

УДК 519.6+539.2:539.3:539.4+536.6

О численном интегрировании уравнений движения при наличии полей с разрывами

Ю. К. Чернышев

Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е.Жуковского «ХАИ», Украина

Рассмотрены трудности численного решения уравнений движения коллективов модельных частиц, связанные с наличием разрывов в зависимости потенциальной энергии от координат. Примерами являются кусочно-постоянные функции. Показано, что в таких случаях целесообразно искать зависимость времени от координат центров модельных частиц, что эквивалентно событийному подходу при решении задач молекулярной динамики. Предложено введение полупроницаемости барьеров и решение некоторых практически важных задач.

Ключевые слова: *событийное моделирование, полупроницаемые барьеры, графен, конвекция, фильтры с прилипанием, молекулярная динамика*

Розглянуто труднощі числового розв'язання рівнянь руху колективу модельних часток, пов'язані з наявністю розривів в залежності потенційної енергії від координат. Прикладами є кусково-постійні функції. Доведено, що в таких випадках доречно шукати залежність часу від координат центрів модельних часток, що є еквівалентним подійному підходу при розв'язанні задач молекулярної динаміки. Запропоновано введення напівпроникливості бар'єрів та розв'язання деяких практично важливих задач

Ключові слова: *подійне моделювання, напівпроникливі бар'єри, графен, конвекція, фільтри з приклеювання, молекулярна динаміка*

Difficulties of numerical solving of equalizations the motions of collectives of model particles, related to the presence of breaks in dependence of potential energy on coordinates, are considered. Piece-constant functions are examples of that. It is shown that in such cases it is expedient to search dependence of time on the coordinates of centers of model particles, that equivalently to event-driven simulation at the solving of tasks of molecular dynamics. Introduction of semipermeability of barriers and solving of some practically important tasks are offered.

Key words: *event-driven simulation, semi-permeable barriers, graphene, convection, filters with adhesiveness, molecular dynamics.*

1. Введение

Современное состояние вычислительной техники позволяет численно решать задачи, связанные с учетом сил взаимодействия между молекулами. Способы решения уравнений совместного движения модельных частиц составляют существенную часть метода молекулярной динамики [1]. Как правило, модельные потенциалы взаимодействия выбираются из соображений удобства и возможности применения приближенных методов решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений [2]. Ими являются модельные потенциалы класса Леннарда-Джонса, Морзе и др.. В этих случаях вполне приемлемо использование метода Эйлера и его вариантов, метода Рунге-Кутты, вычислительной схемы Верле [3], поскольку существуют и непрерывны производные высокого порядка. Однако с повышением точности численного

метода растет количество арифметических операций на каждом шаге интегрирования. В результате приемлемое по затратам машинного времени количество модельных частиц зачастую оказывается недостаточным для статистических выводов. Кроме того, стандартные методы численного решения уравнений движения страдают общим недостатком: за соблюдением постоянства полной энергии (а также импульса и момента импульса) приходится следить отдельно, применяя те или иные корректирующие действия.

Существенное ускорение расчетного процесса связано с огрублением модельного потенциала путем кусочно-постоянной аппроксимации; в некоторых случаях является рациональным также введение в рассмотрение энергетических барьеров. Самым известным и простым из таких потенциалов является потенциал, используемый в методе твердых сфер [4]. Однако в этих случаях силы модельного межмолекулярного взаимодействия имеют дельта-образные особенности, что категорически не позволяет использовать стандартные вычислительные методы. С этим связано появление дискретно-событийного (или просто событийного) подхода в описании совместного перемещения модельных частиц [5-8]. Результатом применения этого подхода является не нахождение зависимостей координат центров модельных частиц от времени, а нахождение обратной функции, т.е. зависимости времени от координат. Алгоритмические трудности перемещаются в область использования методов дискретной математики, в частности, теории очередей.

2. Уравнение движения одной частицы в одномерном пространстве

В одномерном случае для точки с единичной массой закон движения в поле, заданном потенциалом $U(x)$, определяется уравнением Ньютона: $\frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{\partial U}{\partial x}$.

