

УДК 519.713 + 539.216.1

© 2010 г. **И.Е. Еремин**, канд. физ.-мат. наук,

М.С. Сычев

(Амурский государственный университет, Благовещенск)

МОДИФИЦИРОВАННЫЙ АЛГОРИТМ УЛУЧШЕНИЯ СХОДИМОСТИ РЕШЕТОЧНЫХ СУММ

Рассматривается методика утилитарного расчета нанометрических параметров, адекватно характеризующих силовое взаимодействие элементов кристаллической решетки. Предложен модифицированный алгоритм улучшения сходимости решеточных сумм, базирующийся на методе Харрисона.

Ключевые слова: координационный слой; координационная сфера; автоматизация расчетов.

Введение

Современные электронные вычислительные машины дали в руки исследователей эффективное средство для автоматизации моделирования решений сложных задач науки и техники. Именно поэтому количественные методы исследования в настоящее время проникают практически во все сферы человеческой деятельности, а теоретические модели становятся основным средством познания. При этом их роль далеко не исчерпывается проблемой познания тех или иных закономерностей. Кроме того, значение математических моделей возрастает в связи с естественной тенденцией к оптимизации технических устройств и технологических схем планирования эксперимента. Таким образом, в процессе познания, т.е. в стремлении создать детальную картину тех или иных процессов исследователи приходят к необходимости формирования все более сложных моделей, требующих применения все более универсального и тонкого математического аппарата. В свою очередь реализация подобных моделей на ЭВМ чаще всего осуществляется с помощью численных методов, поэтому развитие математического моделирования напрямую зависит от совершенствования численных методов, протекающего совместно с прогрессом в области электронно-вычислительной техники.

В свете вышесказанного можно отметить, что одной из важнейших характеристик материала, находящегося в конденсированном состоянии, является величина постоянной Маделунга, характеризующая силовое взаимодействие между элементами кристаллической решетки, т.е. ее стабильность. При этом знание названной константы позволяет определить полную энергию кристаллической решетки, а также модуль упругости кристалла.

Результаты использования метода прямого расчета

В рамках проводимого исследования расчеты постоянной Маделунга были выполнены для двух разновидностей кристаллических структур – гранецентрированной кубической решетки типа NaCl (рис. 1а) и объемно центрированной кубической решетки структурного типа CsCl (рис. 1б).

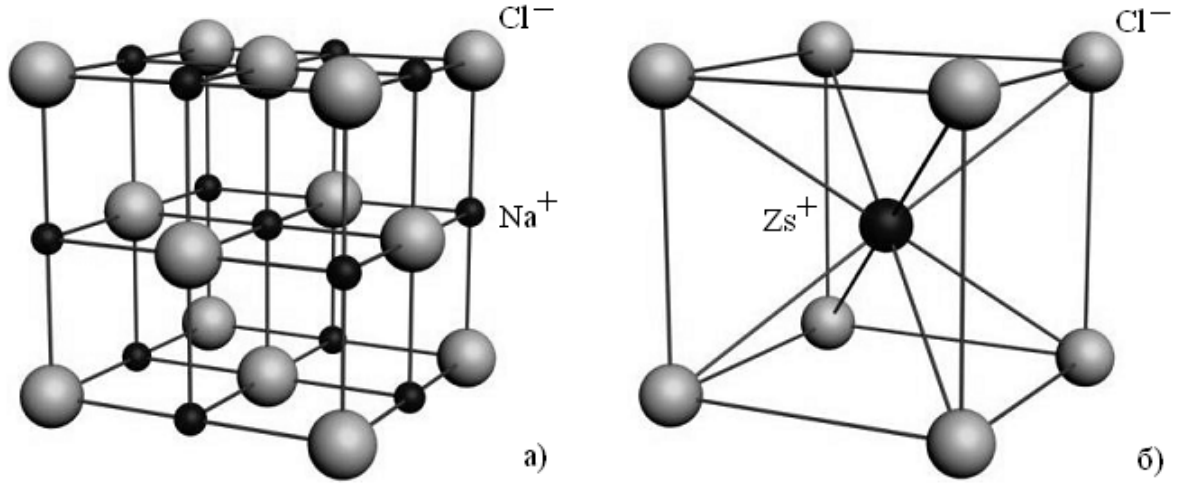


Рис. 1. Элементарные ячейки хлоридов натрия и цезия.

