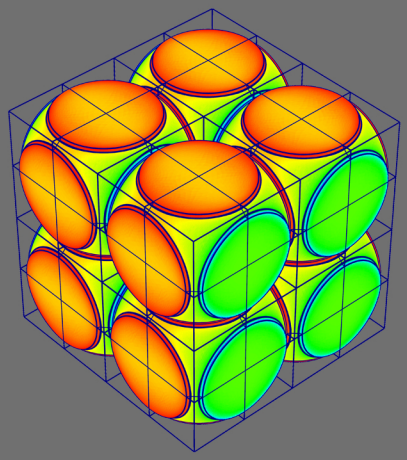
ISSN 2309-3684



Математическое моделирование и численные методы

И.К. Краснов, Т.Ю. Мозжорина, А.Н. Баланин Численное моделирование перестройки наноструктуры сплавов методами молекулярной динамики. Математическое моделирование и численные методы, 2017, № 4, с. 3–19.

Источник: https://mmcm.bmstu.ru/articles/146/

Параметры загрузки:
IP: 216.73.216.24
17.11.2026 03:53:43

УДК 519.62+539.21 DOI 10.18698/2309-3684-2017-4-316

Численное моделирование перестройки наноструктуры сплавов методами молекулярной динамики

© И.К. Краснов, Т.Ю. Мозжорина, А.Н. Баланин

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, 105005, Россия

Представлена математическая модель динамики перестройки структуры наночастиц сплавов после мгновенного термического воздействия (нагрева или охлаждения). Модель основана на использовании метода молекулярной динамики многокомпонентных сплавов с атомными потенциалами Леннарда-Джонса и Морзе, а также начальных условий мгновенного расширения или сжатия правильной кристаллической структуры наночастицы сплава. Численно исследованы закономерности перестройки начально правильной атомной структуры наночастицы во времени. Показано, что в зависимости от числа атомов в наночастице возможны различные конечные установившиеся формы наноструктуры сплавов, как аморфные, так и новые кристаллические структуры, отличающиеся от исходной кристаллической наноструктуры сплава. Приведены численные результаты для наночастиц титана и сплава титана с никелем (нитинола).

Ключевые слова: *метод молекулярной динамики, наноструктура, перестройка структуры, сплавы, кристаллическая структура, численное моделирование, атомные потенциалы*

Введение. Математическое моделирование нашло широкое применение при проектировании композиционных материалов и создании образцов новой техники. В первую очередь исследования подобного рода проводятся с применением теории молекулярной динамики (МД). Основные теоретические положения МД и ее применения в исследовании свойств материалов можно найти в отечественной [1–7] и зарубежной литературе [8–13]. Вычислительным экспериментам в данной области посвящены также современные труды [14–19].

Варьируемыми параметрами при разработке нанокомпозитов являются размеры и форма включений, их физико-механические характеристики и геометрия расположения в матрице. Размер и форма наночастицы оказывает существенное влияние на такие физико-механические свойства нанокомпозитов, как модуль упругости, предел прочности и др. Однако экспериментальное определение данных величин представляет сложную и трудоемкую задачу вследствие малой размерности исследуемых объектов и необходимости проведения многовариантных экспериментов.

Кроме того, известные опытные данные противоречивы. К примеру, в одних работах наблюдается уменьшение расстояния между атомами в наночастице по мере удаления от центра наночастицы, а в дру-

гих — ее рост [14]. В то же время опыт применения результатов квантово-механических и молекулярно-динамических расчетов показывает, что их экспериментальная проверка не всегда обязательна [6]. В связи с этим представляется актуальным исследование вопросов зарождения, формирования и перестройки атомных структур сплавов теоретическими методами, т. е. методами математического моделирования. В настоящей статье методами молекулярной динамики исследованы особенности зарождения, перестройки и образования устойчивых структур наночастиц, свободных от внешних воздействий.

Постановка задачи и методика моделирования. Задача исследования процесса формирования равновесной конфигурации (формы) свободной от взаимодействия отдельной наночастицы методом МД включает следующие этапы:

1) определение системы дифференциальных уравнений и задание начальных условий для них;

2) выбор численного метода решения полученной системы и реализация выбранного метода в виде комплекса программ;

3) расчет термодинамических параметров для равновесных конфигураций наночастицы и визуализация полученных результатов.

Атомистическое моделирование основано на математическом описании взаимодействия между атомами. При моделировании методом МД взаимодействия можно описать с помощью потенциальной функции $U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N)$, определяющей зависимость потенциальной энергии системы из N молекул (атомов) от их координат. Здесь $\vec{r}_i$ — радиус-вектор *i*-го атома, если начало координат находится в центре наночастицы. Силы, действующие на *i*-й атом, вычисляются из потенциала

$$\vec{F}_i = -\frac{\partial U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N)}{\partial \vec{r}_i} \equiv -\nabla_i U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N). \qquad (1)$$

Наиболее простой вид межатомных потенциалов — парные потенциалы, не имеющие квантово-механического обоснования и являющиеся эмпирическими величинами. Параметры, входящие в состав потенциалов, выбираются таким образом, чтобы потенциалы правильно описывали некоторые свойства вещества. В приближении парных потенциалов энергия системы частиц представляется в виде суммы потенциальных энергий взаимодействия всех пар атомов:

$$U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1(j\neq i)}^{N} U(r_{ij}), \qquad (2)$$

где $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ — расстояние между атомами пары *i–j*; $U(r_{ij})$ — парный потенциал для пары атомов *i–j*.