Обозначим $v = \frac{dx}{dt}$; тогда $\frac{dv}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial x}$. Полная энергия $E = \frac{v^2}{2} + U = const$ является интегралом движения. Пусть в начальный момент времени полная энергия равна E_0 ; тогда с точностью до знака $v(t) = \pm\sqrt{2(E_0 - U(x))}$. Нахождение зависимости координаты x от времени t сводится к решению уравнения следующего вида: $dx = \pm\sqrt{2(E_0 - U(x))} dt$. В стандартных численных методах аргументу t придают приращение Δt , а затем, используя непрерывность функции в правой части и непрерывность ее производных, находят приращение Δx . Рассмотрим уравнение движения в несколько иной эквивалентной форме: $dt = \pm dx / \sqrt{2(E_0 - U(x))}$. Но тогда

$t = t_0 + \left| \int_{x_0}^x (2(E_0 - U(z)))^{-\frac{1}{2}} dz \right|$. В результате интегрирования время оказывается

зависящим от координат; область интегрирования необходимо предварительно представить в виде объединения подобластей, границы которых определяются

нулями скорости, т.е. решениями неравенства $E_0 - U(x) \geq 0$. Сам по себе этот подход достаточно продуктивен для широкого класса потенциалов.

Принципиально то, что на участках постоянства потенциальной энергии интегрирование тривиально. В этом случае возникает зависимость моментов времени, в которые происходит пересечение границ областей постоянства потенциальной энергии, от координат границ этих областей. Таким образом, в случае кусочно-постоянной потенциальной энергии задача нахождения обратной зависимости $t(x)$ является простой и решаемой точно. Момент пересечения материальной точкой границы области постоянства потенциальной энергии считается событием, сопровождаемым мгновенным изменением скорости частицы; между событиями скорость постоянна. Существенно то, что специальных средств поддержания постоянства полной энергии при этом не требуется. Аналогичным образом можно рассматривать случаи кусочно-линейной, кусочно-квадратичной и иной аппроксимации потенциальной энергии, когда интегрирование функции $(2(E_0 - U(x)))^{-\frac{1}{2}}$ приводит к элементарным функциям.

Еще одним источником возникновения разрывов потенциальной энергии является наличие энергетических барьеров. На рисунке 1а приведен график потенциальной энергии с областями резкого изменения; на рисунке 1б зависимость потенциальной энергии от аргумента огрублена за счет введения энергетических барьеров, т.е. разрывов.

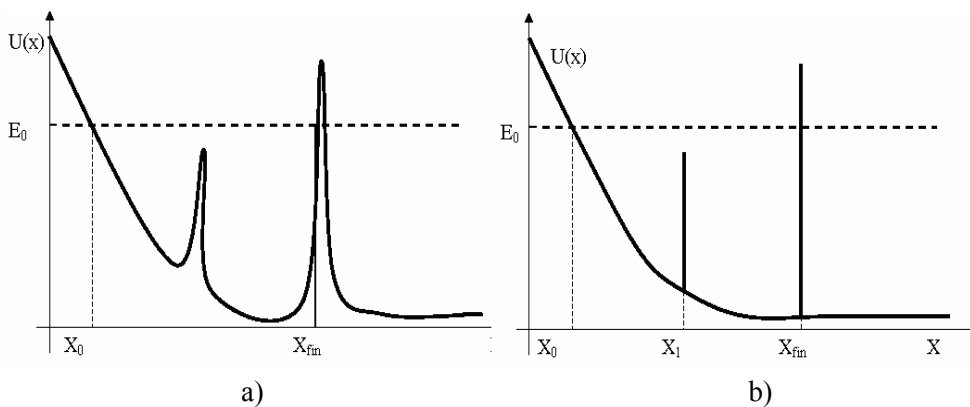


Рис. 1. Графики зависимости потенциальной энергии от координаты: а) исходная зависимость $U(x)$; б) огрубленное представление с энергетическими барьерами

В обоих случаях движение с полной энергией E_0 осуществимо лишь в интервале $[X_0, X_{fin}]$. Для случая а) применимы стандартные методы численного решения уравнения движения. В случае б) применимо лишь дискретно-событийное моделирование движения. Высота барьера в точке X_1 никак не отражается на законе движения, если сумма потенциальной энергии и

