

Тема 2. Методы анализа математических моделей

Лекция 5. Методы частиц.

1. Метод динамики частиц

1.1 Общее представление

Метод динамики частиц основан на представлении материала совокупностью взаимодействующих частиц (материальных точек или твердых тел), для которых записываются классические уравнения динамики. Взаимодействие частиц описывается посредством потенциалов взаимодействия, основным свойством которых является отталкивание при сближении и притяжение при удалении. Перед началом моделирования задается некоторое начальное распределение частиц в пространстве (исходная структура материала) и начальное распределение скоростей частиц (механическое и тепловое движение системы в исходном состоянии). Далее задача сводится к решению задачи Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений.

Традиционно, метод динамики частиц развивался на двух противоположных сторонах масштабной шкалы - для описания молекулярных систем, где в качестве частиц выступали атомы и молекулы, и для описания астрофизических систем, где в качестве частиц выступали объекты значительно большего масштабного уровня, такие как звезды или даже галактики. Не смотря на внешнюю несхожесть, и те и другие системы описываются сходными уравнениями.

Постепенно, по мере развития вычислительной техники, данный метод стал все более широко применяться к описанию процессов на промежуточных масштабных уровнях, для моделирования физико-механических свойств материалов и гранулированных сред. В этом случае частицы могут представлять гранулы или зерна материала, однако они могут быть, и не связаны напрямую с некоторыми физическими объектами, а использоваться как конечные элементы для изучения процессов, в которых нарушается непрерывность материала.

Одним из наиболее хорошо разработанных вариантов метода динамики частиц является метод молекулярной динамики, на протяжении последних десятилетий интенсивно используемый для исследования физико-химических свойств материалов. В классической молекулярной динамике в качестве частиц выступают атомы и молекулы, составляющие материал. В настоящее время потенциалы межатомного взаимодействия для важнейших материалов достаточно хорошо известны, что позволяет моделировать динамику молекулярных соединений с высокой степенью точности. В связи с открытием принципиально новых механических и физических свойств у материалов, имеющих структурные элементы нанометрового масштаба, чрезвычайно повысился интерес к моделированию материалов на микроскопическом масштабном уровне.

1.2. Метод молекулярной динамики

В молекулярной динамике исследуемая система представляет собой множество частиц, двигающихся по законам классической механики:

$$m_l \frac{d\mathbf{v}_{l,i}}{dt} = \mathbf{F}_{l,i}, \quad \mathbf{v}_{l,i} = \frac{d\mathbf{r}_{l,i}}{dt}, \quad i = 1, \dots, N_l, \quad l = a, b. \quad (1)$$

Здесь i – номер частицы, $l = a, b$ – тип частиц (a – молекулы азота, b – атомы никеля), N_l – полное число атомов типа l , m_l – масса частицы типа l , $\mathbf{r}_{l,i} = (r_{x,l,i}, r_{y,l,i}, r_{z,l,i})$ и $\mathbf{v}_{l,i} = (v_{x,l,i}, v_{y,l,i}, v_{z,l,i})$ – радиус-вектор и вектор скорости i -й частицы типа l , $\mathbf{F}_{l,i} = (F_{x,l,i}, F_{y,l,i}, F_{z,l,i})$ – суммарная сила, действующая на данную частицу.

В рамках решения поставленной задачи исследуются процессы теплопередачи, для чего необходимо в некоторые области расчета вводить дополнительное тепло. Таким образом, система частиц не является замкнутой. В ней присутствует внешнее тепловое воздействие, позволяющее контролировать температуру системы.

Указанные выше силы представляют собой сумму сил взаимодействия i -й частицы с окружающими частицами, определяющихся функционалом потенциальной энергии, и сил внешнего воздействия:

$$\mathbf{F}_{l,i} = -\frac{\partial U(\mathbf{r}_{l,1}, \dots, \mathbf{r}_{l,N_l})}{\partial \mathbf{r}_{l,i}} + \mathbf{F}_{l,i}^{ext}, \quad i = 1, \dots, N_l, \quad l = a, b. \quad (2)$$

Здесь U – суммарная потенциальная энергия системы частиц, $\mathbf{F}_{l,i}^{ext}$ – сила взаимодействия i -й частицы типа l с внешней средой.

