

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
СПЕЦИАЛИЗИРОВАННЫЙ УЧЕБНО-НАУЧНЫЙ ЦЕНТР НГУ

*Д. А. Медведев, А. Л. Куперштох, Э. Р. Прууэл,
Н. П. Сатонкина, Д. И. Карпов*

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И ЯВЛЕНИЙ НА ПК

Учебное пособие

НОВОСИБИРСК
2010

УДК 53.072
ББК 32.973

М 42

Медведев Д. А., Куперштох А. Л., Прууэл Э. Р., Сатонкина Н. П., Карпов Д. И. Моделирование физических процессов и явлений на ПК: Учеб. пособие / Новосибирск: Новосиб. гос. ун-т., 2010. — 101 с.

ISBN 978-5-94356-933-3

Учебное пособие написано на основе преподавания одноименного спецкурса в Физико-математической школе при Новосибирском государственном университете (ныне Специализированный учебно-научный центр НГУ). Основное внимание уделено физическому содержанию задач, но детально разобран также ряд вычислительных алгоритмов, необходимых для моделирования.

Пособие предназначено для учащихся Физико-математических школ и специализированных классов, а также для студентов младших курсов высших учебных заведений.

Рецензент

докт. физ.-мат. наук, профессор А. П. Ершов

ISBN 978-5-94356-933-3

- © Новосибирский государственный университет, 2010
- © СУНЦ НГУ, 2010
- © Медведев Д. А., Куперштох А. Л., Прууэл Э. Р., Сатонкина Н. П., Карпов Д. И., 2010

Оглавление

Введение	6
1. Обязательные задания	8
1.1. Сложение колебаний	8
Задания	9
1.2. Фигуры Лиссажу	10
Задания	11
1.3. Движение маятника	11
1.3.1. Безразмерные переменные	12
1.3.2. Фазовые диаграммы	12
1.3.3. * Физический маятник	13
Задания	13
1.4. Движение в центральном поле (планета)	14
Задания	16
1.5. Случайные блуждания	17
1.5.1. Одномерные случайные блуждания	18
1.5.2. Средние значения	19
1.5.3. Функция распределения	19
1.5.4. Многомерные случайные блуждания	20
1.5.5. Случайные блуждания во внешнем поле. Изотермическая атмосфера	21
Задания	22
2. Задания для самостоятельной работы	24
2.1. Неравновесная агрегация, фракталы	24
2.1.1. Агрегация, ограниченная диффузией	25
2.1.2. Фрактальная размерность	25
2.1.3. Бессеточная модель	28
2.1.4. Химически-ограниченная агрегация	28
2.1.5. Баллистическая агрегация	28
2.1.6. Кластер–кластерная агрегация	29

Задания	29
2.2. Электрический пробой	30
2.2.1. Вычисление электрического потенциала	32
2.2.2. Критерии и модели роста стримеров	35
Задания	38
2.3. Молекулярная динамика	38
2.3.1. Уравнения МД	39
2.3.2. Алгоритм Верле	39
2.3.3. Вычисление ускорений	41
2.3.4. Начальные и граничные условия	41
2.3.5. Вычисление внутренних характеристик системы	42
2.3.6. Фазовые переходы в малых частицах	44
2.3.7. Уравнение состояния неидеального газа	46
2.3.8. *Примечание. Методы ускорения расчета	47
2.3.9. Химические реакции	48
Задания	49
2.4. Решеточные газы, решеточное уравнение Больцмана	50
2.4.1. Решеточные газы (Lattice-Gas Automata, LGA)	51
2.4.2. Решеточное уравнение Больцмана	53
2.4.3. * Модели LGA со взаимодействием между частицами	56
2.4.4. * Модель LBE с внешними силами и фазовыми переходами	57
2.4.5. Модель LBE для двухкомпонентных течений	59
2.4.6. Химические реакции в решеточных моделях	60
Задания	62
2.5. Химические реакции, стохастическое горение	64
2.5.1. Мономолекулярная экзотермическая реакция	64
2.5.2. * Решение обыкновенных дифференциальных уравне- ний	67
Задания	69
2.6. Теплопроводность, детерминированное горение	70
2.6.1. Размерная система уравнений	70
2.6.2. Система уравнений для безразмерных величин	71
2.6.3. Различные режимы горения	72
2.6.4. Явная разностная схема	73
2.6.5. * Неявные разностные схемы	74
2.6.6. * Метод прогонки	76
Задания	78

2.7.	Образование планетной системы	79
2.7.1.	Происхождение звезд и звездных систем	79
2.7.2.	Образование Солнечной системы	80
2.7.3.	Уравнения динамики частиц	81
	Задания	84
2.7.4.	Лирическое отступление. Звезды и люди	85
	Задания 2	86
2.8.	Колебания цепочек	86
2.8.1.	Гармоническая цепочка	87
2.8.2.	Ангармоническая цепочка. Задача Ферми – Паста – Улама	88
2.8.3.*	Преобразование Фурье	89
	Задания	90
2.9.	Рост дендритов	91
2.9.1.	Основные понятия и уравнения	92
2.9.2.	Модель роста дендритов	94
	Задания	96

Литература	97
-------------------	-----------

Введение

В течение многих лет на физическом факультете НГУ проводится компьютерный практикум ЧМФП (численное моделирование физических процессов) [1–3]. Практикум был создан по инициативе Л. М. Альтшуля, основной вклад в его развитие был сделан Г. Л. Коткиным. В СУНЦ НГУ этот практикум был существенно переработан, а также дополнен целым рядом новых постановок.

Это пособие представляет собой описание спецкурса «Моделирование физических процессов и явлений на ПК» для СУНЦ НГУ. Мы постарались уделить основное внимание физическому содержанию задач. Предполагается, что учащиеся знакомы с языком программирования Pascal, на котором выполнены программы.