высоты энергетического барьера не превосходит заданного значения полной энергии

3. Полупроницаемые барьеры

Основными постулатами механики являются следующие: время однородно, пространство однородно и изотропно [9]. Рассмотрим в качестве модели ящик, заполненный молекулами газа, причем внешние поля отсутствуют. Поместим в ящик перегородку, реализованную как энергетический барьер U_d . Внесем в закон движения асимметрию. Будем считать, что действие барьера справедливо только для тех частиц, которые подлетают с одной стороны. Если же частица подлетает с другой стороны, то барьер действует противоположным образом, т.е. молекула отражается от барьера, если величина ее скорости превышает предельно допустимое значение. Эта гипотетическая модель впервые рассмотрена Дж.К.Максвеллом, который связал ее функционирование с наличием «демона». Поскольку постулаты механики в такой модели не соблюдаются, то эта модель физически нереализуема [10]. Однако технический вычислительный прием, заключающийся во введении в рассмотрение неизотропности пространства, позволяет моделировать большое количество физических явлений. В частности, он пригоден для нахождения предельного состояния систем при игнорировании промежуточных вычислений, связанных с адиабатичностью. Энтропия финального состояния системы в таком случае меньше либо равна исходной. Примером является стационарное распределение газа в поле тяготения.

Пусть вдоль числовой оси OZ расположены одинаковые ячейки цилиндрической формы. В качестве номера нижней границы примем номер ячейки. Модельной частицей является материальная точка, перемещающаяся со скоростью v параллельно оси OZ . На каждой торцевой границе рассмотренной системы ячеек определен потенциальный барьер, вносящий асимметрию. Роль каждого из барьеров заключается в том, что частица, приближающаяся снизу, передается в следующую ячейку при условии превышения некоторой скорости v_d и отражается в противоположном случае. Если частица приближается к границе сверху, то она отражается от границы в случае превышения скорости v_d и пропускается в противном случае.

Известно, что распределение молекул по скоростям в покоящейся газе не зависит от силы тяжести [11]. Это значит, что в каждой ячейке доля молекул, для которых скорость превышает уровень v_d , – одна и та же. Поэтому вероятность p_1 того, что частица, приближающаяся снизу к границе, имеет скорость, большую порога v_d , для всех ячеек одинакова, как и вероятность q_0 передачи частицы в нижнюю ячейку при приближении к границе сверху. Предположение о неизотропности пространства приводит, таким образом, к модели цепей Маркова [12]. Неизотропность пространства оказывается эквивалентной наличию поля в стационарном распределении. При движении вверх с вероятностью p_1 частица из ячейки с номером i переходит в ячейку с номером $i+1$ и с вероятностью $q_1 = 1 - p_1$ отражается; в обоих случаях скорость

не изменяется. При достижении нижней границы она с вероятностью q_0 переходит в ячейку с номером $i-1$ и с вероятностью $p_0 = 1 - q_0$ отражается. Граф переходов из состояния в состояние приведен на рис. 2.

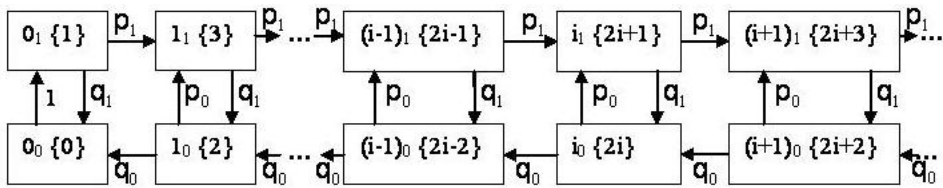


Рис. 2. Граф переходов цепи Маркова из ячейки в ячейку; в фигурных скобках – номер состояния

Матрица переходов π для рассматриваемой цепи имеет вид:

$$\pi = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \dots \\ q_1 & 0 & 0 & p_1 & 0 & 0 & 0 \dots \\ q_0 & 0 & 0 & p_0 & 0 & 0 & 0 \dots \\ 0 & 0 & q_1 & 0 & 0 & p_1 & 0 \dots \\ 0 & 0 & q_0 & 0 & 0 & p_0 & 0 \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad p_\sigma + q_\sigma = 1; \quad \sigma = 0, 1 \quad (1)$$

Финальное распределение вероятностей $\vec{W} = (W_0, W_1, W_2, \dots, W_i, \dots)$ цепи Маркова находят, решая систему уравнений $\vec{W}\pi = \vec{W}$ с дополнительным условием нормировки: $\sum_{i=0}^{\infty} W_i = 1$. В рассматриваемом случае финальное