Наиболее часто применяемы в численных экспериментах подобного рода парные потенциалы Леннарда-Джонса и Морзе.

Потенциал Леннарда-Джонса имеет функциональный вид

$$U(r_{ij}) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{6}\right], \tag{3}$$

где σ и ε — постоянные коэффициенты, характерные для конкретного материала и имеющие размерности длины и энергии соответственно.

Расстояние между атомами, при котором этот потенциал достигает минимального значения, составляет $r_{\min} = 1,22\,\sigma,$ а минимальное значение потенциала $U_{\min} = -\varepsilon.$ Член, обратно пропорциональный 12-й степени расстояния, описывает отталкивание на близких расстояниях. Отталкивания возникают, когда электронные оболочки атомов начинают перекрываться, при этом энергия системы резко возрастает. Член, обратно пропорциональный шестой степени расстояния, моделирует притяжение на больших расстояниях, связанное с дипольдипольным взаимодействием. Постоянные коэффициенты ε и σ определяются эмпирическим путем для обеспечения равенства глубины минимума потенциала и энергии связи металла ε_0. Положение минимума потенциала должно соответствовать равновесному расстоянию между атомами.

При моделировании металлов потенциал Леннарда-Джонса не пригоден для получения количественных данных, однако ввиду своей простоты он широко используется в случаях, когда целью моделирования является изучение качественных закономерностей, общих явлений, а не получение конкретных данных.

Потенциал Морзе имеет форму

$$U(r_{ij}) = \varepsilon\left[e^{-2\alpha(r_{ij}-r_0)} - 2e^{-\alpha(r_{ij}-r_0)}\right], \tag{4}$$

где α, ε, r_0 — эмпирически подбираемые коэффициенты, позволяющие уточнять потенциал, энергию связи, модуль всестороннего сжатия и параметр решетки, характерные для определенного материала.

Потенциал Морзе часто используется для моделирования свойств металлов.

При моделировании бинарных сплавов, состоящих из атомов A и B, вместо функции $U(r_{ij})$, характеризующей взаимодействие двух атомов одного сорта, необходима функция, описывающая взаимодействие каждого типа пар атомов. В бинарном сплаве, состоящем из

атомов A и B, необходимо моделировать три функции U_{AA}, U_{BB} и U_{AB}, описывающие взаимодействие между различными типами атомов. В настоящей статье выражения этих функций использовались такие же, как в традиционных потенциалах, например, потенциал Морзе для сплавов имеет вид

$$U_{KL}(r) = \varepsilon_{KL}\left[e^{-2\alpha_{KL}r} - 2e^{-\alpha_{KL}r}\right]. \quad (5)$$

Здесь пара KL принимает значения AA, BB, AB. Эмпирические коэффициенты в этом случае подбираются такими, чтобы обеспечить выполнение свойств сплавов.

В работе используется классический метод МД, согласно которому решается система уравнений второго закона Ньютона

$$m_i\vec{a}_i = \vec{F}_i, \quad (6)$$

где m_i, $\vec{a}_i = d^2\vec{r}_i / dt^2$ — масса и ускорение i-й частицы (атома или молекулы) соответственно; $\vec{F}_i = -\nabla_i U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N)$ — сила, действующая на i-ю частицу.

Метод МД является детерминистическим.

Для составления и решения уравнений движения атомов необходимо рассчитывать силы, действующие на них:

$$\vec{F}_i = -\frac{\partial U(\vec{r}_1, ..., \vec{r}_N)}{\partial \vec{r}_i} = -\nabla_i U(\vec{r}_1, ..., \vec{r}_N) = \sum_{i \neq j} \vec{f}_{ij}. \quad (7)$$

В настоящей работе при моделировании с помощью классического метода МД используются парные потенциалы вида (2), (3). Тогда для потенциала Леннарда-Джонса

$$\left|\vec{f}_{ij}\right| = 24\varepsilon\left[\frac{2\sigma^{12}}{r_{ij}^{13}} - \frac{\sigma^6}{r_{ij}^7}\right] \quad (8)$$

и для потенциала Морзе

$$\left|\vec{f}_{ij}\right| = 2\alpha \cdot \varepsilon\left[e^{-2\alpha(r_{ij}-r_0)} - e^{-\alpha(r_{ij}-r_0)}\right]. \quad (9)$$

Для интегрирования уравнений в данной статье использован скоростной алгоритм Верле, описанный в работе [1], позволяющий рассчитывать радиус-векторы и скорости частиц по формулам:

$$\vec{r}(t+\Delta t) = \vec{r}(t) + \vec{v}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\vec{a}(t)\Delta t^2; \quad (10)$$

$$\vec{v}\left(t+\Delta t/2\right)=\vec{v}(t)+\vec{a}(t)\Delta t/2\,. \qquad (11)$$

Здесь t — время; Δt — приращение времени или шаг по времени; $\vec{v}$ — скорость.