Для того, чтобы основное внимание сосредоточить на собственно численном эксперименте, а не на программировании ввода-вывода и представления результатов, в курсе используется пакет графических программ и процедур обработки данных MPP (Modeling of Physical Processes), разработанный В. Г. Тупицыным, Т. Э. Овчинниковой и А. Л. Куперштохом. При этом на экране компьютера имеется графическое окно, в котором отображается поведение моделируемой системы, и таблица, где можно наблюдать и интерактивно изменять значения параметров и переменных. Описание графического интерфейса и основных процедур содержится в файле **instrmp.txt**. Некоторые дополнительные программы описаны в файле **instr2.txt**.

Спецкурс состоит из двух частей. На первом этапе учащиеся выполняют несколько обязательных заданий (обычно 4). Задания рекомендуется выполнять по порядку. К каждому заданию есть программа-заготовка. Названия файлов приведены в соответствующих разделах главы 1. Удобно модифицировать заготовки по ходу выполнения задания. Содержание главы 1 во многом пересекается с книгой [3], которую мы рекомендуем желающим получить более строгие теоретические выкладки.

На втором этапе предполагается самостоятельная работа над выбранным проектом. Некоторые темы для исследования описаны в главе 2.

Самостоятельно придуманные задачи приветствуются.

В конце пособия приведен список рекомендуемой литературы. Во многом изложение следует книге [4]. Интересующимся алгоритмами расчетов рекомендуем книгу [5] — замечательное пособие по методам вычислений. Остальные работы могут быть полезны желающим более подробно исследовать ту или иную проблему.

Разделы, отмеченные звездочкой и выделенные "таким шрифтом", — более трудные, они не обязательны для выполнения основного задания, поэтому при первом чтении их можно пропускать. Задания, отмеченные звездочкой, также являются более трудными.

Обновленный вариант этой книги доступен в электронном виде по адресу http://ancient.hydro.nsc.ru/MPP_Speccourse/mpp.pdf.

Глава 1.

Обязательные задания

1.1. Сложение колебаний

Программа **beats.pas**.

Многие процессы в природе периодически повторяются. Математически это можно выразить в виде зависимости от времени $f(t+T) = f(t)$. Величину T называют *периодом* функции. Часто используют также величину $\nu = 1/T$, называемую *частотой*, и $\omega = 2\pi\nu = 2\pi/T$ — *круговую частоту*.

Простейшая нетривиальная периодическая функция $f(t) = A \sin(\omega t + \varphi_0)$ описывает *гармонические колебания*. Величина A — *амплитуда* колебаний, φ_0 — *начальная фаза*.

В данном задании рассматривается сложение различных гармонических колебаний. Рассмотрим вначале сумму двух колебаний $y(t) = A_1 \sin(\omega_1 t) + A_2 \sin(\omega_2 t)$. Такая сумма может возникать, например, при сложении двух волн (волн на поверхности воды, звуковых, радиоволн) в случае, когда амплитуды их не слишком велики, так что выполняется *принцип суперпозиции*.

Результаты расчетов удобно представлять в графическом виде. Построим график функции $y(t) = A_1 \sin(\omega_1 t)$ (чтобы ее получить, достаточно задать в таблице $A_2 = 0$). Все знают, что график — это линия, состоящая из бесконечного числа точек — значений функции при непрерывном изменении аргумента. Понятно, что на практике мы можем вычислить значение функции только в конечном числе точек, например, в точках $t = n\Delta t$, $n = 1, 2, \dots$. Как выбрать шаг Δt ? Хотелось бы выбрать его побольше, чтобы за данное число операций просмотреть график на как можно большем интервале времени. Очевидно, однако, что слишком сильно увеличивать Δt тоже нельзя (начиная с $\Delta t \sim T$ полученная картина будет иметь мало общего с графиком функции $y(t)$).

Если период заранее известен, можно выбрать шаг по времени таким, чтобы на период попадало по крайней мере несколько точек графика. Как быть в том случае, когда период неизвестен? Существует *метод Рунге*, который состоит в следующем. При текущем Δt запоминаем вид картины на экране. Затем уменьшаем Δt вдвое. Если вид картины качественно изменяется, повторяем эту процедуру. Когда изменения прекратятся, можно взять предпоследнее значение, оно будет максимальным из допустимых. Если уменьшение шага не приводит к изменениям, можно увеличивать его по той же схеме. Главное здесь — правильно выбрать критерий изменения. Этот метод необходимо применять и в других случаях, например, при решении дифференциальных уравнений, чтобы гарантировать правильность результата.

При сложении двух колебаний с близкими частотами наблюдаются *биения* — на экране видны высокочастотные колебания, амплитуда которых периодически меняется, но с меньшей частотой. Наглядно объяснить, что происходит, можно с помощью *векторной диаграммы*. Величину $A \sin(\omega t)$ можно представить как проекцию на ось Y стрелки длиной A , вращающейся вокруг начала координат с угловой скоростью ω . Тогда сумма двух колебаний с частотами ω_1 и ω_2 — это сумма проекций двух стрелок, или проекция суммы двух векторов. Если амплитуды одинаковы, суммарный вектор направлен под углом $(\omega_1 + \omega_2)t/2$ (вращается с угловой скоростью $(\omega_1 + \omega_2)/2$, дает высокочастотное заполнение). Длина его меняется в соответствии с изменением угла между стрелками со скоростью $\omega_1 - \omega_2$ и отвечает за амплитуду огибающей.

Можно посмотреть, что получится при сложении большого числа гармонических колебаний, если их частоты кратны основной $\omega_k = k\omega$. Такая сумма называется *рядом Фурье*, ей можно аппроксимировать любую периодическую функцию. Слагаемые с частотами, кратными основной частоте, называются *гармониками*, например, слагаемое с частотой 9ω — девятая гармоника.

Задания

1. Выключите одно из колебаний, а частоту второго установите $\omega = 21$, не меняя при этом шага по времени ($\Delta t = 0,15$). Объясните получившийся график (две пересекающиеся синусоиды). Можно попробовать другие частоты. Что следует предпринять, чтобы высокочастотные колебания отображались правильно?