Следуя способу компактного описания координат пространственных узлов кристаллической решетки, предложенному в работе [1], двухмерные векторно-матричные модели, позволяющие отразить расположение зарядов частиц, образующих рассматриваемые структуры, имеют вид:

$$\begin{aligned}
 Z_l^{NaCl} &= \begin{vmatrix} +1 & -1 & \dots & \dots & +1 & -1 \\ -1 & +1 & \dots & \dots & -1 & +1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ +1 & -1 & \dots & \dots & +1 & -1 \\ -1 & +1 & \dots & \dots & -1 & +1 \end{vmatrix}, & Z_l^{ZsCl} &= \begin{vmatrix} +1 & 0 & \dots & \dots & +1 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ +1 & 0 & \dots & \dots & +1 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \end{vmatrix}; \\
 Z_{l-1}^{NaCl} &= \begin{vmatrix} -1 & +1 & \dots & +1 & -1 \\ +1 & -1 & \dots & -1 & +1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ +1 & -1 & \dots & -1 & +1 \\ -1 & +1 & \dots & +1 & -1 \end{vmatrix}, & Z_{l-1}^{ZsCl} &= \begin{vmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -1 & \dots & 0 & -1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -1 & \dots & 0 & -1 \end{vmatrix},
 \end{aligned} \quad (1)$$

где l – порядковый номер текущего координационного слоя, максимальное значение которого задается четным числом.

В свою очередь универсальная матрица общего вида, эффективно характеризующая количество однотипных позиций пространственных узлов произвольного координационного слоя, представляет собой [1]:

$$K_l = \begin{pmatrix} 6 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 24 & 24 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 24 & 48 & 24 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 24 & 48 & 48 & \dots & 24 & 0 \\ 12 & 24 & 24 & \dots & 24 & 8 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Результаты практической реализации метода прямого расчета постоянной Маделунга A_M кристаллических решеток NaCl и ZsCl, полученные с помощью первоначальной версии компьютерной программы, разработанной авторами на макроязыке вычислительной среды MatLab [1], представлены на рис. 2 и 3.

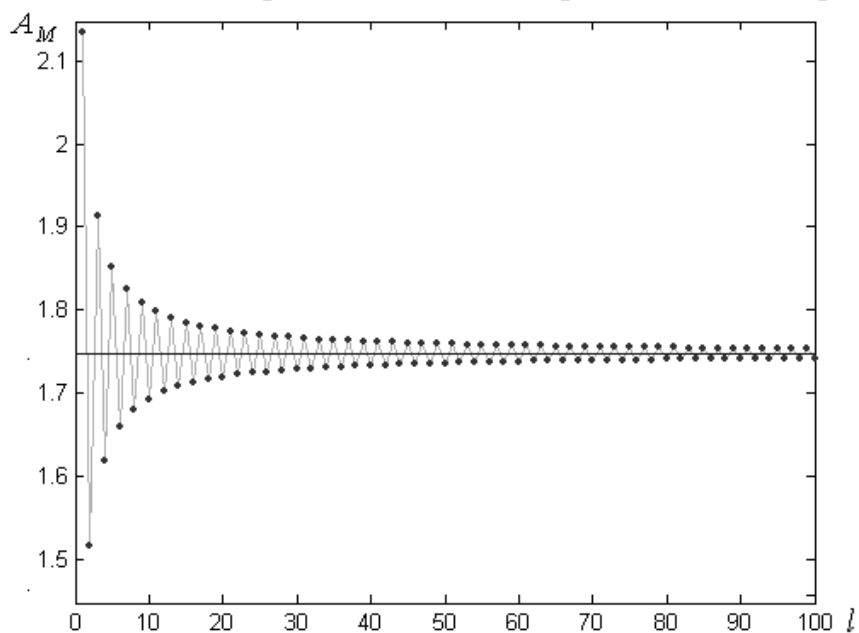


Рис. 2. Результаты расчетов постоянной Маделунга решетки типа NaCl.