Потенциальная энергия системы U представляется в виде суммы парциальных потенциальных энергий, вычисление которых производится по формулам выбранных потенциалов взаимодействия:

$$\begin{aligned} U &= U_{aa} + U_{bb} + U_{ab} , \\ U_{aa} &= \sum_{i=1, j>i}^{N_a} \varphi_{aa}(|\mathbf{r}_{a,i} - \mathbf{r}_{a,j}|), \quad U_{ab} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_a} \sum_{j=1}^{N_b} \varphi_{ab}(|\mathbf{r}_{a,i} - \mathbf{r}_{b,j}|), \\ U_{bb} &= \sum_{i=1}^{N_b} \left[\varphi_{1,bb}(\mathbf{r}_{b,i}) + \sum_{j>i} \varphi_{2,bb}(|\mathbf{r}_{b,i} - \mathbf{r}_{b,j}|) \right], \end{aligned} \quad (3)$$

где U_{aa} , U_{bb} , U_{ab} – потенциальные функции взаимодействия для систем частиц газа с газом, металла с металлом и газа с металлом соответственно. Каждый вид взаимодействия описывается с помощью соответствующего парного потенциала φ_{ll} . Для взаимодействия молекул азота между собой использовался потенциал Ми в форме "n-6", адаптированный в работе к расчетам смеси водорода и азота:

$$\varphi_{ij}(r_{ij}) = \frac{4\varepsilon}{k_B} \left(\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^n - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right), \quad r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|;$$

Для взаимодействия атомов никеля между собой использовался Морзе:

$$\varphi_{ij}(r_{ij}) = \frac{D}{k_B} \left(1 - \exp[-a \cdot r_{ij}] \right)^2,$$

или потенциал погруженного атома (EAM – Embedded atom model), который учитывает не только парные взаимодействия $\varphi_{2,bb}$, но и влияние окружения на определенную частицу $\varphi_{1,bb}$. Для учета взаимодействий газ-металл использовался стандартный потенциал Леннарда-Джонса с параметрами, рассчитанными по формулам Лоренца-Бершелота.

Решение системы уравнений (1) проводится с помощью разностной схемы Верле в скоростной форме:

$$\mathbf{r}_{l,i}^{n+1} = \mathbf{r}_{l,i}^n + \mathbf{v}_{l,i}^n \Delta t + \frac{\mathbf{F}_{l,i}^n (\Delta t)^2}{2 m_{l,i}}, \quad \mathbf{v}_{l,i}^{n+1} = \mathbf{v}_{l,i}^n + \frac{\mathbf{F}_{l,i}^{n+1} + \mathbf{F}_{l,i}^n}{2 m_{l,i}} \Delta t, \quad i = 1, \dots, N_l, \quad l = a, b. \quad (4)$$

Здесь Δt – шаг интегрирования (по времени), n – номер шага, \mathbf{F}^{n+1} – значение силы на данном шаге. В начальный момент времени задаются координаты и скорости всех частиц. Далее на каждом временном шаге решаются уравнения движения, в том числе вычисляются новые значения векторов сил взаимодействия, новые координаты и скорости частиц. Расчеты проводятся с учетом граничных условий и внешнего воздействия на систему в зонах, где это воздействие присутствует.