2. Верните параметры в начальное состояние (можно просто перезапустить программу). На графике видны высокочастотные колебания, амплитуда которых изменяется так, что наблюдается низкочастотная огибающая. Каково отношение их частот? Как эти частоты получаются из $\omega_1 = 1$ и $\omega_2 = 1,2$?
3. Измените программу, чтобы складывались три колебания, частоты и амплитуды которых можно было бы задавать в таблице. Какой график получается при частотах $\omega_1 = 1$, $\omega_2 = 3$, $\omega_3 = 5$ и амплитудах $A_1 = 1$, $A_2 = 1/3$, $A_3 = 1/5$?
4. Получите график суммы N колебаний, число которых можно было бы задавать интерактивно. Интересны следующие зависимости амплитуды от частоты:

$$\sum_{k=1}^N \frac{\sin((2k-1)\omega t)}{2k-1} \quad \text{— рисуются «ступеньки»,}$$

$$\sum_{k=1}^N \frac{\cos((2k-1)\omega t)}{(2k-1)^2} \quad \text{— «треугольники»,}$$

$$\sum_{k=1}^N (-1)^{k+1} \frac{\sin(k\omega t)}{k} \quad \text{— «пила»}.$$

В двух первых случаях на разрывах функции видны вертикальные «выбросы», высота которых не уменьшается при увеличении числа слагаемых и составляет около 18 % от высоты ступеньки (*явление Гиббса*, о нем можно прочитать в [6]).

1.2. Фигуры Лиссажу

Программа **liss.pas**.

Подадим на вход Y осциллографа один гармонический сигнал $y(t) = A_1 \cos(\omega_1 t + \varphi_1)$, на вход X — другой $x(t) = A_2 \cos(\omega_2 t + \varphi_2)$. Можно убрать фазу в выражении для x , если сдвинуть начало отсчета времени на $\Delta t = \varphi_2/\omega_2$, получим $x(t) = A_2 \cos(\omega_2 t)$, $y(t) = A_1 \cos(\omega_1 t + \varphi)$, где $\varphi = \varphi_1 - \omega_1 \varphi_2/\omega_2$. На экране мы увидим кривую линию, которая задана в *параметрическом виде*, то есть x и y зависят от параметра t . Если отношение частот ω_1 и ω_2 — рациональное число, то эта кривая будет периодически повторяться, и мы увидим неподвижную картинку — *фигуру Лиссажу*. Иначе кривая линия в конце концов заполнит весь

прямоугольник $|y| \leq A_1, |x| \leq A_2$. При некоторых значениях отношения частот и амплитуд получаются простые геометрические фигуры (прямые, эллипсы и т. д.). В этом задании Вам предлагается исследовать вид фигур Лиссажу при различных параметрах сигналов.

Задания

1. Не меняя ничего в программе (изменяя только значения амплитуд и частот, выведенные в таблицу), получите на экране горизонтальную прямую, вертикальный отрезок, отрезки под углом $\pm 45^\circ$.
2. Измените программу так, чтобы получить круг, восьмерку, знак бесконечности.
3. Получите графики при равных частотах и амплитудах и сдвиге фазы, меняющемся от 0 до π .
4. Задайте частоту по одной из координат равной ω , а по другой — $\omega + \Delta\omega$, где $\Delta\omega \ll \omega$ (например, $\Delta\omega = \omega/1000$). Что происходит с графиком? В этом случае для вывода удобно использовать процедуру **Orbit**, пример ее применения есть в программе **planet.pas**.

1.3. Движение маятника

Программа **pendul.pas**.

Математический маятник представляет собой точечное тело массы m , подвешенное на невесомом нерастяжимом стержне длиной l в поле тяжести (ускорение свободного падения g). Введем угол отклонения маятника от вертикали α . Движение происходит по дуге окружности, скорость тела $v = l \frac{d\alpha}{dt}$. Уравнение динамики вращательного движения относительно точки подвеса $ml^2 \frac{d^2\alpha}{dt^2} = -mgl \sin \alpha$. Здесь ml^2 — момент инерции маятника. Рассматривая угол и скорость как функции времени, получаем систему из двух уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{d\alpha}{dt} &= \frac{v}{l}, \\ \frac{dv}{dt} &= -g \sin \alpha. \end{aligned}$$

При малых углах отклонения можно считать $\sin \alpha \approx \alpha$, и мы получаем уравнение гармонических колебаний $d^2\alpha/dt^2 + \omega_0^2\alpha = 0$. Частота

$\omega_0 = \sqrt{g/l}$ в этом случае не зависит от размаха колебаний. В общем случае, когда угол отклонения не мал, эту систему дифференциальных уравнений придется решать на компьютере.

1.3.1. Безразмерные переменные

В численном эксперименте следует избегать появления очень больших и очень малых чисел. Поэтому вовсе не обязательно привязываться к какой-либо стандартной системе единиц. Наоборот, удобно считать основные параметры задачи единичными величинами. Таких в динамических задачах можно выбрать три (так как имеется три основные величины: масса, длина и время). В данном случае удобно положить $m = 1$, $l = 1$, $g = 1$. Для того, чтобы перевести значения остальных переменных (кроме основных) в размерные величины, необходимо выразить их размерности через размерности основных и затем подставить численные значения основных величин. Например, скорость будет измеряться в единицах $v_0 = \sqrt{gl}$, энергия — в единицах $E_0 = mgl$, время — в единицах $t_0 = \sqrt{l/g}$ и т. д.

1.3.2. Фазовые диаграммы

В процессе движения маятника угол отклонения и скорость меняются со временем. Дополнительную информацию можно получить, изображая состояние системы в координатах «угол – момент импульса» (α, L). Здесь $L = ml^2 d\alpha/dt$. Такая система координат называется *фазовой плоскостью*, а линия движения состояния системы — *фазовой траекторией*. Углы отклонения маятника α и $\alpha + 2\pi$ физически неразличимы, поэтому можно рассматривать угол в конечных пределах (например, $-\pi \leq \alpha < \pi$). При этом надо представлять себе, что точки фазовой плоскости $(-\pi, L)$ и (π, L) отождествлены, то есть края фазовой плоскости $\alpha = \pm\pi$ «склеены» между собой.