распределение вероятностей существует лишь при условии $\mu = \frac{p_1}{q_0} < 1$ и имеет

вид: $W_{2i} = W_{2i+1} = 0.5(1 - \mu)\mu^i$. В стационарном распределении вероятность того, что частица находится в ячейке с номером i и движется вверх, равна вероятности того, что частица находится в ячейке с номером i и движется вниз. Эти события несовместны, а потому вероятность P_i того, что в стационарном состоянии частица находится в ячейке с номером i , равна сумме найденных вероятностей, т.е. $P_i = W_{2i} + W_{2i+1}$:

$$P_i = (1 - \mu)\mu^i, \quad \mu = \frac{p_1}{q_0} < 1, \quad i = 0, 1, 2, \dots \quad (2)$$

Тогда для частиц, блуждающих независимо, справедливо соотношение:

$n(z_i) = n_0 \exp(-\lambda z_i)$, $\lambda = -\frac{1}{H} \ln\left(\frac{P_N}{P_0}\right)$. Сравним с зависимостью количества молекул $n(z)$ покоящегося газа в единице объема от высоты z , которая описывается формулой Больцмана [11]: $n(z) = n_0 \exp\left(-\frac{mgz}{kT}\right)$, где n_0 – плотность на нулевой высоте, m – масса молекулы, g – ускорение свободного падения, k – постоянная Больцмана, T – температура.

$$\text{При } \lambda = \frac{mg}{kT} : \mu = \frac{p_1}{q_0} = \left(\frac{P_N}{P_0}\right)^{\frac{1}{N}} = \exp\left(-\frac{mgH}{NkT}\right) = \exp\left(-\frac{mg \Delta h}{kT}\right).$$

Итак, предположение о неизотропности пространства, эквивалентное введению модели цепи Маркова, позволяет найти финальное распределение частиц газ в однородном поле.

При переходе к двумерному случаю с учетом радиусов модельных частиц целесообразно воспользоваться событийным подходом. Рассмотрим n точек, случайно распределенных в рабочей области, представляющей собой прямоугольник с вершинами $(1, 1)$, $(n_x + 1, 1)$, $(n_x + 1, n_y + 1)$, $(1, n_y + 1)$. Для каждой из модельных частиц с центрами в выбранных точках постулируются два типа событий: упругое столкновение с другой частицей; пересечение центром частицы участка границы той ячейки, которой принадлежит рассматриваемая частица [5-7]. Каждое из указанных событий не приводит к изменению суммарной энергии. Энтропия S_k в отдельных единичных ячейках в случае справедливости распределения Рэлея для каждой ячейки задаются выражением: $S_k = n_k (2 \ln(v_{heat})_k + C)$. При отсутствии коллективного движения энтропия в каждой ячейке зависит только от плотности: $S_k = n_k s$, $s = 2 \ln v_{heat} + C$. Отсюда следует, что суммарная энтропия в стационарном состоянии S не отличается от энтропии в начальном состоянии S_{start} , как и

$$\text{энтропия } s, \text{ приходящаяся на одну молекулу: } S = \sum_{k=1}^N S_k = \left(\sum_{k=1}^N n_k\right) s = ns = S_{start}.$$

Однако в верхних ячейках энтропия уменьшается за счет уменьшения плотности, а в нижних увеличивается.

В реальных процессах установления плотности при наличии внешнего поля предположение об адиабатности приводит к повышению температуры за счет перехода потенциальной энергии молекул в тепловую, и поэтому энтропия возрастает. Сам процесс моделирования в этом случае для обеспечения изотермичности приходится сопровождать отводом лишнего тепла, что достаточно сложно и с теоретической, и с практической точек зрения.

Если диаметр модельных сфер близок к единице (т.е. длине ребра ячейки), а количество модельных сфер имеет порядок количества ячеек, то формула Больцмана несправедлива. Однако с помощью событийного моделирования можно численно получить распределение плотности сильно сжатого газа из

твердых сфер в однородном поле, что или затруднительно, или невозможно выполнить, основываясь на континуальном представлении.

