*Дальневосточный математический журнал.* 2016. Том 16. № 1. С. 39–43

УДК 517.958:531.12, 511.217
MSC2010 74A25, 11B83

© М. А. Гузев,[1] А. В. Устинов[2]

# Механические характеристики модели молекулярной динамики и полиномы Коробова

Методы теории чисел использованы для точного вычисления статического поля напряжений в одномерной цепочке взаимодействующих гармонических осцилляторов. Для сумм, определяющих поле, получено представление через полиномы Коробова при произвольном числе осцилляторов и масштабе усреднения.

Ключевые слова: *молекулярная динамика, ряды Фурье, полиномы Коробова*

В статье [1] рассматривалась одномерная система попарно взаимодействующих гармонических осцилляторов, моделирующая поведение одномерного кристалла, и исследовались механические характеристики системы на различных масштабных уровнях при одноосной деформации. Предполагалось, что в начальном состоянии частицы находятся в равновесии на одинаковом расстоянии $a$ друг от друга; $x_j$ — координата $j$-частицы равна $x_j = ja + u_j$, где функция $u_j$ определяет смещение $j$-частицы из положения. Фиксируя координату $x_{n+1}$ последней частицы и полагая $x_0 = \nu t$ , где $\nu$ — некоторая постоянная скорость, получаем модель одномерного кристалла, подверженного одноосной деформации.

Механические характеристики кристалла при деформировании вычислялись на основе формул кинетической теории, использование которых требует знания $u_j$. Точное решение для $u_j$, построенное в [1], представляет собой сумму монотонной и периодической функций, причем последняя является линейной комбинацией нормальных мод дискретной модели. Если временной масштаб изменения монотонной компоненты существенно превышает временной масштаб изменения нормальной моды, что соответствует медленному деформированию кристалла, то можно

[1]Институт прикладной математики ДВО РАН, 690041, г. Владивосток, ул. Радио, 7. Электронная почта: guzev@iam.dvo.ru

[2]Тихоокеанский государственный университет, 680035, г. Хабаровск, ул. Тихоокеанская, 136; Хабаровское отделение Института прикладной математики ДВО РАН, 680000, г. Хабаровск, ул. Дзержинского, 54. Электронная почта: ustinov.alexey@gmail.com

выполнить усреднение по времени в формулах. В результате возникает задача вычисления сумм, которые определяют поведение механических характеристик в зависимости от выбранного пространственного масштаба. В данной статье показано, что применяя методы теории чисел, можно точно вычислить эти суммы.

Напомним [1], что при исследовании механических характеристик изучалось распределение поля напряжений в кристалле. Статическая составляющая поля (формула (11), [1]) определяется суммой

$$\sum_{j=N_1}^{N_2} \langle \Omega_j \Omega_j \rangle = \frac{1}{2\lambda^2} \left( \frac{\nu}{n+1} \right)^2 (NS_1(n+1) + S_2(n+1; N_1, N_2)),$$

$$S_1(n) = \sum_{k=1}^{n-1} \operatorname{ctg}^2 \frac{\pi k}{2n}, \qquad S_2(n; N_1, N_2) = \sum_{j=N_1}^{N_2} S_2(j, n), \tag{1}$$

$$S_2(j, n) = \sum_{k=1}^{n-1} \cos \frac{2\pi k(j+1/2)}{n} \operatorname{ctg}^2 \frac{\pi k}{2n},$$

в которой $N = N_2 - N_1 + 1$ и $\lambda$ — механический параметр модели.

В работе [2] Коробовым были введены специальные числа и специальные полиномы, которые можно назвать дискретными аналогами чисел Бернулли $B_n$ и полиномов Бернулли $B_n(x)$. В настоящее время они известны как числа и полиномы Коробова. Для фиксированного действительного $p$, отличного от 0, числа $K_n = K_n^{(p)}$ и полиномы $K_n(x) = K_n^{(p)}(x)$ определяются равенствами

$$K_0 = 1, \quad \sum_{\nu=0}^{n} C_n^\nu K_\nu p^{\underline{n-\nu}} = K_n \quad (n \geq 2); \qquad K_n(x) = \sum_{\nu=0}^{n} C_n^\nu K_\nu x^{\underline{n-\nu}} \quad (n \geq 0),$$

где $x^{\underline{n}} = x(x-1)\dots(x-n+1)$ — убывающая факториальная степень. Отсюда сразу следует, что

$$K_1 = -\frac{p-1}{2}, \quad K_2 = \frac{p^2-1}{6}, \quad K_3 = -\frac{p^2-1}{4},$$

$$K_1(x) = x - \frac{p-1}{2}, \quad K_2(x) = x^2 - px + \frac{p^2-1}{6},$$

$$K_3(x) = x^3 - \frac{3(p+1)}{2}x^2 + \frac{p(p+3)}{2}x - \frac{p^2-1}{4}.$$

При целых $p \geq 2$, $x \in [0;\ p+n-2]$ полиномы Коробова имеют следующее представление в виде конечного ряда Фурье:

$$K_n(x) = -n! \sum_{m=1}^{p-1} \frac{e^{2\pi i \frac{m}{p}}}{(e^{2\pi i \frac{m}{p}} - 1)^n} e^{2\pi i \frac{mx}{p}} \qquad (n \geq 0).$$

Разложения в конечные ряда Фурье становятся проще, если сделать сдвиг аргумента и перейти к полиномам $Q_n(x) = Q_n^{(p)}(x)$, определяемым равенством

$$Q_n(x) = K_n \left( x + \frac{n}{2} - 1 \right) \qquad (n \geq 0).$$

В частности,

$$Q_0(x) = 1, \quad Q_1(x) = x - \frac{p}{2}, \quad Q_2(x) = x^2 - px + \frac{p^2-1}{6},$$
$$Q_3(x) = x^3 - \frac{3px^2}{2} + \left(\frac{p^2}{2} - \frac{3}{4}\right)x + \frac{3p}{8}.$$