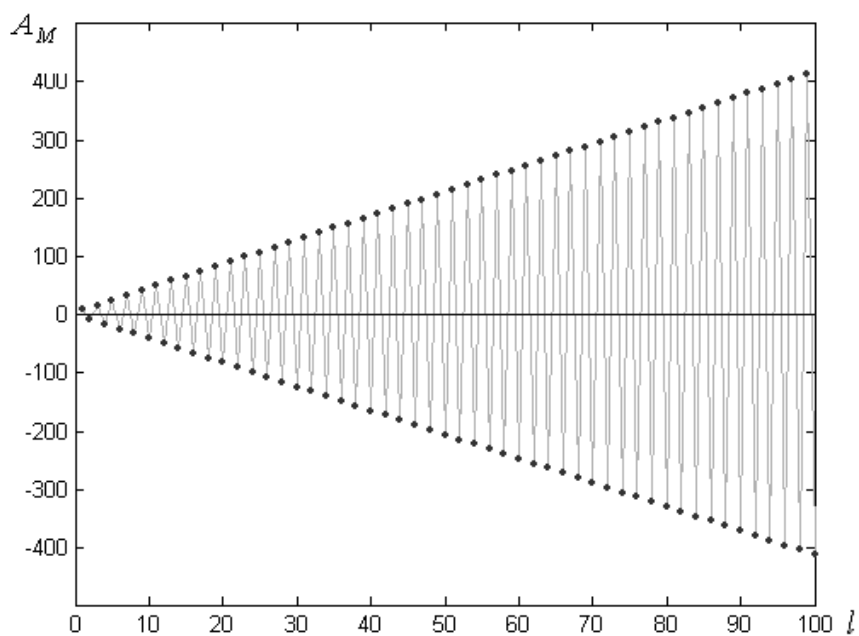


Рис. 3. Результаты расчетов постоянной Маделунга решетки типа ZsCl.

Приведенные графики, на которых текущие величины постоянной A_M отмечены точками, а сплошная прямая линия отображает ее контрольное значение, наглядно демонстрируют следующие хорошо известные обстоятельства.

Во-первых, рассматривая текущие значения постоянной Маделунга кристаллической решетки NaCl, классифицированные по количеству используемых для ее расчета координационных слоев, можно увидеть, что даже при учете всего 100 слоев колебание значения разбираемой константы является не слишком большим и быстро сходится к фиксированному значению. Данный факт объясняется тем, что суммарный электрический заряд частиц, заключенных внутри координационных слоев, является скомпенсированным, именно поэтому полученный ряд Маделунга быстро сходится к точному результату.

Во-вторых, вычисление постоянной Маделунга кристаллической решетки CsCl с помощью метода ее прямого расчета не дает желаемого результата, так как вытекающий в его рамках ряд Маделунга оказывается расходящимся. Данный факт объясняется тем, что в отличие от кристаллических структур типа NaCl решетка CsCl имеет нескомпенсированный суммарный заряд, распределенный по ее координационным слоям. Следовательно, рамки прямого метода не позволяют обоснованно выбрать ограниченное количество координационных сфер, для которого общий заряд этой группы оказался бы электрически нейтральным.

Таким образом, для решения задачи, направленной на разработку единого вычислительного средства определения постоянной Маделунга кристаллических решеток произвольной структуры, объективно необходим поиск методологической модели, позволяющей избавиться от влияния нескомпенсированных зарядов частиц, располагающихся внутри кристалла заданного объема.

