.Chem.Phys.*, **71**(11), pp. 4570-4578 (1979).

## I.I. Fedortchuk

### **Taking Long-Range Action Into Account While Modeling Metal Materials**

*Institute of perspective technologies, economy and fundamental sciences  
of Vinnytsia Mychaila Kotsubynskogo State Pedagogic University, 31,  
Ostrozko Street, 21001, Vinnytsia, Ukraine*

So, there was examined the problem of the simulation of metal materials' structure and the calculation of forces in the modeled physical systems. There were analyzed the principles of calculation of far-active (net) forces of simulation of metal and ionic crystals. The possible ways to the solution of elliptical equation of the field on the space networks using Furje's conversions, Grin's functions, parcels and Evald's procedures were solved. There were analyzed the results of simulations of metal (Al) and ionic (CuO) systems. There was examined the principle of choosing of parameters for far-active and short-active forces calculation and corresponding parameters for Evald's procedure.