При малых амплитудах колебания являются гармоническими $\alpha/\alpha_{\max} = \cos(\omega t + \varphi)$, $v/v_{\max} = \sin(\omega t + \varphi)$, фазовая траектория представляет собой окружность в координатах $(\alpha/\alpha_{\max}, v/v_{\max})$. Точка, показывающая текущее состояние маятника, движется по этой окружности с постоянной скоростью. Вообще, на фазовой плоскости любым периодическим движениям соответствуют замкнутые кривые.

В разных областях фазовой диаграммы характер движения может быть различным. Например, при увеличении амплитуды колебаний их

частота начинает зависеть от размаха, а при дальнейшем увеличении энергии маятника колебания сменяются вращением — фазовая траектория перестает быть замкнутой, угол постоянно увеличивается. Линия, отделяющая область с периодическим характером движения от области с непериодическим движением, называется *сепаратрисой*.

1.3.3. * Физический маятник

Физический маятник представляет собой тело конечных размеров, подвешенное в некоторой точке. Разобьем мысленно тело на маленькие кусочки, имеющие массы m_i и находящиеся в точках \mathbf{r}_i , считая от точки подвеса. Здесь и далее **полужирным шрифтом** будем обозначать векторы. Тогда полная масса тела $m = \sum_i m_i$, радиус-вектор центра масс $\mathbf{R} = \sum_i m_i \mathbf{r}_i / m$, момент инерции тела относительно горизонтальной оси вращения, проходящей через точку подвеса, $I = \sum_i m_i h_i^2$, где h_i — перпендикуляр от точки m_i до оси вращения. В положении равновесия вектор \mathbf{R} направлен вертикально вниз (вдоль \mathbf{g}). Уравнение движения для физического маятника

$$I \frac{d^2 \alpha}{dt^2} = M,$$

где $M = -mgR \sin \alpha$ — момент силы тяжести относительно точки подвеса. Например, для однородного стержня массой m и длиной l , подвешенного за один из концов, $I = ml^2/3$, $R = l/2$ и уравнение движения $d^2 \alpha / dt^2 = -3g \sin \alpha / 2l$. В общем случае это уравнение имеет тот же вид, что и для математического маятника, только частота колебаний другая. Например, при малых колебаниях стержня $\omega_0 = \sqrt{3g/2l}$.

Задания

1. Выясните, как меняется вид фазовой траектории при увеличении энергии колебаний. Найдите сепаратрису. Постройте график зависимости периода колебаний от амплитуды.
2. На реальный маятник действует сила трения. При не слишком больших скоростях можно принять $\mathbf{F}_{\text{тр}} = -k\mathbf{v}$. Что происходит при этом с фазовой траекторией? При каких значениях коэффициента k колебания не возникают?
3. Постройте графики кинетической, потенциальной и полной энергии для затухающих колебаний. В какие моменты времени происходит уменьшение полной энергии?

4. Качели — тоже маятник с затуханием. Допустим, вы раскачиваете качели, подталкивая их все время в одну сторону короткими импульсами в нижней точке. Смоделируйте этот процесс и постройте фазовую траекторию такого движения.

1.4. Движение в центральном поле (планета)

Программа **planet.pas**.

Наблюдение за движением планет Солнечной системы внесло большой вклад в установление физической картины мира. В частности, оно привело к открытию Ньютоном закона всемирного тяготения, объяснившего математически эмпирические законы движения планет, выведенные Кеплером.

Рассмотрим планету массой m , движущуюся вокруг звезды массой M . Сила притяжения по модулю равна

$$F = G \frac{Mm}{r^2},$$

где $\mathbf{r} = \mathbf{r}_m - \mathbf{r}_M$ — вектор расстояния между телами, и направлена вдоль \mathbf{r} . Считаем $M \gg m$, тогда ускорение звезды очень мало, и ее движением можно пренебречь. Направление начальной скорости планеты и линия, соединяющая планету со звездой, образуют плоскость, в которой происходит все дальнейшее движение. Назовем ее плоскостью XU и поместим звезду в начало координат. Радиус-вектор планеты $\mathbf{r} = (x, y)$. Вместо произведения GM можно ввести параметр $\alpha = GM$. Переходя к безразмерным переменным, удобно считать $\alpha = 1$. Сила, действующая на планету, $\mathbf{F} = -\alpha m \frac{\mathbf{r}}{r^3}$, а ускорение $\mathbf{a} = -\alpha \frac{\mathbf{r}}{r^3}$ не зависит от массы планеты. Поскольку сила всегда направлена по радиусу, ее момент $\mathbf{M} = [\mathbf{r} \times \mathbf{F}]$ равен нулю, и момент импульса $\mathbf{L} = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}]$ сохраняется (второй закон Кеплера). Движение планет происходит по эллипсам (первый закон Кеплера), а квадраты периодов обращения относятся как кубы больших полуосей (третий закон Кеплера). Потенциальная энергия планеты равна (полагая ее равной нулю на бесконечном расстоянии)

$$U = - \int_{\infty}^r F(x) dx = -GMm/r.$$

Первая космическая скорость v_I соответствует вращению по круговой орбите. *Вторая космическая скорость* v_{II} — минимальная скорость, необходимая, чтобы улететь на бесконечность. Хорошо известно,

что для тела в поле тяготения Земли вблизи поверхности $v_I = 7,9$ км/с, $v_{II} = 11,2$ км/с. (Иногда говорят еще про *третью космическую скорость*, это понятие возникает при рассмотрении движения тела одновременно под влиянием Земли и Солнца. Третья космическая скорость — минимальная скорость, необходимая для того, чтобы, взлетев с Земли, навсегда покинуть Солнечную систему $v_{III} = 16,4$ км/с.)

При рассмотрении движения планеты в поле тяготения Солнца можно обобщить понятие первой космической скорости v_I и получить ее значение, приравняв ускорение планеты за счет силы притяжения Солнца центростремительному ускорению при ее движении по круговой орбите радиуса r :

$$\frac{GM}{r^2} = \frac{v_I^2}{r}.$$

Отсюда $v_I = \sqrt{GM/r}$. Обратите внимание на то, что первая космическая скорость зависит от положения тела относительно центра тяготения.