Методы улучшения сходимости решеточных сумм

После публикации работы Э. Маделунга [2], обосновавшей существование кристаллографического параметра, характеризующего внутреннюю энергию решетки, в большинстве расчетов этой константы, названной в его честь, использовался прямой метод суммирования. При этом О. Эмерслебен разработал два способа ее вычисления: метод расширяющихся кубов (координационных слоев) и метод расширяющихся сфер (координационных сфер), выделяемых относительно центрального иона. Однако все существующие реализации прямого метода расчета являются слишком громоздкими в силу двух основных причин. Во-первых, достижение конечного результата вычислений, обладающего необходимой точностью, требует рассмотрения весьма большого числа пространственных узлов, а также учета зарядов находящихся в них частиц и значений их трехмерных координат. Например, кубический ионный кристалл, обладающий решеткой NaCl и занимающий объем всего лишь в $0,01 \text{ мкм}^3$, включает в себя около одного миллиарда частиц, образующих около пятисот координационных слоев. Во-вторых, в рамках прямого метода оказывается невозможным сколько-нибудь обоснованно расположить члены формируемого ряда так, чтобы его положительная и отрицательная части взаимно компенсировались, т.е. обеспечивали сходимость ряда.

С одной стороны, для улучшения ситуации, имеющей место в первом из

указанных случаев, т.е. для сокращения объема практических вычислений И. Ратнер и О. Вельц предложили учитывать точечную симметрию группы, позволяющую использовать следующие расчетные формулы:

$$A_M = \sum_{\substack{m,k,p=-\infty \\ m^2+k^2+p^2 \neq 0}}^{\infty} \frac{(-1)^{m+k+p+1}}{\sqrt{m^2+k^2+p^2}}; \quad (3)$$

$$b = \sum_{\substack{m,k,p=-\infty \\ m^2+k^2+p^2 \neq 0}}^{\infty} \frac{1}{(m^2+k^2+p^2)^{n/2}},$$

где b – решеточная сумма; n – показатель степени в потенциале отталкивания Борна. Является очевидным, что при практических расчетах сумм вида (3), принимая во внимание невозможность суммирования по бесконечной решетке, пределы суммирования должны быть конечными, поэтому обычно ограничиваются рассмотрением кубов с фиксированными линейными размерами $2La \times 2La \times 2La$, где L – номер внешнего координационного слоя, a – длина ребра элементарного куба, вершинами которого служат позиции соседних пространственных узлов.

С другой стороны, вследствие низкой сходимости сумм вида (3), имеющей место для достаточно широкого ряда решеток, с целью исключения данного обстоятельства Х. Эвьен предложил рассматривать частицы, расположенные на наружных гранях куба, с учетом только половины их весового вклада, частицы на наружных ребрах куба с весом $1/4$, а частицы на наружных вершинах – весом $1/8$. В свою очередь достаточное распространение для решения описываемой задачи получил метод, предложенный П. Эвальдом. Его суть заключается в использовании формулы Пуассона, в которой суммирование энергий взаимодействия в реальном пространстве заменяется эквивалентной суммой в пространстве Фурье. Однако ни тот ни другой методы не позволили существенно упростить определение постоянной Маделунга, а также обобщить рассмотрение различных типов кристаллических решеток, так как в их рамках искомая сумма остается только условно сходящейся, а конечный результат зависит от порядка суммирования, если ячейка обладает не нулевым дипольным моментом. Следует отметить, что известные современные модификации названных расчетных методик оказываются слишком трудоемкими для их практического применения [3].

Совсем недавно У. Харрисоном был предложен оригинальный способ расчета постоянной Маделунга [4], не страдающий от условной сходимости методов Эвальда и Эвьена и, следовательно, гарантирующий получение правильного результата. Ключевая идея метода Харрисона состоит в следующем: исходная элементарная ячейка кристалла разбираемого типа одновременно расширяется в трех измерениях, т.е. применяется метод расширяющихся кубов, после чего вводится дополнительное граничное условие – сфера радиуса R , вписанная в расширяющийся куб и исключаяющая электростатическое взаимодействие F ионов, оказавшихся снаружи, обусловленное значением соответствующих решеточных сумм. Очевидно, что суммирование значений F ионов, оставшихся внутри сферы Харрисона, приводит к колебаниям результирующего заряда (который может быть