Результаты моделирования. Моделирование проводилось для разного количества атомов в наночастицах титана, а также сплава никеля и титана (нитинола).

Сначала рассмотрим случай частицы титана, состоящей из 1000 атомов. В начальный момент времени было принято, что начальные скорости атомов $v_{i0}=0,\ x_{i0}=0,95x_{i0},\ a=2,74\text{Å}$. Начальные координаты задавались для кристалла с изначально сжатой (на 5 %) примитивной кубической кристаллической решеткой и параметром решетки (межатомным расстоянием) a. Для вычисления потенциальной энергии межатомного взаимодействия использовался потенциал Леннарда-Джонса с параметрами: $\sigma=2,58\text{Å},\ \varepsilon=4,85$ эВ. Первоначальный объем частицы 20,3 нм^3, шаг по времени $\Delta t=10^{-14}$, выполнено 600 итераций.

На рис. 1 и 2 показана эволюция системы от начального состояния к конечному. Можно сделать вывод о том, что кристаллическая структура становится похожей на простую гексагональную кристаллическую решетку. На рис. 3–5 приведены результаты расчетов для наночастицы титана, состоящей из 1000 атомов.

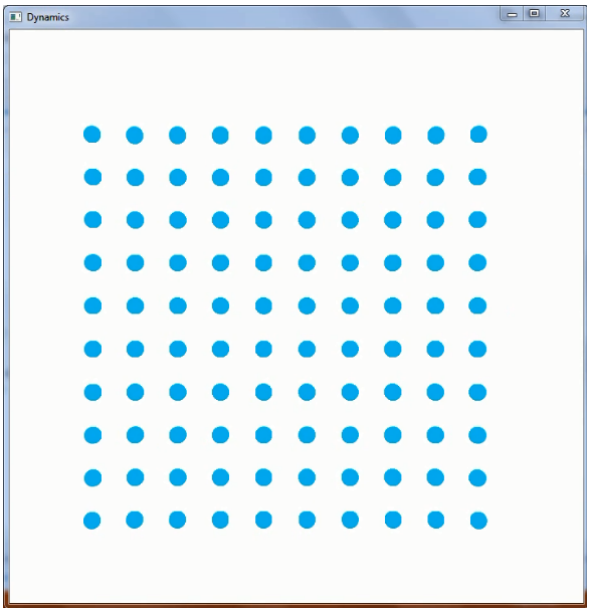


Рис. 1. Начальная кристаллическая структура наночастицы титана

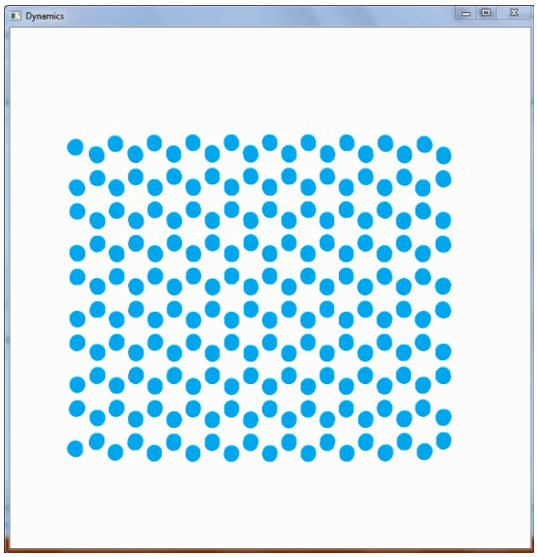


Рис. 2. Конечная форма наночастицы титана после завершения перестройки структуры

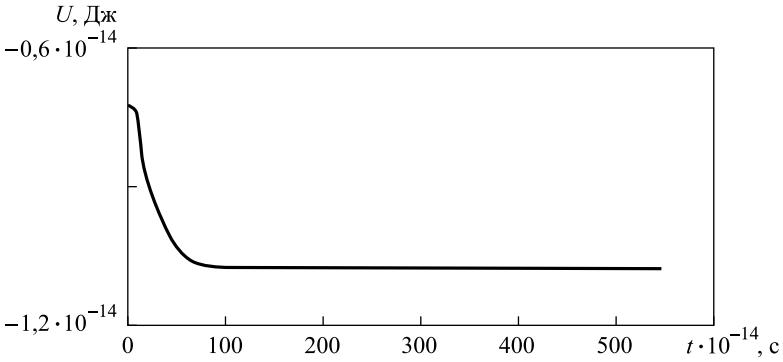


Рис. 3. Изменение во времени потенциальной энергии наночастицы титана в процессе перестройки структуры