Кинетическая энергия системы E_K , кинетическая энергия теплового движения E_T и полная энергия системы E вычисляются отдельно для частиц каждого типа $l = a, b$ следующим образом:

$$E_K = \sum_i E_{K,l,i}, \quad E_T = \sum_i E_{T,l,i}, \quad E = E_K + U, \quad (5)$$

$$E_{K,l,i} = \frac{m_{l,i} |\mathbf{v}_{l,i}|^2}{2}, \quad E_{T,l,i} = \frac{m_{l,i} |\mathbf{v}_{l,i} - \mathbf{v}_l|^2}{2},$$

$$\mathbf{v}_l = \frac{1}{N_l} \sum_i \mathbf{v}_{l,i}, \quad i = 1, \dots, N_l, \quad l = a, b. \quad (6)$$

Здесь $E_{K,l,i}$ – кинетическая энергия частицы с номером i , $E_{T,l,i}$ – тепловая кинетическая энергия частицы с номером i , $|\mathbf{v}_{l,i}|$ – длина вектора скорости i -й частицы типа l , $\mathbf{v}_l = (v_{x,l}, v_{y,l}, v_{z,l})$ – скорость центра масс системы частиц типа $l = a, b$.

Температура T системы частиц газа или металла определяется следующим образом:

$$T = \frac{2 \langle E_T \rangle}{d N k_b}. \quad (7)$$

Здесь d – число степеней свободы частиц, k_b – постоянная Больцмана. В дальнейшем, если не сказано обратное, $d = 3$.

Диагональные компоненты тензора давления для системы частиц типа $l = a, b$ определяются с помощью соотношения:

$$P_{\alpha\alpha} = \frac{1}{V} \sum_i m_i (v_{i,\alpha} - v_\alpha)^2 + \frac{1}{V} \sum_i \sum_{j>i} r_{ij,\alpha} \cdot F_{ij,\alpha}, \quad i = 1, \dots, N_l. \quad (8)$$

Здесь V – объем рассматриваемой системы, $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$, \mathbf{F}_{ij} – сила взаимодействия между i -й и j -й частицами, α – координата x , y или z соответственно. Индекс типа частиц из формулы удален для наглядности выражения.

Давление в системе в трехмерной постановке задачи определяется формулой

$$p = \frac{1}{3} (p_{xx} + p_{yy} + p_{zz}). \quad (9)$$

Начальные условия на молекулярном уровне определяются равновесным термодинамическим состоянием системы частиц.

1.3 Другие варианты метода динамики частиц

Для описания больших объемов материала, а тем более, макроскопических объектов, уже невозможно придерживаться молекулярной концепции, и частицы должны представлять собой элементы более крупного масштабного уровня (мезоуровня), такие, как, например, зерна материала. Такой подход интенсивно развивается в механике как альтернатива или дополнение к континуальному описанию материалов при сильном деформировании и разрушении, при изучении гранулированных и сыпучих сред. На этом масштабном уровне обычно разделяют продольную (центральную) и касательную составляющие взаимодействия частиц; наряду с упругим взаимодействием часто рассматривают также непотенциальные силы, особенно важные на касательном направлении. Существует несколько модификаций такого подхода, различающиеся не столько, по сути, сколько по области приложения. Так, широкое распространение получил метод дискретных элементов, используется также названия "*крупнозеренная*" (*coarse grain*) *молекулярная динамика*, *динамика мезочастиц* и др.

Несомненное преимущество метода частиц по сравнению с методами, основанными на концепции сплошной среды, заключается в том, что он требует значительно меньше априорных предположений о свойствах материала. Действительно, использование только простейшего потенциала взаимодействия (например, типа Леннард-Джонса) и незначительной диссипации позволяет моделировать такие сложнейшие эффекты, как пластичность, образование трещин, разрушение, температурное изменение свойств материала, фазовые переходы. Для описания каждого из этих эффектов в рамках сплошной среды требуется отдельная теория, в то время как при моделировании методом частиц эти эффекты получаются автоматически, в результате интегрирования уравнений движения. В частности необратимость механических процессов достигается за счет перехода механической энергии длинноволновых движений материала в тепловую энергию хаотического движения частиц.