4. Имитационное моделирование вихревого движения в газе

Задача описания качественного характера и количественных параметров конвективного движения в газе является одной из центральных в газодинамике. Ее можно считать тестовой для оценивания эффективности и адекватности применяемого численного метода. Она иллюстрирует появление диссипативных структур при наличии хаоса [13]. В работах [5-8] применен событийный подход в том случае, когда на газ действуют сила гравитации и сила Архимеда; получены диссипативные структуры, возникающие как результаты неустойчивости течения Рэлея-Бенара и флотационной неустойчивости в слое. Однако в рассмотренных задачах отслеживалось изменение кинетической энергии отдельных частиц как результат перемещения из ячейки с одним значением потенциала тяготения в ячейку с другим значением этого потенциала. В результате суммарная кинетическая энергия движения частиц не являлась константой. В «чистом виде» эти неустойчивости можно обнаружить, применив методику цепей Маркова, считая потенциальную энергию внешнего поля равной нулю, но постулировав наличие полупроницаемых барьеров..

Предположим, модельные частицы в рассмотренной схеме могут принадлежать к одному из двух типов. При столкновении с нижней границей рабочей области частица первого типа становится частицей второго типа, при столкновении частицы второго типа с верхней границей она приобретает тип 1. Частицы первого типа за счет искусственной неизотропности притягиваются к нижней границе, второго – к верхней. Возникающие вихревые структуры имеют универсальную форму при одинаковых длинах свободного пробега, зависящих от общего количества модельных частиц и их радиусов. Пример поля скоростей приведен на рис.3; количество модельных частиц равно 3000, $n_x = 200$, $n_y = 15$, радиусы модельных частиц равны 0.4, $p_1 = q_0 = 0.93$.

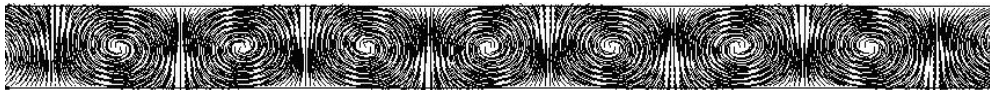


Рис. 3 Вихревые структуры при конвективной неустойчивости

На рис.4 приведен результат экспериментального исследования конвективной неустойчивости, описанный в работе [14].

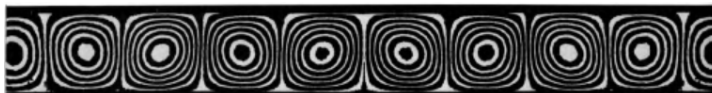


Рис. 4. Экспериментально полученный пример конвективной неустойчивости в жидкости

Некоторое отличие в формах ячеек конвекции в жидкости по сравнению с приведенными на рис. 3 можно объяснить возможностью свободного пробега частиц газа, даже сильно сжатого.

5. Событийное моделирование самоорганизации графена

Графен – плоский кристалл, образованный атомами углерода. Каждый атом ковалентно связан силами притяжения не более чем с тремя соседними. Ввиду перестройки электронного облака возникают силы отталкивания между «соседями соседей» (или соседями второго порядка). Радиус действия сил отталкивания превышает радиус действия сил притяжения (рис.5). Модельные частицы 1 и 2, 1 и 3, 1 и 4 – это соседи первого порядка; расстояния dist(ance) между их центрами не может превышать величины d_{in} . Частицы 2 и 3, 2 и 4, 3 и 4 – соседи второго порядка [15, 16]. Расстояние между центрами соседних узлов не может быть меньше параметра d_{out} . Внутренние барьеры обладают свойством непроницаемости изнутри; внешние барьеры непроницаемы снаружи. Очевидна необходимость выполнения неравенства $d_{in} < d_{out} < \sqrt{3} d_{in}$. Непроницаемость изнутри обеспечивает возникновение связанности. Должно быть также учтено, что узлы в соответствующем графе не более чем трехвалентны. Конечность высоты внутреннего барьера дополнительно позволяет моделировать разрывы связей с ростом температуры. Рассматривается моделирование процесса образования структур из объектов с указанными свойствами при перемещении в плоскости. Энергетический аспект возникновения связей в данном случае не учитывается. Фактически это есть простая геометризация возникновения связанных структур, что в значительной степени ускоряет процесс статистической имитации кристаллообразования [17]. После того как получена некоторая устойчивая структура из моделей атомов (рис.6), можно приступить к расчетам, связанным с энергетическими характеристиками межатомного взаимодействия.