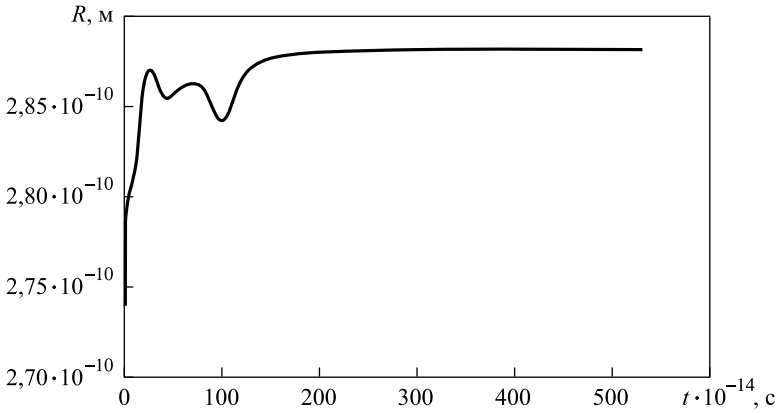


Рис. 4. Изменение во времени расстояния между двумя атомами в наночастице титана

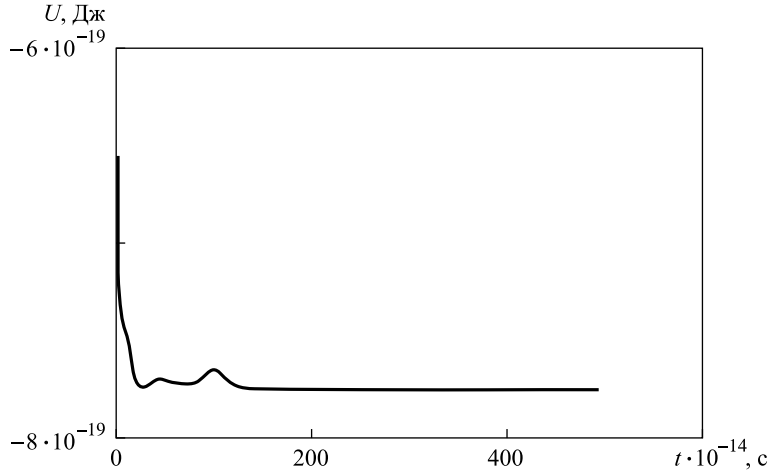


Рис. 5. Изменение во времени потенциала Леннарда-Джонса между двумя атомами в наночастице титана

Рассмотрим теперь случай частицы нитинола, состоящей из 1000 атомов. Пусть начальные скорости атомов $v_{i0} = 0,$ начальные координаты зададим для кристалла с исходно расширенной (на 5 %) примитивной кубической решеткой $x_{i0} = 1,05x_{i0}$ и параметром решетки (межатомным расстоянием) $a = 2,9\text{Å}.$

Потенциал Морзе в случае сплава будем рассчитывать как $U_{KL}(r_{ij}) = \varepsilon_{KL}\left[e^{-2\alpha_{KL}(r_{ij}-r_{0KL})} - 2e^{-\alpha_{KL}(r_{ij}-r_{0KL})}\right]$. Для этого используем следующие параметры:

$$\varepsilon_{NiNi} = 4,2 \text{ эВ}, \ \alpha_{NiNi} = 1,42\text{Å}^{-1}, \ r_{0NiNi} = 2,78\text{Å},$$

$$\varepsilon_{TiTi} = 4,85 \text{ эВ}, \ \alpha_{TiTi} = 1,18\text{Å}^{-1}, \ r_{0TiTi} = 2,89\text{Å},$$

$$\varepsilon_{NiTi} = \frac{\varepsilon_{NiNi} + \varepsilon_{TiTi}}{2} = 4,525 \text{ эВ}, \ \alpha_{NiTi} = \frac{\alpha_{NiNi} + \alpha_{TiTi}}{2} = 1,3\text{Å}^{-1},$$

$$r_{0NiTi} = \frac{r_{0NiNi} + r_{0TiTi}}{2} = 2,83 \text{ эВ}, \ \alpha_{NiTi} = \frac{\alpha_{NiNi} + \alpha_{TiTi}}{2} = 1,3\text{Å}^{-1},$$

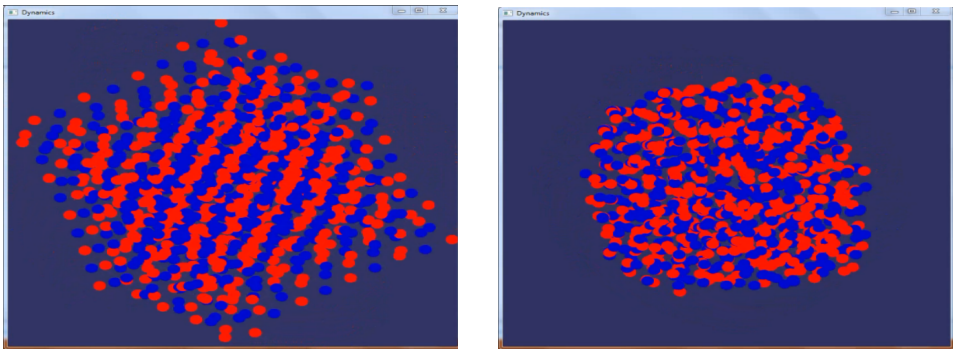
$$r_{0NiTi} = \frac{r_{0NiNi} + r_{0TiTi}}{2} = 2,83\text{Å}.$$

Первоначальный объем частицы $24,4$ нм^3, шаг по времени $\Delta t = 10^{-14},$ выполнено 2960 итераций.