Чтобы найти v_{II} , заметим, что полная энергия планеты $E = mv^2/2 - GMm/r$ сохраняется. На бесконечности должно быть $E = mv_\infty^2 \geq 0$, равенство как раз соответствует второй космической скорости для планеты (эту скорость еще называют скоростью отрыва). Таким образом,

$$\frac{mv_{II}^2}{2} - \frac{GMm}{r} = 0$$

и $v_{II} = \sqrt{2GM/r}$. Видно, что $v_{II} = \sqrt{2}v_I$.

Одна планета, обращающаяся вокруг звезды — это упрощенный случай. Например, в нашей Солнечной системе 8 больших планет (Плутон недавно был исключен из числа планет), а также множество астероидов и комет. Вокруг большинства планет обращаются спутники, например, — Луна. Все небесные тела влияют друг на друга. Если задача двух тел точно решается аналитически, то уже для трех возможно только приближенное решение или численный расчет.

Сила, действующая между двумя электрическими зарядами q_1, q_2 , находящимися на расстоянии r , определяется законом Кулона $F = q_1q_2/r^2$ и имеет тот же вид, что и гравитационное взаимодействие. Рассматривая в качестве тяжелой частицы протон, а в качестве легкой — электрон, получим так называемый *ридберговский атом*. В таком атоме расстояние между протоном и электроном достаточно большое, и электрон можно считать классической частицей. Очень интересно изучить поведение таких атомов в электрическом и магнитном полях.

Задания

1. Определите методом подбора первую космическую скорость. Запишите ее значение. Полезно сделать так, чтобы при нажатии определенной клавиши планета устанавливалась в начальное положение, имея нулевую начальную скорость по оси X , а вы попадали бы сразу в таблицу для того, чтобы изменить значение начальной скорости по оси Y . Разумно проверять значение переменной **key**, которой присваивается код последней нажатой клавиши после выполнения оператора **key:=Checkpoint()**, затем использовать процедуры **DrawTable(MainTable)** для отрисовки таблицы и **ModifyTable(MainTable)** для ее изменения.
2. Подберите вторую космическую скорость. Изобразите графики кинетической, потенциальной и полной энергии в зависимости от r . Во сколько раз v_{II} больше v_I ? Что происходит с графиком полной энергии при увеличении шага по времени?
3. Вычислите значение момента импульса, проверьте его сохранение, выведите график. Абсолютное значение $L = rps \sin \alpha$, α — угол между векторами \mathbf{r} и \mathbf{p} . Как выражается L через компоненты x, y, v_x, v_y ?
4. Проверьте выполнение третьего закона Кеплера.
5. Рассмотрите движение частицы в поле вида $F \sim r^n$. При каких n получаются замкнутые орбиты? В чем их сходство и отличие?
6. Учтите влияние на спутник торможения в атмосфере (простейший способ — ввести силу трения $\mathbf{F}_{тр} = -k\mathbf{v}\mathbf{v}$). Почему торможение приводит к увеличению кинетической энергии?
7. Рассмотрите движение одной частицы при наложении постоянной силы вдоль оси Z (это может быть, к примеру, электрическое поле). Дополнительная сила должна быть мала по сравнению с гравитационной, $F_{эл} \ll F_{гр}$. Выведите на экран вид орбиты в трех проекциях XY, XZ, YZ в разных окнах. Объясните, что происходит с орбитой. К чему приводит увеличение силы?
8. Как движется частица, если направление постоянной силы лежит в плоскости орбиты (классический эффект Штарка)? Желающим более подробно разобраться рекомендуем посмотреть [7], задачи 2.35, 2.36.
9. Рассмотрите движение частицы при добавлении магнитного поля,

направленного вдоль оси X (или Z) (классический эффект Зеемана). При движении заряженной частицы в магнитном поле возникает сила Лоренца $\mathbf{F}_L = q[\mathbf{v} \times \mathbf{B}]/c$. Как выражаются компоненты силы?

- 10.* Существует теорема Лармора о том, что влияние слабого магнитного поля (магнитная сила гораздо меньше силы притяжения) эквивалентно переходу в систему отсчета, вращающуюся с *Ларморовской частотой* $\Omega = \frac{q\mathbf{B}}{mc}$. Проверьте это утверждение.
11. Рассмотрите обратный случай — магнитная сила гораздо больше силы притяжения (или Ларморовская частота много больше невозмущенной частоты обращения, $\Omega \gg 2\pi/T$). Как выглядит траектория частицы в этом случае?
12. Добавьте еще одну планету, не взаимодействующую с первой. Как выглядит движение второй планеты при наблюдении ее с первой планеты? Чем отличаются картины, наблюдаемые с внутренней и внешней планет?
13. Введите взаимодействие между планетами. Подберите параметры так, чтобы получилась устойчивая система типа Земля – Луна, которая движется вокруг Солнца.

* Примечание. Для двух векторов $\mathbf{a} = (a_x, a_y, a_z)$ и $\mathbf{b} = (b_x, b_y, b_z)$ их векторное произведение $\mathbf{c} = [\mathbf{a} \times \mathbf{b}] = (c_x, c_y, c_z)$ имеет компоненты $c_x = a_y b_z - a_z b_y$, $c_y = a_z b_x - a_x b_z$, $c_z = a_x b_y - a_y b_x$.

1.5. Случайные блуждания

Программа **diffus.pas**.

Если поместить в стакан с чистой водой каплю краски, через некоторое время вся вода окрасится равномерно, даже если мы не будем ее перемешивать. Это явление называется *диффузией*. В его основе лежит хаотическое перемещение частиц краски под действием молекул воды. Таким же образом происходит распространение запаха в спокойном воздухе. С движением молекул связаны также явления *вязкости* и *теплопроводности*.

Хаотическое движение маленьких частиц вещества можно наблюдать в микроскоп. Первым такое наблюдение сделал Р. Броун (R. Brown) в

1827 году. В его честь такое движение называется броуновским (правильнее было бы брауновским). Полная теория броуновского движения дана в 1905–1906 гг. А. Эйнштейном и М. Смолуховским.

