

атомной ван-дер-ваальсовой жидкости решают след. ур-ния:

$$dx_i^{(k)} / dt = p_i^{(k)} / m_i, \quad dp_i^{(k)} / dt = -\partial U / \partial x_i^{(k)}; \quad (1)$$

$$k = 1, 2, 3; \quad i = 1, \dots, N; \quad 0 \leq t \leq t_{\max}$$

$x_i^{(k)}$  и  $p_i^{(k)}$  —  $k$ -я координата и импульс  $i$ -й молекулы, а

$$U \equiv U(x_i^{(k)}) = (1/2) \sum_{i \neq j} U_{ij} - \quad (2)$$

потенц. энергия системы  $N$  молекул,  $U_{ij}$  — потенциал взаимодействия  $i$ -й и  $j$ -й молекул, зависящий только от расстояния между ними,  $m_i$  — масса  $i$ -й молекулы,  $t$  — время) с нач. условиями

$$x_i^{(k)}(t=0) = x_{i0}^{(k)}; \quad p_i^{(k)}(t=0) = p_{i0}^{(k)}. \quad (3)$$

Если рассматриваемая система  $N$  частиц является частью макроскопич. изотропной системы, то обычно используют периодич. граничные условия, т. е. рассматривают  $N$  частиц в ограниченном объёме,  $k$ -ый, периодически повторяясь, заполняет всё пространство. При  $N \geq 3$  и обычно используемых межмолекулярных потенциалах аналитич. решение задачи (1) — (3) невозможно, поэтому вычисляют дискретное отображение фазовой траектории системы через нек-рые, обычно равные промежутки времени  $\Delta t$  (шаг по времени) с помощью численной схемы, связывающей значения координат и импульсов молекул в разл. последовательные моменты времени. Численная схема строится так, чтобы при  $\Delta t \rightarrow 0$  вычисленные отображения сходились к точным решениям.

Чтобы проследить за движением молекул на промежутке времени  $0 \leq t \leq t_{\max}$ , следует задать нач. положения и импульсы частиц (3). По смыслу задачи они обычно не заданы, и их следует выбирать так, чтобы ответ существенно не зависел от привнесённого ими произвола, а средние по времени устанавливались с ростом  $t_{\max}$  по возможности быстрее. Т. о., вариации нач. данных и  $t_{\max}$  — обязательный элемент М. д. м. Однако никаких строгих правил их выбора нет. В задаче подобного типа обычно оказывается достаточной нач. расстановка частиц в виде правильной решётки, т. к. уже через неск. сотен шагов  $\Delta t$  этот порядок полностью исчезает. Если же нач. скорости взять излишне упорядоченными, то могут возникнуть процессы (типа столкновения пучков), сильно затягивающие переход к термодинамич. равновесию, что требует больших  $t_{\max}$ . Поэтому нач. скорости задают случайным образом.

Выбор величины шага  $\Delta t$  основан на неск. соображениях: необходимо, чтобы  $\Delta t$  был на неск. порядков меньше периода колебаний атомов  $\tau_0$ . Более точно  $\Delta t$  подбирают в зависимости от используемой числ. схемы, типа ЭВМ, конкретного вида межмолекулярного потенциала, полной энергии и требуемой точности вычисляемых средних.

Обычно изучают замкнутые системы, в к-рых полная энергия сохраняется, а темп-ру  $T$  определяют по ср. кинетич. энергии системы:

$$K = t_{\max}^{-1} \int_0^{t_{\max}} \mathcal{E}_{кин}(t) dt = 3NkT/2.$$

Даже для небольших  $N$  и «хороших» нач. условий величина  $K$  существует и устанавливается со скоростью  $\sim t_{\max}^{-1/2}$  характерной для эргодич. систем. Распределение по импульсам оказывается биномиальным (из-за ограниченности полной энергии), т. е. лишь при  $N \rightarrow \infty$  стремится к максвелловскому. Всё это служит основанием для применения понятия темп-ры к системе, подчиняющейся микроканонич. распределению. Введение к.-л. метрики в фазовом пространстве позволяет опре-

делить и энтропию такой системы. Вычисление давления основано на применении *теоремы*, требует эргодичности системы и предполагает близость средних по микроканонич. ансамблю к средним по канонич. ансамблю Гиббса, что имеет место при  $N \rightarrow \infty$ .