либо положительным, либо отрицательным), величина которых нарастает с увеличением радиуса R . Поэтому для компенсации неустойчивости суммарного заряда внутри сферы к рассмотрению первоначально полученного результата добавляется учет тонкой оболочки с радиусом R и зарядом Q , электростатический вклад которой считается равным $-Q/R$, где Q – результирующий заряд, полученный при суммировании зарядов всех ионов, находящихся внутри сферы Харрисона, включая заряд центрального иона.

Таким образом, способом численного определения постоянной Маделунга, наиболее подходящим для автоматизации ее расчета, может считаться метод Харрисона. Однако его существующие программные реализации оказываются достаточно громоздкими, поэтому исследователи, работающие в затрагиваемой области знаний, поступают следующим образом. Внутренняя энергия решеток, обладающих скомпенсированным суммарным зарядом, рассматривается в рамках прямого расчета A_M , а более сложные случаи – с помощью метода Харрисона.

Предлагаемый алгоритм автоматизации метода Харрисона

С целью реализации возможности создания универсального вычислительного средства, предназначенного для расчетов постоянной Маделунга кристаллических решеток произвольных структур, авторами был разработан следующий алгоритм их автоматизации. Отметим, что в его основу были заложены ранее предложенный способ компактного описания кристаллической решетки [1], а также общая идея метода Харрисона.

Во-первых, задаются элементарные матрицы-генераторы нечетных $Z_{\text{нечет}}$ и четных $Z_{\text{чет}}$ координационных слоев, отражающие расположение заряженных частиц в решетке конкретного типа, которые для рассматриваемых структур NaCl и CsCl имеют следующий вид:

$$Z_{\text{нечет}}^{\text{NaCl}} = \begin{vmatrix} -1 & +1 \\ +1 & -1 \end{vmatrix}, \quad Z_{\text{чет}}^{\text{NaCl}} = \begin{vmatrix} +1 & -1 \\ -1 & +1 \end{vmatrix};$$

$$Z_{\text{нечет}}^{\text{CsCl}} = \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}, \quad Z_{\text{чет}}^{\text{CsCl}} = \begin{vmatrix} +1 & 0 \\ 0 & 0 \end{vmatrix}.$$

Во-вторых, вводится значение L номера внешнего (предельного) координационного слоя, на основании которого формируются двумерные векторно-матричные модели Z_L и Z_{L-1} расположения зарядов исследуемой трехмерной кристаллической структуры вида (1).

В-третьих, на основании введенного значения L в автоматическом режиме формируются матрицы, эффективно характеризующие количество однотипных позиций пространственных узлов внешнего K_L и предшествующего ему K_{L-1} координационных слоев вида (2), обладающие размерами $L \times L$ и $(L-1) \times (L-1)$.

В-четвертых, посредством поэлементного умножения матриц Z_L на K_L и Z_{L-1} на K_{L-1} рассчитываются глобальные матрицы, соответственно внешнего M_L и предшествующего ему M_{L-1} координационных слоев.

В-пятых, учитывая перевод условной линейной величины межъядерного

расстояния конкретной кристаллической структуры к значению длины ребра a элементарного куба, определяется граничное условие метода Харрисона – радиус R ограничительной тонкой оболочки, с помощью формулы:

$$R = L \cdot k,$$

где k – коэффициент упомянутого перевода линейных величин, равный для решетки типа NaCl единице, а для решетки типа CsCl составляющий $3^{-0,5}$.