За движением отдельных молекул наблюдать невозможно, поэтому нельзя вывести закон движения для каждой частицы. Однако это и не нужно. Обычно необходимо знать только некоторые усредненные значения, например, концентрацию частиц на некотором расстоянии от начальной точки в заданный момент времени. К счастью, средние значения в случае большого числа частиц мало зависят от конкретного вида закона движения (см. также раздел 2.4). Поэтому для исследования можно задать закон движения в простейшем виде.

1.5.1. Одномерные случайные блуждания

Рассмотрим простую модель — пусть частицы могут двигаться только вдоль прямой, делая шаги случайной длины. Примем также, что величина и направление каждого шага определяются независимо от положения частицы и от предыдущих шагов (модель «пьяного моряка»). Будем наблюдать за частицей через равные промежутки времени. Координата частицы вычисляется по рекуррентной формуле $x_k = x_{k-1} + \delta_k$, где δ_k — очередной шаг блуждания. При отсутствии силового поля смещение влево и вправо равновероятны. В общем случае вероятность того, что длина шага лежит в промежутке от δ до $\delta + d\delta$, равна $dp = w(\delta)d\delta$. Функция w называется *плотностью вероятности* для величины шага δ , который называют *случайной величиной*. Примем вначале простейшую зависимость — симметричное *равномерное распределение*:

$$w(\delta) = \begin{cases} 1/2, & \text{если } |\delta| \leq 1 \\ 0, & \text{если } |\delta| > 1. \end{cases}$$

В языке Pascal имеется стандартный генератор случайных чисел **random**, который дает случайное вещественное число, равномерно распределенное в интервале от 0 до 1. С его помощью такую плотность вероятности для δ можно получить, если вычислять $\delta = 2 \cdot \mathbf{random} - 1$. Очевидно, что полная вероятность сделать хоть какой-нибудь шаг равна 1, то есть $p = \int_{-\infty}^{\infty} w(\delta)d\delta = 1$.

Среднее смещение за шаг по времени $\langle \delta \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \delta w(\delta)d\delta = 0$ — следует из того, что шаги влево и вправо равноправны. Нам понадобится

еще средний квадрат смещения за один шаг. Так как $-1 < \delta < 1$, то $\langle \delta^2 \rangle = \int_{-1}^1 \delta^2 w(\delta) d\delta = 1/3$. (Вообще, среднее значение любой функции

$f(\delta)$ вычисляется как $\langle f(\delta) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(\delta) w(\delta) d\delta$.)

1.5.2. Средние значения

Рассмотрим положение частицы в какой-либо момент времени. Пусть частица начинает движение в точке $x_0 = 0$ и после k шагов имеет координату $x_k = x_{k-1} + \delta_k$. Ее квадрат $x_k^2 = x_{k-1}^2 + 2x_{k-1}\delta_k + \delta_k^2$. Мы можем повторить опыт с частицей много раз (или выпустить сразу много частиц) и найти среднее значение координаты $\langle x_k \rangle$, которое равно $\langle x_k \rangle = \langle x_{k-1} \rangle + \langle \delta_k \rangle$, так как среднее значение суммы нескольких величин равно сумме их средних значений. Поскольку $\langle \delta_k \rangle = \langle \delta \rangle = 0$, то $\langle x_k \rangle = \langle x_0 \rangle = x_0 = 0$.

Теперь найдем средний квадрат координаты $\langle x_k^2 \rangle = \langle x_{k-1}^2 \rangle + 2\langle x_{k-1}\delta_k \rangle + \langle \delta_k^2 \rangle$. Случайные величины x_{k-1} и δ_k независимы, тогда среднее значение их произведения равно произведению средних $\langle x_{k-1} \rangle \langle \delta_k \rangle$. Поэтому второе слагаемое исчезает, остается $\langle x_k^2 \rangle = \langle x_{k-1}^2 \rangle + \langle \delta_k^2 \rangle = k\langle \delta^2 \rangle$, так как $x_0^2 = 0$. Номер шага пропорционален времени $k \sim t$, отсюда получаем известную формулу диффузии $\langle x^2 \rangle = 2Dt$ (в одномерном случае). В нашей простейшей модели блужданий коэффициент диффузии получается равным $D = \langle \delta^2 \rangle / 2 = 1/6$.

1.5.3. Функция распределения

Рассмотрим ансамбль частиц, которые одновременно начинают совершать одномерные случайные блуждания из начального положения $x = 0$. Более наглядно закономерности распределения частиц по оси x можно представить, если построить *гистограмму*. Для этого надо разделить отрезок, на котором находятся частицы, на интервалы равной длины и подсчитать число частиц, попадающих в каждый интервал. Затем на каждом интервале рисуется прямоугольник, высота которого пропорциональна числу частиц. Гистограмма показывает, как распределяются частицы по разным областям пространства.

Если мы будем одновременно увеличивать число частиц и число столбцов гистограммы (при этом в каждый столбец гистограммы должно попадать много частиц), то в пределе гистограмма приближается к

гладкой кривой, называемой *функцией распределения* $f(x)$. Вероятность найти частицу на малом интервале от x до $x + dx$ пропорциональна произведению $f(x)dx$. Например, после первого шага точная функция распределения наших частиц совпадает с $w(x)$.

После k шагов координата частицы $x_k = \sum_{i=1}^k \delta_i$. В теории вероятностей есть так называемая *центральная предельная теорема*: распределение случайной величины, значение которой является суммой большого числа случайных величин, стремится к распределению, называемому *нормальным*. Более подробно об этом можно прочитать в [4], гл. 11.

В нашем случае, для процесса диффузии частиц функция распределения на k -шаге по времени принимает вид нормального распределения:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi k \langle \delta^2 \rangle}} \exp\left(-\frac{x^2}{2k \langle \delta^2 \rangle}\right),$$

если все частицы в момент времени $t = 0$ находились в начале координат. Строго говоря, эта функция близка к полученному распределению при $k \gg 1$.