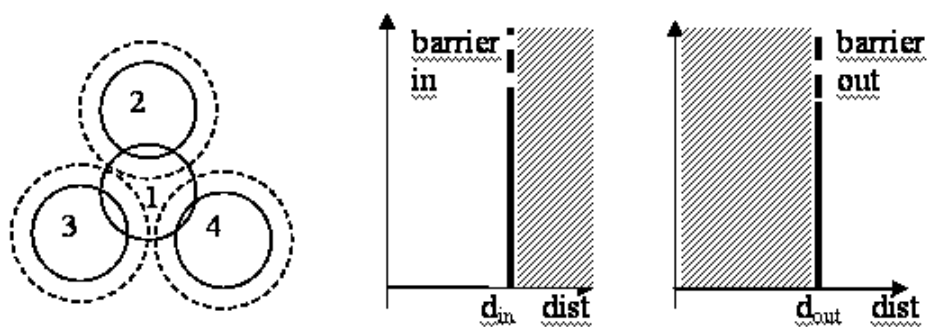


Рис. 5. Потенциальные барьеры для соседей первого и второго порядков

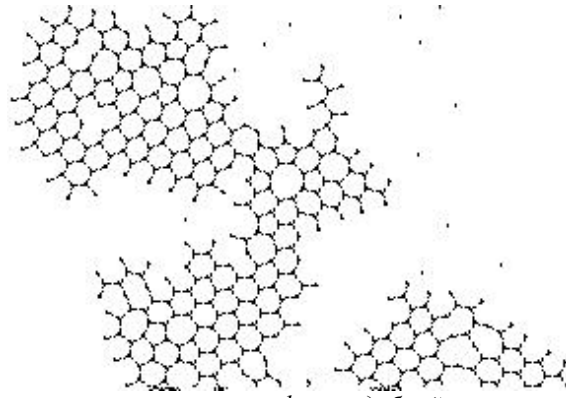


Рис. 6. Фрагмент самоорганизации графеноподобной структуры, как результат применения событийного моделирования при наличии односторонней проницаемости внутренних барьеров

6. Уточнение модели фильтрации

В работах [6,7,18] приведен пример событийного моделирования процесса прохождения рабочего вещества совместно с включениями сквозь фильтр. Однако не учитывалось «прилипание» включений к элементам фильтра. Это явление чрезвычайно сложно формализовать, если не использовать свойства полупроницаемости.

Пусть модельная частица расположена в ячейке в окрестности участка фильтра. Положим вероятность преодоления каждого из участков границы этой ячейки изнутри равной величине, меньшей единицы. Варьируя этой вероятностью и количеством ячеек с полупроницаемыми границами, можно учесть тот или иной уровень «прилипания» – от нулевого до полного закрепления. Преодоление границы извне происходит беспрепятственно. На рис. 7 приведен пример фрагмента участка 2D фильтра с областями прилипания [16]. Демонстрационная программа приведена в [17]. Точками отмечены вершины тех ячеек квадратной сетки, границам которых приписаны меньшие единицы вероятности проникновения наружу.

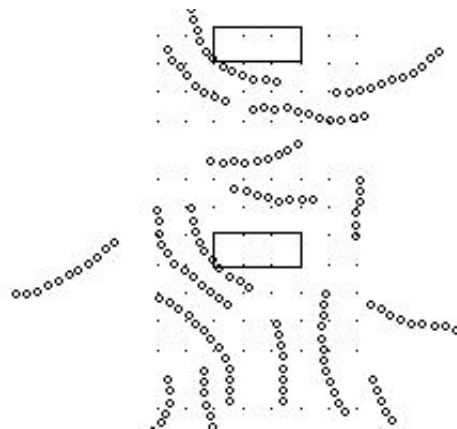


Рис. 7. Фрагмент участка фильтра с областями прилипания

Включения представлены линейными структурами с односторонне проницаемыми барьерами между соседними модельными частицами и отталкивательными барьерами между соседями второго порядка; максимальная валентность равняется двум (рис. 8). Варьируя геометрическими соотношениями между ширинами барьеров, можно регулировать степень жесткости отдельных включений.