На рис. 6 показана эволюция наночастицы нитинола. Видно, что начальная кристаллическая атомная структура наночастицы полностью перестраивается в некристаллическую, а ее форма приближает-

ся к шаровой, т. е. для данного количества атомов наблюдается некоторая аморфность.

На рис. 7 продемонстрирована динамика изменения расстояния между первым и 901-м атомами.



а *б*

Рис. 6. Эволюция наночастицы нитинола:
а — начальная форма; *б* — конечная форма

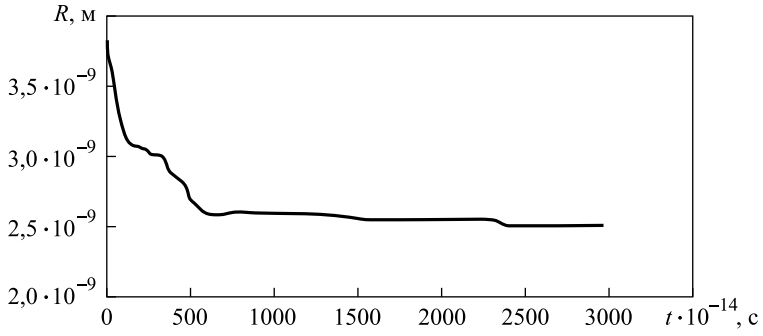


Рис. 7. Изменения во времени межатомного расстояния R
в наночастице нитинола в процессе перестройки структуры

Рассмотрим случай частицы нитинола, состоящей из 2744 атомов.

Начальные скорости всех атомов равны нулю, начальные координаты заданы для кристалла с мгновенно расширенной на 5 % примитивной кубической кристаллической решеткой и параметром a решетки (межатомным расстоянием): $v_{i0} = 0,\ \ x_{i0} = 1,05x_{i0}^k,\ \ a = 2,9\text{Å}.$

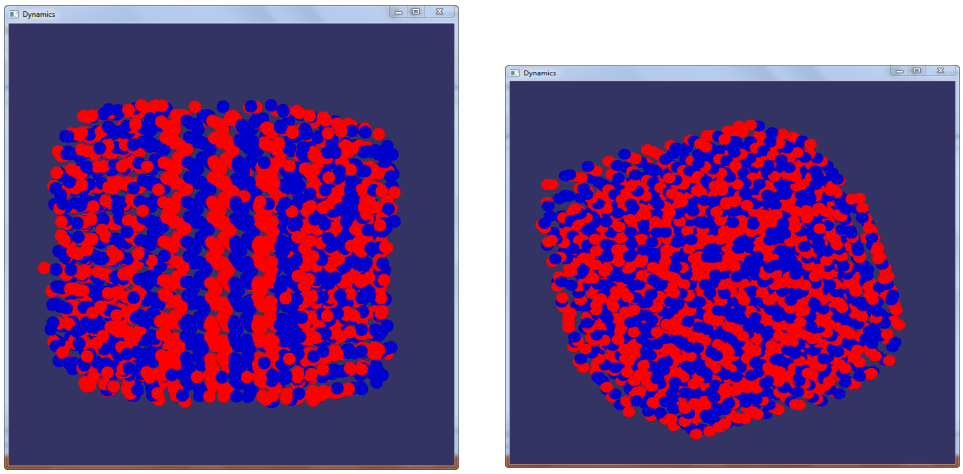
Потенциал Морзе для сплава будем рассчитывать по формуле

$$U_{KL}(r_{ij}) = \varepsilon_{KL}\left[e^{-2\alpha_{KL}(r_{ij}-r_{0KL})} - 2e^{-\alpha_{KL}(r_{ij}-r_{0KL})}\right].$$

Расчетные параметры (ε_{NiNi}, ε_{TiTi}, ε_{TiNi} и т. п.) были выбраны такими же, как и для наночастицы из 1000 атомов. Первоначальный объем

частицы 66,9 нм^3, шаг по времени $\Delta t = 10^{-14}$, выполнено 3000 итераций.

На рис. 8 так же, как и на рис. 6, видно, что начальная кристаллическая атомная структура наночастицы полностью перестраивается в некристаллическую, а ее форма приближается к шаровой. С увеличением количества атомов в частице уменьшается аморфность и кристаллическая структура становится более четкой.



