

И. С. Михайлов, В. Л. Леонтьев (Ульяновск, УлГУ). **Об использовании ортогональных функций с компактными носителями в математическом моделировании нанобъектов.**

Математическое моделирование сил межатомного взаимодействия и химических связей в молекулярной механике осуществляется посредством полуэмпирических и эмпирических межатомных потенциалов. Здесь для математического моделирования взаимодействия атомов нанобъектов предлагается использование ортогональных функций с компактными носителями (ОФФ) [1]. Скалярное произведение двух соседних сеточных ОФФ [1, с. 13]

$$\varphi_i(x) = \begin{cases} (\sqrt{2} - 1)(x_{i-1} - x)/h, & x \in [x_{i-1}, x_{i-1} + h/2], \\ (\sqrt{2} + 1)(x - x_i)/h + 1, & x \in [x_{i-1} + h/2, x_i], \\ (\sqrt{2} - 1)(x - x_i)/h + 1, & x \in [x_i, x_i + h/2], \\ (\sqrt{2} + 1)(x_{i+1} - x)/h, & x \in [x_i + h/2, x_{i+1}], \\ 0, & x \notin [x_{i-1}, x_{i+1}], \end{cases}$$

(x_i — узлы сетки, h — шаг сетки) и $\varphi_{i+1}(x)$ равно нулю, что соответствует равновесному положению двух соседних атомов в исследуемом нанобъекте. При смещении центра ОФФ $\varphi_{i+1}(x)$ соответствующего положению второго атома, от фиксированного x_{i+1} (положения равновесия второго атома) в направлении центра x_i ОФФ $\varphi_i(x)$, соответствующего положению равновесия первого атома, величина интеграла — скалярного произведения функций $\varphi_i(x)$ и $\varphi_{i+1}(x)$ монотонно возрастает от нулевого значения до величины интеграла функции $\varphi_i^2(x)$, взятого по всей области конечного носителя. При смещении центра ОФФ $\varphi_{i+1}(x)$ из равновесного положения x_{i+1} второго атома в направлении от центра x_i ОФФ $\varphi_i(x)$ величина интеграла — скалярного произведения функций $\varphi_i(x)$ и $\varphi_{i+1}(x)$ принимает отрицательные значения, вначале возрастая по модулю, а затем уменьшаясь по модулю до нулевого значения. Такая зависимость величины интеграла — скалярного произведения функций $\varphi_i(x)$ и $\varphi_{i+1}(x)$ от расстояния между центрами подвижных ОФФ $\varphi_i(x)$ и $\varphi_{i+1}(x)$ соответствует известной эмпирической зависимости силы межатомного взаимодействия и поэтому может быть использована для построения математических моделей нанобъектов, в которых каждому отдельному атому соответствует одна подвижная сеточная ОФФ (сама сетка при этом не меняется).

Использование ортогональных функций с компактными носителями для моделирования сил межатомного взаимодействия и межатомных связей предложено В. Л. Леонтьевым. Количественное исследование зависимости величины интеграла — скалярного произведения функций $\varphi_i(x)$ и $\varphi_{i+1}(x)$ от расстояния между центрами ОФФ $\varphi_i(x)$ и $\varphi_{i+1}(x)$ проведено И. С. Михайловым. Анализ полученных положительных результатов проводился совместно.

Работа выполнена при поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России», ГК N02.740.11.0610, ГК НП1122.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Леонтьев В. Л.* Ортогональные финитные функции и численные методы. Ульяновск: УлГУ, 2003, 178 с.