Потенциал взаимодействия в динамике частиц играет такую же роль, что и определяющие уравнения в механике сплошной среды. Однако структура потенциала неизмеримо проще, чем у определяющих уравнений, так как он представляет собой скалярную функцию расстояния, в то время

как определяющие уравнения представляют собой операторы, в которые входят тензорные характеристики напряженного состояния и деформирования, а также термодинамические величины. Конкретный вид потенциала взаимодействия частиц определяется из сравнения механических свойств компьютерного и реального материалов. Для простейших характеристик, таких как, например, упругие модули, это сравнение может быть проведено аналитически. В остальных же случаях соответствие устанавливается на основе тестовых компьютерных экспериментов.

Ограниченное применение метода частиц в механике разрушения до настоящего времени связано с тем, что этот метод требует значительных компьютерных ресурсов. Интенсивное развитие многопроцессорных вычислительных систем в России делает возможным моделирование механических свойств материалов с высокой степенью достоверности. Метод частиц обладает тем преимуществом, что, в силу ограниченности радиуса взаимодействия между частицами, он допускает почти полное распараллеливание процессов, происходящих в смежных областях пространства. Это позволяет эффективно применять данный метод на многопроцессорных вычислительных системах, полностью реализуя их возможности по увеличению быстродействия и управлению большими объемами данных.

В континуальной механике в задачах сильного деформирования наряду с сеточными методами и методом конечных элементов также широко стали применяться методы частиц, такие как метод сглаженных частиц, метод крупных частиц, метод частиц в ячейках и др. В отличие от перечисленных выше дискретных методов, где дискретность проявляется на физическом уровне написания уравнений динамики и взаимодействия частиц, в данных методах дискретность выступает в качестве математического приема решения континуальных уравнений механики сплошной среды. Однако эта алгоритмическая схожесть дискретных и континуальных подходов может послужить основой для их сращивания и установления связи между различными масштабными уровнями.

Цепочка математических моделей, описывающих физико-механические процессы в материале, может состоять из отдельных модулей, специализирующихся, соответственно, на описании атомарной структуры (метод молекулярной динамики), описания мезоструктуры (метод частиц применительно к зернам и гранулам) и моделирования макроскопических процессов (сращивание с континуальными методами, такими как метод конечных элементов и метод сглаженных частиц). С помощью аналитического аппарата могут получаться зависимости, позволяющие в дальнейшем в ходе расчета осуществлять связь между параметрами моделирования на разных масштабных уровнях, динамически передавать данные и осуществлять параллельное моделирование процессов. Так, моделирование развития трещины может включать атомарное моделирование процессов разрушения в ее вершине, мезоскопическое моделирование развития берегов трещины и макроскопическое моделирование деформирования образца с трещиной.

2 Численные методы частиц

2.1 Численный метод частиц в ячейках

Метод частиц в ячейках ([англ. Particle-in-Cell, PiC](#)) — [метод численного решения](#) некоторых видов [дифференциальных уравнений в частных производных](#). Разработан Харлоу (F. N. Harlow) в [Лос-Аламосской лаборатории](#) (LANL, находится в Нью-Мексико, США) в середине 50-х годов. Применяется для моделирования процессов [газовой динамики](#) и [гидродинамики](#), а также при [моделировании плазмы](#).

Ф. Х. Харлоу. Численный метод частиц в ячейках для задач гидродинамики // Вычислительные методы в гидродинамике. — М.: Мир, 1967. 460 с.

2.2 Численный метод крупных частиц

Метод крупных частиц – [численный метод](#) решения задач [гидроаэромеханики](#), основанный на последовательном использовании эйлерового и лагранжевого подходов, с помощью аппроксимаций в неподвижных узлах расчётной сетки и последующего рассмотрения взаимодействия расчётных ячеек в качестве независимых крупных частиц жидкости. Метод крупных частиц является развитием метода [Метода частиц в ячейках Харлоу](#). Широко используется для исследования аэрогазодинамических течений, дифракционных задач, трансзвуковых потоков, явлений взаимодействия излучения с веществом и др.