1.5.4. Многомерные случайные блуждания

Предоставим теперь нашим частицам возможность двигаться также по координате y — рассмотрим двумерные случайные блуждания (случай трех измерений получается аналогично). Можно независимо задавать смещение по вертикали δ_y равномерно распределенным таким же образом, как и смещение по горизонтали δ_x .

Функция распределения в двумерном случае представляется в виде произведения двух функций распределения по координатам x и y , так как x и y являются независимыми случайными величинами. Удобно перейти к распределению по радиусу $r = \sqrt{x^2 + y^2}$. Так как произведение плотностей вероятности $f(x)$ и $f(y)$ зависит только от r

$$f(x)f(y) = \frac{1}{2\pi k \langle \delta^2 \rangle} \exp\left(-\frac{r^2}{2k \langle \delta^2 \rangle}\right),$$

то вероятность найти частицу, расстояние которой от начала координат лежит в интервале от r до $r + dr$ (тонкое кольцо площадью $dS = 2\pi r dr$), равна

$$dp = f(r)dr = f(x)f(y)dS = \frac{r}{k \langle \delta^2 \rangle} \exp\left(-\frac{r^2}{2k \langle \delta^2 \rangle}\right) dr.$$

Видно, что при малых r эта вероятность возрастает линейно от нуля, потому что экспоненциальный множитель мало отличается от единицы. При увеличении r вероятность проходит через максимум (вычислите его самостоятельно), а затем убывает. Все это можно увидеть, построив гистограмму распределения частиц по радиусу.

В трехмерном случае вместо кольца надо рассмотреть тонкую сферу, объем которой $dV = 4\pi r^2 dr$. В результате получаем

$$dp = f(r)dr = f(x)f(y)f(z)dV = \frac{4\pi r^2}{(2\pi k\langle\delta^2\rangle)^{3/2}} \exp\left(-\frac{r^2}{2k\langle\delta^2\rangle}\right) dr.$$

При использовании равномерных распределений для δ_x и δ_y получается некоторая анизотропия, особенно сначала (после первого шага частицы заполняют квадрат, а не круг), однако она быстро сглаживается. Избавиться от анизотропии можно, если задавать δ_x и δ_y независимо равномерно распределенными от $-\delta$ до δ , а затем отбрасывать точки, оказавшиеся вне круга с радиусом δ . Другой способ — задание равномерно распределенных случайных величин длины шага δ_r и угла $\alpha = 2\pi \cdot \mathbf{random}$ — приводит к неравномерному распределению, плотность числа частиц уменьшается при увеличении r . Равномерную плотность можно получить, если задавать шаг по радиусу в виде $\delta_r = \delta\sqrt{\mathbf{random}}$ (подробности в [4], глава 10).

1.5.5. Случайные блуждания во внешнем поле.

Изотермическая атмосфера

Рассмотрим броуновские частицы, находящиеся в поле тяжести. Как и прежде, происходят случайные смещения частиц δ , которые можно интерпретировать как тепловое движение частиц. Но теперь одновременно с этим на частицу действует еще постоянная сила, направленная вниз. Ограничимся случаем, когда сила трения достаточна велика, при этом скорость дрейфа устанавливается быстро, и действие гравитации приводит к постоянному смещению a за шаг по времени

$$x_n = x_{n-1} + \delta_n + a.$$

Направленное смещение a должно быть малым по сравнению со случайными смещениями δ . Необходимо задать также непроницаемую границу снизу, чтобы частицы не могли падать до бесконечности. Через некоторое время установится равновесное распределение, концентрация частиц будет максимальна у границы, убывая по направлению вверх.

Такая модель соответствует распределению плотности в изотермической атмосфере. Частица массой m имеет в поле тяжести на высоте h потенциальную энергию $U = mgh$. В равновесии концентрация подчиняется распределению Больцмана

$$n(h) = n_0 \exp\left(-\frac{mgh}{kT}\right),$$

где $k = 1,38 \cdot 10^{-16}$ эрг/К — постоянная Больцмана. Характерная энергия теплового движения kT и средний квадрат случайного смещения $\langle \delta^2 \rangle$ пропорциональны. Найдем среднюю высоту облака частиц

$$\langle h \rangle = \frac{\int_0^{\infty} n(h)h dh}{\int_0^{\infty} n(h) dh} = \frac{kT}{mg}.$$

Для атмосферы Земли $\langle h \rangle$ составляет примерно 8 км — эта величина мала по сравнению с радиусом Земли, поэтому можно считать g постоянным. Реально плотность падает быстрее из-за уменьшения температуры с высотой. Интересно заметить, что в изотермической атмосфере произведение $mg\langle h \rangle = kT$ не зависит от g .

Задания

1. Постройте график зависимости от времени среднего смещения и среднего квадрата смещения частиц от начального положения. Объясните результаты, сравните полученные зависимости с теоретическими.
2. Постройте гистограмму распределения частиц (см. описание процедур **HistChannels** и **HistDraw**). Подумайте, из каких соображений следует выбирать число столбцов гистограммы.
3. Постройте одновременно с гистограммой график теоретической функции распределения (процедура **GraFun**). Согласуйте масштаб для функции с масштабом гистограммы.
4. Реализуйте в программе двумерные случайные блуждания, в нулевой момент времени все частицы расположены в точке $(0,0)$. Постройте график среднего квадрата радиуса, среднего квадрата x от времени. Постройте гистограмму распределения частиц по радиусу. Как объясняется спад к нулю при малых r (в области, где частицы расположены наиболее плотно)?