а *б*

Рис. 8. Результат перестроения атомной структуры наночастицы нитинола: *а* — начальное положение атомов; *б* — устоявшееся положение атомов

График скорости первого атома представлен на рис. 9. На рис. 10 отражено изменение потенциала Морзе между первым и 2549-м атомами. Согласно приведенным графикам, можно заключить, что с уменьшением потенциала растет скорость. Это позволяет говорить о постоянстве полной энергии системы: $E = U + K$, где K — кинетическая энергия, E, U — полная и потенциальная энергия соответственно.

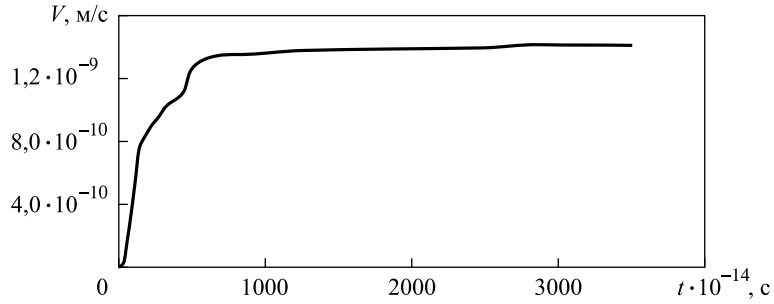


Рис. 9. Скорость V атома в зависимости от времени t

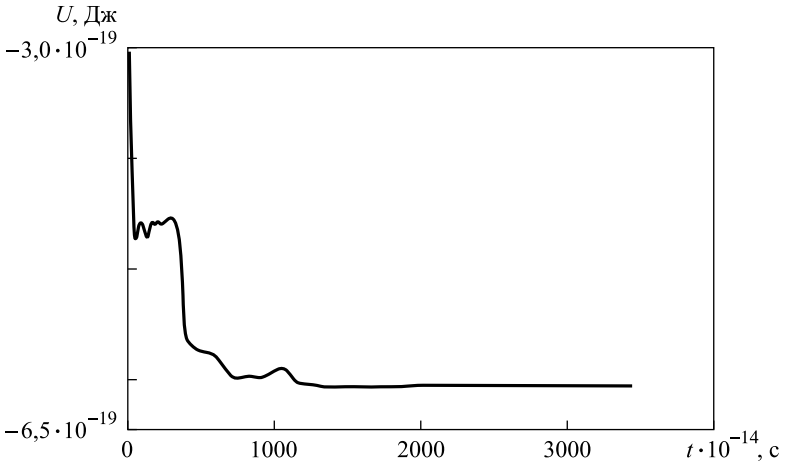


Рис. 10. Потенциал Морзе для двух атомов (между первым и 2549-м)

Заключение. Одним из ключевых этапов при создании порошковых нанокомпозитов является построение зависимости структуры и формы наночастиц, создающих основу композита, от их размеров. При увеличении или уменьшении характерного размера наночастицы могут изменяться физико-механические характеристики разрабатываемых композитных материалов — модуль упругости, прочность, деформационные и другие параметры. В связи с этим важно создавать численные методы расчета структуры наночастиц, позволяющие в дальнейшем определять характеристики новых композитных материалов. Данная работа является первым шагом в решении указанных задач.

По результатам численного эксперимента динамики перестройки атомов в сплавах металлов можно сделать следующие выводы:

- количество атомов, входящих в наночастицу, определяет ее форму;
- при увеличении числа атомов происходит постепенный переход от шарообразной формы наночастицы к кристаллической;
- время установления равновесного состояния увеличивается с ростом числа атомов;
- расстояние между атомами увеличивается по мере удаления от центра наночастицы.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Назаров А.А., Мулюков Р.Р. *Атомистическое моделирование материалов, наноструктур и процессов нанотехнологии*. Уфа, РИО БашГУ, 2010, 156 с.

[2] Красильников М.П. Потенциал Морзе в имитационной решеточной модели релаксации металлической наночастицы. *Вестник Томского государственного педагогического университета*, 2013, № 8 (136), с. 170–174.

[3] Гуртов В.А., Осауленко Р.Н. *Физика твердого тела для инженеров.* Москва, Техносфера, 2007, 300 с.

[4] Норман Г.Э., Стегайлов В.В. Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики. *Математическое моделирование*, 2012, т. 24, № 6, с. 3–44.

[5] Гордиенко А.Б., Кособуцкий А.В. *Физика конденсированного состояния. Решение задач.* Кемерово, Кемеровский государственный университет, 2011, 92 с.

[6] Ибрагимов И.М., Ковшов А.И., Назаров Ю.Ф. *Основы компьютерного моделирования наносистем*. Санкт-Петербург, Лань, 2010, 384 с.

[7] Аксенова Е.В., Кшевецкий М.С. *Вычислительные методы исследования молекулярной динамики*. Санкт-Петербург, СПбГУ, 2009, 50 с.

[8] Alder B.J., Wainwright T.E. Phase transition for a hard sphere system. *Journal of Chemical Physics*, 1957, vol. 37, pp. 1208–1209.