Белоцерковский О.М., Давыдов Ю.М. Метод крупных частиц в газовой динамике. М.: Наука, 1982. 370 с.

2.3 Численный метод сглаженных частиц

Гидродинамика **сглаженных частиц** ([англ. Smoothed Particle Hydrodynamics, SPH](#)) — [вычислительный метод](#) для [симуляции жидкостей](#) и [газов](#). Используется во многих областях исследований, включая [астрофизику](#), [баллистику](#), [вулканологию](#) и [океанографию](#). Метод гидродинамики сглаженных частиц является не-сеточным ([англ. mesh-free](#)) [лагранжевым методом](#) (то есть координаты движутся вместе с жидкостью), и разрешающая способность метода может быть легко отрегулирована относительно [переменных](#), таких как [плотность](#).

Метод SPH работает путём деления жидкости на дискретные элементы, называемые частицами. Эти частицы имеют пространственное расстояние (известное как «длина сглаживания»), обычно представляемая в уравнениях как h , на котором их свойства «сглаживаются» [функцией ядра](#). Это значит, что любая физическая величина любой частицы может быть получена путём суммирования соответствующих величин всех частиц которые находятся в пределах двух сглаженных длин. Например, [температура](#) в точке зависит от температуры всех частиц на расстоянии 2σ

Влияние каждой частицы на свойства оценивается в соответствии с её плотностью и расстоянием до интересующей частицы. Математически, это описывается функцией ядра (обозначается W). В качестве функции ядра часто используют [функцию Гаусса](#) (функция [нормального распределения](#)) или [кубический сплайн](#). Последняя функция равна нулю для частиц находящихся дальше, чем две сглаженные длины (в отличие от функции Гаусса, где имеется небольшое влияние на любом конечном расстоянии). Это позволяет экономить вычислительные ресурсы, исключая относительно малое влияние отдаленных частиц. Свойства функции ядра:

$$\int W(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|, h) d\mathbf{r} = 1, \quad W(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|, h) \rightarrow \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \quad h \rightarrow 0.$$

Значение любой физической величины в точке \mathbf{r} , задаётся формулой:

$$A(\mathbf{r}) = \sum_j m_j \frac{A_j}{\rho_j} \cdot W(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|, h),$$

где m_j – масса частицы j , A_j – значение величины A для частицы j , ρ_j – плотность связанная с частицей j , и W – функция ядра упомянутая выше. Например, плотность частицы i может быть выражена как:

$$\rho_i = \rho(\mathbf{r}_i) = \sum_j m_j W(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|, h),$$

где суммирование включает все частицы в симуляции.

Аналогично, пространственная производная количества может быть получена используя [интегрирование по частям](#) для смещения [оператора набла](#) (∇) от физической величины к функции ядра:

$$\nabla A(\mathbf{r}) = \sum_j m_j \frac{A_j}{\rho_j} \nabla W(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|, h),$$

Хотя размер длины сглаживания может быть фиксирован и в пространстве, и во времени, это не позволяет использовать всю мощь SPH. Назначая каждой частице её собственную длину сглаживания и разрешая ей меняться со временем, разрешающая способность симуляции может автоматически подстраивать себя к локальным условиям. Например, в очень плотной области, где много частиц расположены близко одна к другой, длина сглаживания может быть сделана относительно короткой, приводя к высокому пространственному разрешению. И наоборот, в областях с малой плотностью, где частицы размещены далеко одна от другой и разрешающая способность низкая, длина сглаживания может быть увеличена, оптимизируя вычисления для данной области.

Объединённая с [уравнением состояния](#) и [интегратором](#), гидродинамика сглаженных частиц может эффективно симулировать гидродинамические потоки. Однако традиционная искусственная формулировка вязкости, используемая в гидродинамике сглаженных частиц, имеет тенденцию «смазывать» ([англ. smear out](#)) [ударные волны](#) и контактные разрывы в гораздо большей степени, чем современные основанные на сетках методы.