В-шестых, выполняется вычисление решеточных сумм для каждого из заданных координационных слоев, начиная с первого, матрицы которых формируются из глобальных матриц вида M_L или M_{L-1} , путем удаления необходимого количества их внутренних строк и столбцов. При этом применяется граничное условие метода Харрисона, проверяющее соотношение

$$k\sqrt{(i-1)^2 + (j-1)^2 + l^2} \leq R,$$

при выполнении которого подходящие элементы решетки учувствуют в расчете значения текущего члена ее ряда Маделунга, проводимого по формуле:

$$A_l = \sum_{j=l}^l \sum_{i=l}^l \frac{M_{i,j}}{k\sqrt{(i-1)^2 + (j-1)^2 + l^2}}.$$

В-седьмых, каждая из полученных решеточных сумм сохраняется в памяти ЭВМ для участия в определении итоговой величины постоянной Маделунга.

В-восьмых, посредством суммирования величин зарядов, находящихся внутри сферы радиуса R , включая заряд центрального иона, вычисляется величина компенсирующего заряда Q .

В-девятых, на базе сохраненных данных рассчитывается конечное значение постоянной Маделунга по формуле:

$$A_M = \sum_{l=1}^L A_l - \frac{Q}{R}.$$

Отметим, что предлагаемый алгоритм опирается на определение расстояний путем учета нумерации элементов матриц, отражающих заряды соответствующих частиц. Следовательно, его реализация подразумевает объективное сокращение массива непосредственно обрабатываемых данных, что приводит к существенному увеличению скорости производимых вычислений.

Результаты использования модифицированного метода расчета

Для проведения общей оценки эффективности предлагаемого алгоритма был разработан пробный вариант программы расчета постоянной Маделунга разбираемых структур, реализованный на макроязыке вычислительной среды MatLab, выбор которой обуславливался использованием векторно-матричных моделей, а также высоким быстродействием проводимых вычислений.

С помощью названного программного продукта был проведен предварительный вычислительный эксперимент, направленный на моделирование текущих значений членов рассматриваемых рядов Маделунга, а также их графический вывод, результаты которого представлены на рис. 4 и 5.

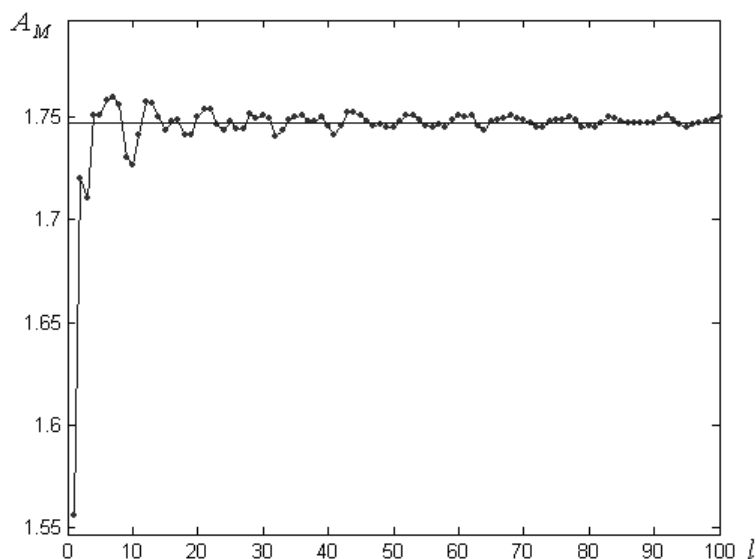


Рис. 4. Результаты расчетов постоянной Маделунга с помощью модифицированного метода Харрисона для решетки типа NaCl.