Известно, что (см. [3]) для многочленов с чётным номером и при целом $x \in [1 - n; p + n - 1]$ справедливо равенство

$$Q_{2n}(x) = \frac{(-1)^{n+1}(2n)!}{2^{2n}} \sum_{m=1}^{p-1} \frac{\cos 2\pi \frac{mx}{p}}{\sin^{2n} \pi \frac{m}{p}} \qquad (n \geq 1). \tag{2}$$

Если же номер многочлена нечетный, то для полуцелых $x \in \left[\frac{1}{2} - n; p + n - \frac{1}{2}\right]$

$$Q_{2n+1}(x) = \frac{(-1)^{n+1}(2n+1)!}{2^{2n+1}} \sum_{m=1}^{p-1} \frac{\sin 2\pi \frac{mx}{p}}{\sin^{2n+1} \pi \frac{m}{p}} \qquad (n \geq 0).$$

Информацию о других свойствах полиномов Коробова можно найти в [3], [4], [5], [6].

**Предложение 1.** *При $n \geq 1$ и произвольного целого $j$ для сумм $S_1(n)$ и $S_2(j, n)$, определённых в* (1)*, выполняются равенства*

$$S_1(n) = \frac{(2n-1)(n-1)}{3}, \tag{3}$$
$$S_2(j, n) = Q_2^{(2n)}\left(2n\left\{\frac{2j+1}{2n}\right\}\right) + \frac{1}{2}.$$

*В частности, при $0 \leq j < n$*

$$S_2(j, n) = (2j+1)^2 - 2n(2j+1) + \frac{2n^2+1}{3}.$$

*Доказательство.* Сравнивая значение многочлена $Q_2^{(2n)}(x)$ в точке $x = 0$ с его разложением в конечный ряд Фурье (2), получаем, что

$$\frac{1}{2} \sum_{m=1}^{2n-1} \frac{1}{\sin^2 \frac{\pi m}{2n}} = \frac{4n^2-1}{6}.$$

Следовательно,

$$S_1(n) = \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{2n-1} \frac{\cos^2 \frac{\pi m}{2n}}{\sin^2 \frac{\pi m}{2n}} = \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{2n-1} \frac{1}{\sin^2 \frac{\pi m}{2n}} - n + \frac{1}{2} = \frac{(2n-1)(n-1)}{3}.$$

Преобразуем сумму $S_2(j,n)$:

$$S_2(j,n) = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{2n-1}\cos\frac{2\pi k(j+1/2)}{n}\operatorname{ctg}^2\frac{\pi k}{2n} =$$
$$= \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{2n-1}\cos\frac{2\pi k(2j+1)}{2n}\left(\frac{1}{\sin^2\frac{\pi k}{2n}}-1\right) = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{2n-1}\frac{\cos\frac{2\pi k(2j+1)}{2n}}{\sin^2\frac{\pi k}{2n}} + \frac{1}{2}.$$

Пользуясь формулой (2), получаем нужное представление для суммы $S_2(j,n)$. $\square$

**Следствие 1.** *Если* $0 \le N_1 \le N_2 < n$, *то*

$$\begin{aligned} S_2(n;N_1,N_2) &= \frac{2}{3}(N_2-N_1+1)\times \\ &\times\left(n^2-3n+2-3n(N_1+N_2)+2N_1+4N_2+2\left(N_1^2+N_2N_1+N_2^2\right)\right). \end{aligned} \tag{4}$$

Формулы (3), (4) позволяют вычислять параметры системы при произвольном числе осцилляторов $n$ и интервале усреднения $N$. Таким образом, для поставленной в [1] задачи молекулярно-динамического моделирования одномерного кристалла получен точный ответ о влиянии масштабного фактора системы на механические характеристики материала.

# Список литературы


[1] М. А. Гузев, Ю. Г. Израильский, М. А. Шепелов, “Молекулярно-динамические характеристики одномерной точно решаемой модели на различных масштабах”, *Физическая механика*, **9**:5 (2006), 53–57.

[2] Н. М. Коробов, “Специальные полиномы и их приложения”, *Диофантовы приближения. Матем. записки*, **2** (1996), 77–89.

[3] А. В. Устинов, “О формулах суммирования и интерполяции”, *Чебышевский сборник*, **1** (2001), 52–71.

[4] Н. М. Коробов, “О некоторых свойствах специальных полиномов”, *Чебышевский сборник*, **1** (2001), 40–49.

[5] А. В. Устинов, “Об одном обобщении чисел Стирлинга”, *Чебышевский сборник*, **3**:2(4) (2002), 107–122.

[6] А. В. Устинов, “Полиномы Коробова и теневой анализ”, *Чебышевский сборник*, **4**:4(8) (2003), 137–152.



Представлено в Дальневосточный математический журнал 18 апреля 2016 г.

Исследование первого автора выполнено при частичной финансовой поддержке программы “Дальний Восток” (проект № 15-I-4-041). Исследование второго автора выполнено при финансовой поддержке РФФИ (проект № 14-01-00203).

*Guzev M. A., Ustinov A. V.* Mechanical characteristics of molecular dynamics model and Korobov polynomials. Far Eastern Mathematical Journal. 2016. V. 16. № 1. P. 39–43.

ABSTRACT

We use the number theory methods for explicit calculation of a static stress field in the system of a 1D chain harmonic oscillators. The sums defining stress field are presented in terms of Korobov polynomials for arbitrary number of oscillators and arbitrary averaging scale.
Key words: *molecular dynamics, Fourier series, Korobov polynomials*