В методе SPH уравнения газовой динамики имеют вид

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = -\rho_i \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i) \cdot \nabla W(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|, h),$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}_i}{\partial t} = -\sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2} + \Pi_{ij} \right) \cdot \nabla W(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|, h),$$

$$\Pi_{ij} = \begin{cases} (-\alpha c_{ij} + \beta \mu_{ij}^2) / p_{ij}, & (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i)(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) < 0, \\ 0, & (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i)(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) \geq 0. \end{cases}$$

$$\mu_{ij} = \frac{h(\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i)(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|^2 + \varepsilon h^2}, \quad c_{ij} = \frac{c_i + c_j}{2}, \quad p_{ij} = \frac{p_i + p_j}{2}.$$

Адаптивность гидродинамики сглаженных частиц, основанной на Лагранжевом подходе, аналогична адаптивности современных сеточных кодов с применением адаптивных сеток [уточнения адаптивной сети \(англ.\)](#) ([англ. Adaptive mesh refinement](#)), хотя в последнем случае можно измельчить сетку согласно любому критерию, выбранному пользователем. Поскольку гидродинамика сглаженных частиц лагранжева по своей природе, то она ограничена в параметрах измельчения, используя только плотность.

Гидродинамика сглаженных частиц всё более часто используется для моделирования движения жидкостей. Это происходит из-за некоторых преимуществ метода SPH по сравнению с традиционными основанными на сетке методиками. Во-первых, SPH гарантирует сохранение массы без дополнительных вычислений, так как частицы сами по себе представляют массу. Во-вторых, SPH вычисляет давление от воздействия соседних частиц, также имеющих массу, а не решает систему линейных уравнений. Наконец, в отличие от основанных на сетке методик, которые должны проследивать границы жидкости, SPH создаёт свободную поверхность для непосредственно двухфазных взаимодействующих жидкостей, так как частицы представляют более плотную жидкость (обычно воду), а свободное пространство представляет более лёгкую жидкость (обычно воздух). По этим причинам благодаря SPH возможно моделировать движение жидкости в режиме реального времени.

Однако, и SPH, и основанные на сетке методики всё ещё нуждаются в визуализируемой свободной поверхностной геометрии и используют полигонизационные методики, такие как metaballs, marching cubes, point splatting или <ковровую> визуализацию (<carpet> visualization). Для газа более уместно использовать непосредственно функцию ядра, чтобы произвести рендеринг плотности газа (например, как сделано в пакете визуализации <SPLASH>).

Единственный недостаток SPH по сравнению с основанными на сетке методиками состоит в том, что необходимо большое количество частиц для создания симуляции с эквивалентной разрешающей способностью. В типичной реализации основанных на сетке методик и SPH, много вокселей или частиц будут находиться под поверхностью воды, в глубине водяного объёма, и никогда не будут визуализированы. Однако точность может быть значительно увеличена со сложными основанными на сетке методиками, особенно с теми, которые используются совместно с методами частиц (такими, как наборы уровней частиц).

Для некритических приложений, таких как компьютерные игры и кинофильмы, производительность и визуальный реализм намного более значимы, чем вычислительная точность. Muller и другие использовали SPH для симуляции воды, которая течёт в стакан. При этом использовалось несколько тысяч частиц, а частота кадров составляла около 5 кадров/сек. Kipfer и Westermann (Technical University at Munich, Germany) использовали SPH для симуляции реки. Такахиро Харада (англ. Takahiro Harada) разработчик видеоигр в 2007 г. использовал графические процессоры GeForce 8800 GTX для симуляции 49 153 частиц со скоростью 17 кадров/сек. Спустя 13 лет количество частиц возросло на 3-4 десятичных порядка.

<https://habr.com/ru/post/519032/>