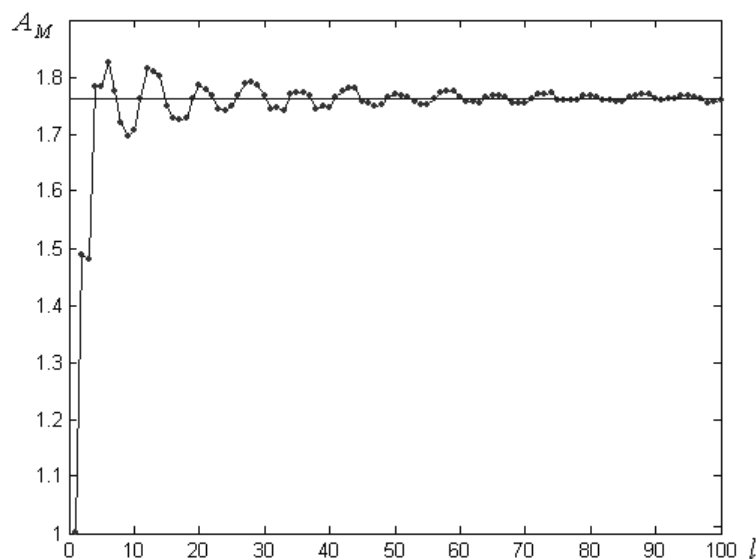


Рис. 5. Результаты расчетов постоянной Маделунга с помощью модифицированного метода Харрисона для решетки типа CsCl.

Анализ полученных результатов позволяет констатировать, что практическая реализация метода Харрисона действительно улучшает сходимость решеточных сумм, которые для прямого метода расчета оказываются расходящимися.

В свою очередь для выявления точности результатов разбираемых вычислений, а также оценки времени их производительности $t_{\text{раб}}$ был проведен дополнительный вычислительный эксперимент, заключающийся в использовании методов прямого расчета и Харрисона при рассмотрении больших количеств координационных слоев, включающих в себя весьма значительные числа частиц N .

Отметим, что для проведения разбираемого эксперимента из пробный вариант вышеуказанной программы был удален модуль графического вывода текущих значений. Кроме того, при реализации расчетов использовался компьютер, оснащенный процессором Intel Core 2 Duo CPU E4500, тактовая частота ядер которого составляет 2,20 и 2,21 ГГц, а объем ОЗУ – 3,24 Гб. Полученные результаты вычислительно эксперимента приведены в таблице.

	Кристаллическая решетка		Примечание
	структурный тип NaCl	структурный тип CsCl	
Метод прямого суммирования	$A_M = 1,74641104764260$ $t_{раб} = 42,2$ сек.	ряд расходится	$L = 500$ $N = 1\ 003\ 003\ 000$
	$A_M = 1,74698753289160$ $t_{раб} = 5$ мин 34,3 сек.	ряд расходится	$L = 1000$ $N = 8\ 012\ 006\ 000$
	$A_M = 1,74717982270106$ $t_{раб} = 19$ мин. 17,9 сек.	ряд расходится	$L = 1500$ $N = 27\ 027\ 009\ 000$
	$A_M = 1,74727599168323$ $t_{раб} = 44$ мин. 52,3 сек.	ряд расходится	$L = 2000$ $N = 64\ 048\ 012\ 000$
	$A_M = 1,74733370077907$ $t_{раб} = 1$ ч. 27 мин. 16,8 сек.	ряд расходится	$L = 2500$ $N = 125\ 075\ 015\ 000$
Метод Харрисона	$A_M = 1,74822296405540$ $t_{раб} = 1$ мин. 0,1 сек.	$A_M = 1,76344636372008$ $t_{раб} = 1$ мин. 0,4 сек.	$L = 500$ $N = 1\ 003\ 003\ 000$
	$A_M = 1,74793679225170$ $t_{раб} = 8$ мин 7,1 сек.	$A_M = 1,76190306809904$ $t_{раб} = 8$ мин 11,4 сек.	$L = 1000$ $N = 8\ 012\ 006\ 000$
	$A_M = 1,74790238753186$ $t_{раб} = 26$ мин. 16,2 сек.	$A_M = 1,76255923407786$ $t_{раб} = 26$ мин. 11,2 сек.	$L = 1500$ $N = 27\ 027\ 009\ 000$
	$A_M = 1,74764245654470$ $t_{раб} = 1$ ч. 02 мин. 13,8 сек.	$A_M = 1,76296658864009$ $t_{раб} = 1$ ч. 02 мин. 14,9 сек.	$L = 2000$ $N = 64\ 048\ 012\ 000$
	$A_M = 1,74758061114039$ $t_{раб} = 2$ ч. 01 мин. 36,8 сек.	$A_M = 1,76271905735291$ $t_{раб} = 2$ ч. 01 мин. 22,3 сек.	$L = 2500$ $N = 125\ 075\ 015\ 000$
Справочное значение	$A_M = 1,7476$	$A_M = 1,7627$	Лит. источник [5]

Сравнение представленных расчетных величин A_M со справочными значениями постоянной Маделунга позволяет сформулировать следующие выводы.