Такого рода поведение *динамических систем* наз. стохастичностью. Осн. механизм, вызывающий появление стохастичности, — неустойчивость движения, приводящая к расходимости (обычно экспоненциальной) близких фазовых траекторий и явлению перемешивания, к-рое приводит к эргодичности. В М. д. м., к-рый применяют для исследования конденсир. систем, всегда имеют дело с неустойчивостью и стохастичностью. С одной стороны, это оправдывает применение М. д. м. для термодинамич. исследований, а с другой — означает, что точное вычисление траекторий, по-видимому, в принципе невозможно. Однако возможно приближённое вычисление дискретных отображений этих траекторий с наперёд заданной точностью при заданных  $t_{\max}$ .

При разработке конкретного М. д. м. необходимо обратить внимание на то, как алгоритм передаёт нек-рые важные свойства имитируемой динамич. системы, напр. сохранение интегралов движения. Полная энергия консервативной динамич. системы  $\mathcal{E}_{полн}$  должна сохраняться. Легко построить М. д. м., в к-рых  $\mathcal{E}_{полн}$  сохраняется автоматически. Однако обычные алгоритмы интегрирования дифференц. ур-ний приводят к зависимости  $\mathcal{E}_{полн}(t, \Delta t)$ , к-рая служит для грубого контроля за правильностью вычислений. Несохранение  $\mathcal{E}_{полн}$  свидетельствует либо об ошибке в выборе  $\Delta t$ , либо о непригодности численной схемы. В нестационарных задачах М. д. м. этот критерий вообще бесполезен. Если в рассматриваемой системе интегралом движения является импульс, то М. д. м. обычно автоматически сохраняет эту величину, т. к. при вычислении межмолекулярных сил явно используется третий закон Ньютона.

Др. важное свойство траекторий динамич. систем — обратимость во времени — также может быть выполнено автоматически в М. д. м. Т. о., легко убедиться, что в М. д. м. проблемы стохастичности динамич. систем и обратимости ур-ний механики во времени никак не связаны между собой. Описанный метод замкнут, ибо его основания и результаты можно проверить внутр. образом, в рамках самого этого подхода.

Другие М. д. м. Объект исследования М. д. м. — движение всех частиц системы. Во мн. случаях интерес представляет движение лишь нек-рых сортов частиц (напр., в растворах полимеров, в коллоидных растворах). Эту задачу решает разновидность М. д. м. — броуновская (ланжевеновская) динамика. Суть этого метода состоит в численном интегрировании системы *Ланжевена уравнений*, описывающих движение взаимодействующих броуновских частиц и моделирующих взаимодействие броуновских частиц с окружающей средой (напр., с растворителем). Эти ур-ния отличаются от ур-ний Ньютона тем, что их правая часть содержит случайную силу со спектром белого шума и силу трения, пропорциональную скорости частицы. Случайные силы и компоненты тензора трения можно детально изучить с помощью М. д. м., описанного ранее. Т. о., оба М. д. м., применяемые вместе, составляют замкнутый аппарат.

Следующая разновидность М. д. м. основана на изучении динамики  $\phi$ -ций распределения координат и импульсов, а не отд. частиц. Это динамич. методы Монте-Карло, суть к-рых состоит в численном интегрировании *кинетических уравнений Больцмана* (Ландау, Власова, Фоккера — Планка, Колмогорова, Смолуховского), основного кинетич. ур-ния, стохастич. ур-ния Лиувилля и т. д. Кинетич. коэффициенты и нек-рые важные свойства  $\phi$ -ций распределения можно получить при помощи описанного выше М. д. м.

Применения М. д. м. Большое число работ посвящено изучению жидкости, в частности модели из твёрдых шаров. Удалось обнаружить фазовый переход типа