[9] Alder B.J., Wainwright T.E. Studies in molecular dynamics. I. General method. *Journal of Chemical Physics*, 1959, vol. 31, no. 2, pp. 459–466.

[10] Gibson J.B., Goland A.N., Milgram M., Vineyard G.H. Dynamics of radiation damage. *Physical Review*, 1960, vol. 120, pp. 1229–1253. URL: https://doi.org/10.1103/PhysRev.120.1229 (дата обращения 23.12.2017).

[11] Rahman A. Correlations in the motion of atoms in liquid argon. *Physical Review*, 1964, vol. 136, pp. A405–A411.

[12] Kadau K., Germann T.C., Lomdahl P.S. Large-scale molecular-dynamics simulation of 19 billion particles. *International Journal of Modern Physics C*, 2004, vol. 15, iss. 1, pp. 193–201.

[13] Germann T.C., Kadau K. Trillion-atom molecular dynamics becomes a reality. *International Journal of Modern Physics C*, 2008, vol. 19, no. 9, pp. 1315–1319.

[14] Вахрушев А.В., Липанов А.М. Численный анализ атомной структуры и формы металлических наночастиц. *Вычислительная математика и математическая физика*, 2006, т. 47, № 10, с. 1774–1783.

[15] Димитриенко Ю.И., Губарева Е.А., Сборщиков С.В., Базылева О.А., Луценко А.Н., Орешко Е.И. Моделирование упругопластических характеристик монокристаллических интерметаллидных сплавов на основе микроструктурного численного анализа. *Математическое моделирование и численные методы*, 2015, № 2 (6), с. 3–22.

[16] Димитриенко Ю.И., Луценко А.Н., Губарева Е.А., Орешко Е.И., Базылева О.А., Сборщиков С.В. Расчет механических характеристик жаропрочных интерметаллидных сплавов на основе никеля методом многомасштабного моделирования. *Авиационные материалы и технологии*, 2016, № 3 (42), с. 33–48.

[17] Димитриенко Ю.И., Кашкаров А.И., Макашов А.А. Конечно-элементный расчет эффективных упругопластических характеристик композитов на основе метода асимптотического осреднения. *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки*, 2007, № 1, с. 26–46.

[18] Апельцин В.Ф., Мозжорина Т.Ю. Свойства одномерного фотонного кристалла как отражающей или волноведущей структуры в случае H-поляризованного возбуждения. *Математическое моделирование и численные методы*, 2014, № 2 (2), с. 3–27.

[19] Позднеев С.А. Моделирование процессов атомной и молекулярной физики на основе квантовой теории рассеяния. *Математическое моделирование и численные методы*, 2017, № 1 (13), с. 3–21.

Статья поступила в редакцию 13.09.2017

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:
Краснов И.К., Мозжорина Т.Ю., Баланин А.Н. Численное моделирование перестройки наноструктуры сплавов методами молекулярной динамики. *Математическое моделирование и численные методы*, 2017, № 4, с. 3–16.

Краснов Игорь Константинович — канд. техн. наук, доцент кафедры «Вычислительная математика и математическая физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор более 50 работ в области моделирования систем массового обслуживания, теории распознавания образов, теории теплообмена в твердых телах.
e-mail: igorkrsnv@yandex.ru

Мозжорина Татьяна Юрьевна — канд. техн. наук, доцент кафедры «Вычислительная математика и математическая физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор 20 научных работ в области моделирования характеристик газотурбинных двигателей, моделирования полета пассажирских самолетов, оптимизации силовых установок в системе летательного аппарата. e-mail: mozzhorina@mail.ru

Баланин Александр Николаевич — студент пятого курса МГТУ им. Н.Э. Баумана. Область научных интересов: математическое моделирование, математическая статистика, прикладное программирование, электромагнитное взаимодействие.
e-mail: alexbalrus@gmail.com

Numerical modeling of alloys nanostructure rearrangement by means of molecular dynamics methods

© I.K. Krasnov, T.Yu. Mozzhorina, A.N. Balanin

Bauman Moscow State Technical University, Moscow, 105005, Russia

The article presents a mathematical model of the alloys nanoparticles structure rearrangement dynamics after the instantaneous thermal influence (heating or cooling). The model is based on using the method of molecular dynamics of multicomponent alloys with the Lennard-Jones and Morse interatomic potentials as well as the initial conditions of momentary expansion or compression of the alloy nanoparticle regular crystalline structure. We computationally investigate the regularities of rearranging the initially regular atomic structure of a nanoparticle over time. It is shown that depending on the number of atoms in a nanoparticle various finite settled forms of the alloys nanoparticle are possible, both amorphous and new crystalline structures different from the alloy original crystalline nanostructure. We provide numerical results for the titanium nanoparticles and the titanium-nickel alloy (nitinol).