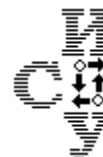
Во-первых, метод Харрисона оказывается весьма успешно применимым к определению величин постоянных Маделунга для обеих разновидностей рассмотренных кристаллических решеток, так как позволяют получить их расчетные значения, практически эквивалентные контрольным данным.

Во-вторых, практическое применение метода Харрисона увеличивает скорость схождения решеточных сумм структуры NaCl по отношению к использованию прямого метода их расчета, а также полностью обеспечивает необходимую точность производимых вычислений.

В-третьих, несмотря на то, что машинная реализация алгоритма прямого метода расчета постоянной Маделунга оказывается быстрее использования модифицированного алгоритма метода Харрисона, последний является более выигрышным в силу вышеназванного обстоятельства.

Заключение

Основываясь на результатах проведенного исследования, можно резюмировать, что предлагаемый алгоритм автоматизации метода Харрисона предоставляет возможность практического расчета значений постоянной Маделунга, не только для кристаллических решеток, имеющих нулевой дипольный момент, но и обладающих нескомпенсированным зарядом. При этом экспериментальная компьютерная программа, разработанная на базе представленного алгоритма, реализо-



ванного в совокупности с методом компактного векторно-матричного описания кристаллической решетки [1], обладает весьма неплохими эксплуатационными характеристиками. Кроме того, ее дальнейшая модификация может позволить унифицировать рассмотрение любых кристаллических решеток за счет формирования элементарных матриц, адекватно характеризующих расположения заряженных частиц в структуре их элементарных ячеек.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Еремин И.Е., Сычев М.С.* Модифицированный алгоритм прямого расчета постоянной Маделунга // Информатика и системы управления. – 2010. – № 3(25). – С. 27-34.
2. *Madelung E.* Das elektrische Feld in Systemen von regelmäÙig angeordneten Punktladungen // Phys. Zs. XIX. – 1918. – № 1. – S. 524–533.
3. *Wermuth P.H.* Handbook of Pharmaceutical Salts: Properties, Selection and Use. – Wiley VCN: Zurich, 2002.
4. *Harrison W.A.* Simple calculation of Madelung constant // Physical Review B. – 2006. – Vol. 73. – P. 212103.
5. *Куттель Ч.* Введение в физику твердого тела. – М.: Наука, 1978.

Статья представлена к публикации членом редколлегии А.Д. Плутенко.

E-mail:

Еремин И.Е. – marinecops@mail.ru;

Сычев М.С. – sychidze@yandex.ru

УДК 51-76: 314

© 2010 г. **Г.П. Неверова**

(Институт комплексного анализа региональных проблем ДВО РАН, Биробиджан)

ПРИМЕНЕНИЕ ДВУХКОМПОНЕНТНОЙ МОДЕЛИ К ОПИСАНИЮ ДЕМОГРАФИЧЕСКОЙ ДИНАМИКИ¹

Простая по структуре популяционная модель, обладающая большим спектром динамических режимов, применена для описания и анализа некоторых особенностей демографической динамики региона (Еврейская автономная область). Процесс рождаемости считается нелинейным. Проведено аналитическое исследование модели. На основе точечных оценок параметров модели выделены существующие тенденции процесса воспроизводства в области.

Ключевые слова: модели популяционной динамики, демографические процессы, возрастная структура, устойчивость, динамические режимы.

¹ Работа поддержана грантами РГНФ (проекты № 09-02-88202а/Г, 09-02-88201а/Г) и грантами ДВО РАН (09-III-A-09-498, 10-III-B-01M-005).