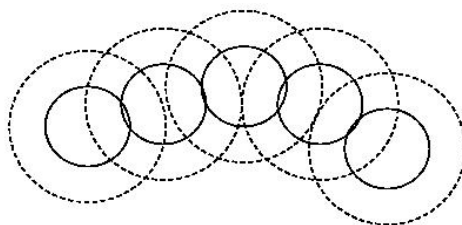


Рис. 8. Модель линейных включений с двумя видами асимметрично проницаемых барьеров

7. Выводы и заключение

Развитие событийного подхода к решению уравнений движения модельных частиц определяет перспективы развития вычислительных методов молекулярной динамики. Это связано с введением в рассмотрение разрывных потенциалов. Цепи Маркова, как математический аппарат, являются непосредственным выражением принципов дискретно-событийного моделирования. Искусственная неизотропность пространства является тем техническим приемом, с помощью которого возможно осуществление моделирования процессов сорбции-десорбции молекулярного водорода на поверхности углеродных наноструктур [19], создание полей предпочтительных направлений в имитационном моделировании распространения инфекций [20] и в иных задачах, допускающих дискретизацию моментов времени наступления событий. Основным преимуществом описанного подхода является значительное снижение требований к ресурсам вычислительных средств при сохранении адекватности моделируемым процессам.

ЛИТЕРАТУРА

1. Берд Г. Молекулярная газовая динамика. – М.: МИР, 1981. – 320 с.
2. Калиткин Н. Численные методы. – М.: Наука, 1978. – 512 с
3. Verlet L. Computer ‘experiments’ on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules // Phys. Rev. – 1967. – Vol. 159, № 98. – P. 103–108.
4. Alder B. J. Phase transition for hard sphere system // J. Chem. Phys. – 1957. – Vol. 27. – P. 1208-1209.
5. Чернышев Ю.К. Применение теории систем для алгоритмизации прямого математического моделирования течения газа // Двигатели внутреннего сгорания. – 2004. – № 2. – С. 44–47.

6. Чернышев Ю.К. Решение задач имитационного моделирования поведения большого количества модельных частиц – Х.: ХАИ, 2006. – 58 с.
7. Чернышев Ю.К. Событийное программирование. Применение к решению некоторых задач физики – Х.: ХАИ, 2008. – 68 с.
8. Rapaport D.C. The Art of Molecular Dynamics Simulation – Cambridge, 2005. – 549 pp.
9. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика – М.: Наука, 1965. – 204 с.
10. Секей Г. Парадоксы в теории вероятностей и математической статистике – М.: Мир, 1990. – 240 с.
11. Телеснин Р.В. Молекулярная физика – М.: Высш.шк., 1965. – 298 с
12. Карлин С. Основы теории случайных процессов – М.: Мир, 1971. – 536 с.
13. Пригожин И.Р., Стенгерс И. Порядок из хаоса – М.: Прогресс, 1986. – 432 с.
14. Ван-Дайк М. Альбом течений жидкости и газа – М.: Мир, 1986. – 184 с.
15. Слепичева М.А., Чернышев Ю.К. Построение углеродсодержащих структур с помощью средств событийного моделирования //Матеріали ІКТМ / Харків: ХАІ. – 2009. – С. 122.
16. Chernyshev Y.C, Sokolov O.Y. Event-driven simulation of joint behavior of objects with complex form // MS'10, Prague, 22-25 June 2010. – PS34, 4 pp.
17. Ехе-файл Demo_gas_filter [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.chernyshev.at.ua>
18. Чернышев Ю.К. Имитационное моделирование 2D-фильтрации на основе событийного подхода // Открыт. информац. и компьют. интегр. техн. – Харків, ХАІ. – 2007. –Вып. 36. – С. 118 – 122.
19. Слепичева М.А., Чернышев Ю.К., Угрюмов М.Л. Численное моделирование адсорбции молекулярного водорода на пучках параллельных углеродных наноструктур // Вестник ХНУ. Сер. «Математическое моделирование. Информационные технологии. Автоматизированные системы управления». – 2011. – Вып. 18, № 987. – С. 113-119.
20. Chernyshev Y., Sokolov O. Multiagent simulation of contact disease distribution based on event approach // MS'10, Prague, 22-25 June 2010. – PS32, 4 pp.