Keywords: *molecular dynamics method, nanostructure, structure rearrangement, alloys, crystalline structure, numerical simulation, interatomic potentials*

REFERENCES

[1] Nazarov A.A., Mulyukov R.R. *Atomisticheskoe modelirovanie materialov, nanostruktur i protsessov nanotekhnologiy* [Atomistic modeling of materials, nanostructures and processes of nanotechnology]. Ufa, RIO BashGU Publ., 2010, 156 p.

[2] Krasilnikov M.P. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo pedagogicheskogo universiteta — Tomsk State Pedagogical University Bulletin*, 2013, no. 8 (136), pp. 170–174.

[3] Gurtov V.A., Osaulenko R.N. *Fizika tverdogo tela dlya inzhenerov* [Solid-state physics for engineers]. Moscow, Tekhnosfera Publ., 2007, 300 p.
[4] Norman G.E., Stegaylov V.V. *Matematicheskoe Modelirovanie — Mathematical Models and Computer Simulations*, 2012, vol. 24, no. 6, pp. 3–44.
[5] Gordienko A.B., Kosobutskiy A.V. *Fizika kondensirovannogo sostoianiya. Reshenie zadach* [Condensed-matter physics. Problem solving]. Kemerovo, KemSU Publ., 2011, 92 p.
[6] Ibragimov I.M., Kovshov A.I., Nazarov Yu.F. *Osnovy kompyuternogo modelirovaniya nanosistem* [The fundamentals of nanosystems computer simulation]. St. Petersburg, Lan Publ., 2010, 384 p.
[7] Aksenova E.V., Kshevetskiy M.S. *Vychislitelnye metody issledovaniya molekulyarnoy dinamiki* [Computational methods of molecular dynamics research]. St. Petersburg, Saint Petersburg State University Publ., 2009, 50 p.
[8] Alder B.J., Wainwright T.E. *Journal of Chemical Physics*, 1957, vol. 37, pp. 1208–1209.
[9] Alder B.J., Wainwright T.E. *Journal of Chemical Physics*, 1959, vol. 31, no. 2, pp. 459–466.
[10] Gibson J.B., Goland A.N., Milgram M., Vineyard G.H. *Physical Review*, 1960, vol. 120, pp. 1229–1253.
Available at: https://doi.org/10.1103/PhysRev.120.1229 (accessed December 23, 2017).
[11] Rahman A. *Physical Review*, 1964, vol. 136, pp. A405–A411.
[12] Kadau K., Germann T.C., Lomdahl P.S. *International Journal of Modern Physics C*, 2004, vol. 15, no. 1, pp. 193–201.
[13] Germann T.C., Kadau K. *International Journal of Modern Physics C*, 2008, vol. 19, no. 9, pp. 1315–1319.
[14] Vakhrushev A.V., Lipanov A.M. *Vychislitelnaya matematika i matematicheskaya fizika — Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 2006, vol. 47, no. 10, pp. 1774–1783.
[15] Dimitrienko Yu.I., Gubareva E.A., Sborschikov S.V., Bazyleva O.A., Lutsenko A.N., Oreshko E.I. *Matematicheskoe modelirovanie i chislennye metody — Mathematical Modeling and Computational Methods*, 2015, no. 2 (6), pp. 3–22.
[16] Dimitrienko Yu.I., Lutsenko A.N., Gubareva E.A., Oreshko E.I., Bazyleva O.A., Sborshchikov S.V. *Aviatsionnye materialy i tekhnologii — Aviation Materials and Technologies*, 2016, no. 3 (42), pp. 33–48.
[17] Dimitrienko Yu.I., Kashkarov A.I., Makashov A.A. *Vestnik MGTU im. N.E. Baumana. Ser. Estestvennye nauki — Herald of the Bauman Moscow State Technical University. Series Natural Sciences*, 2007, no. 1, pp. 26–46.
[18] Apeltsin V.F., Mozzhorina T.Yu. *Matematicheskoe modelirovanie i chislennye metody — Mathematical Modeling and Computational Methods*, 2014, no. 2 (2), pp. 3–27.
[19] Pozdneev S.A. *Matematicheskoe modelirovanie i chislennye metody — Mathematical Modeling and Computational Methods*, 2017, no. 1 (13), pp. 3–21.

Krasnov I.K., Cand. Sc. (Eng.), Assoc. Professor, Department of Computational Mathematics and Mathematical Physics, Bauman Moscow State Technical University, author of over 50 research works in the field of queuing system simulation, the theory of pattern recognition, the theory of heat exchange in solids. e-mail: igorkrsnv@yandex.ru

Mozzhorina T.Yu., Cand. Sc. (Eng.), Assoc. Professor, Department of Computational Mathematics and Mathematical Physics, Bauman Moscow State Technical University,

author of 20 research works in the field of simulation of the characteristics of gas turbine engines, simulation of the passenger aircraft flight, optimization of power plants in the aircraft system. e-mail: mozzhorina@mail.ru

Balanin A.N., 5th year student, Bauman Moscow State Technical University. Research interests: mathematical modeling, mathematical statistics, applied programming, electromagnetic interaction. e-mail: alexbalrus@gmail.com