5. Рассмотрите одномерные случайные блуждания в поле тяжести с «упругим» отражением частиц от «нижней» стенки. Постройте гистограмму, определите среднюю высоту облака частиц $\langle h \rangle$ в зависимости от g . Как ведет себя выражение $\langle h \rangle g$? Для ускорения работы можно ввести два сорта частиц с разными массами (разные g) и вывести одновременно их распределения (для вывода вторых графиков используйте процедуры **TraceV** и **HistDrawT**).
- 6.* Другой, более подробный, способ описания броуновского движения — уравнение Ланжевена:

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\gamma\mathbf{v} + \mathbf{F}.$$

На частицу действует вязкое трение и случайная сила, возникающая в результате ударов молекул окружающей среды. За время Δt действие сил приводит к изменению скорости

$$\Delta\mathbf{v} = -\gamma\mathbf{v}\Delta t + \mathbf{F}\Delta t.$$

Среднее значение случайной силы $\langle \mathbf{F} \rangle = 0$, ее средний квадрат связан с коэффициентами вязкости и диффузии $\langle \mathbf{F}^2 \rangle = 3dD\gamma^2/\Delta t$. Здесь d — размерность пространства, Δt — шаг по времени. (Более правильно говорить о *корреляционной функции* силы, подробности можно посмотреть в [3].) Исследуйте, как меняется со временем средняя координата частицы, средний квадрат координаты. Определите коэффициент диффузии, изучите его зависимость от коэффициента сопротивления γ и величины случайной силы F .

Глава 2.

Задания для самостоятельной работы

Компьютер не добавляет возможностей человеку, а умножает их.

Список проектов для самостоятельной работы:

1. Неравновесная агрегация, фрактальные кластеры.
2. Электрический пробой.
3. Молекулярная динамика.
4. Решеточные газы, решеточное уравнение Больцмана.
5. Химические реакции, горение (стохастическое).
6. Теплопроводность, детерминированное горение.
7. Образование планетной системы.
8. Колебания цепочек.
9. Рост дендритов.

2.1. Неравновесная агрегация, фракталы

Существуют разнообразные физические процессы, основная черта которых — неравновесная агрегация. Примеры: образование частиц сажи, рост осадков при электрическом осаждении и т. п. Во всех случаях происходит необратимое прилипание частиц к растущему кластеру из-за сильного смещения равновесия в сторону твердой фазы, и вырастают разветвленные агрегаты (рост правильных ограниченных кристаллов происходит в условиях, близких к равновесным, когда возможно как прилипание частиц, так и их обратный переход в раствор). Примеры из других областей — «вязкие пальцы» при вытеснении вязкой жидкости менее

вязкой в пористой среде (например, нефти — водой или газом внутри пласта), а также электрический пробой (см. раздел 2.2).

2.1.1. Агрегация, ограниченная диффузией

Простейший случай — агрегация, ограниченная диффузией (Diffusion Limited Aggregation, DLA [8]). Для начала рассмотрим *сеточную модель*.

Возьмем регулярную сетку на плоскости, например, квадратную. В центр поместим затравочную частицу. Затем с достаточно большого расстояния будем выпускать по одной новые частицы. Выпущенная частица совершает случайные блуждания по сетке, делая шаги в одном из четырех доступных направлений с равной вероятностью. Если частица оказывается по соседству с затравкой, она прилипает и остается в этом узле. Затем выпускаем следующую частицу, которая может прилипнуть к одному из занятых узлов. Шаг решетки в этой модели соответствует длине связи между частицами (расстоянию устойчивого равновесия для взаимодействия двух частиц).

Некоторые указания. Для ускорения работы программы разумно выпускать частицы с круга радиусом немного больше R_{\max} — текущего максимального радиуса агрегата. Угловую координату естественно задавать равномерно распределенной на интервале от 0 до 2π , используя формулу

$$\alpha = 2\pi \cdot \mathbf{random}.$$

Если частица уходит далеко (например, дальше, чем $2R_{\max}$), уничтожаем ее и выпускаем новую.

2.1.2. Фрактальная размерность

Фигура на плоскости или тело в пространстве имеют размерность. Определить ее можно разными способами. В случае, когда у фигуры есть выделенная центральная точка, можно построить много сфер различного радиуса с центром в этой точке. Для каждой сферы можно вычислить массу части фигуры, которая оказалась внутри этой сферы. В случае, когда масса пропорциональна радиусу сферы в некоторой степени ($m \sim R^D$), показатель степени D называется размерностью тела. Это так называемый *метод сфер* или *ящичков*. Для линий $D = 1$, у плоских фигур $D = 2$, у «обычных» тел $D = 3$. Однако, многие объекты в природе имеют размерность, выражающуюся дробным числом (например,

у кластера DLA на плоскости размерность $D \approx 1,71 \pm 0,02$, в трехмерном пространстве $D \approx 2,50$). Такие тела, следуя Б. Мандельброту [9], называют фракталами (от латинского слова *fractus* — дробный). Фракталами являются также дендриты, вырастающие при электроосаждении металлов, кластеры, полученные при агрегации коллоидов; фрактальную структуру имеют ветви деревьев, кровеносная система и т. п.

Удобно строить график $\ln m$ в зависимости от $\ln R$. Если он близок к прямой, тангенс ее наклона как раз определяет D . Средняя плотность таких агрегатов $\rho_a \sim m/R^d \sim R^{D-d}$ — убывает с увеличением радиуса (здесь d — размерность пространства, $D < d$).

Другой способ определения размерности — *метод подсчета клеток* (box counting). Возьмем куб (шар) со стороной L_0 , который целиком заключает в себе объект. Разобьем куб на меньшие, со стороной L_1 (к примеру, хотя и не обязательно, $L_1 = L_0/2$). Пусть число непустых таких кубов (в которые попадает часть объекта) будет N_1 . Продолжим процедуру для L_2 и N_2 . Если оказывается, что $N_i \sim L_i^{-D}$, то размерность объекта равна D . К примеру, размерность береговой линии Норвегии $1,52 \pm 0,01$ [10]. Размерности, определенные этим и предыдущим способом, совпадают для «простых» тел и могут слегка различаться для «хитрых» кластеров.

Еще один способ может применяться при наблюдении за процессом роста агрегата от центра. В этом случае число частиц в кластере $N \sim R_{ch}^D$. В качестве характерного радиуса R_{ch} можно выбирать, например, максимальный радиус кластера R_{max} , однако более правильно использовать радиус гирации $R_g = \sqrt{\langle r^2 \rangle}$, смысл которого понятен при рассмотрении момента инерции кластера, состоящего из частиц единичной массы, $NR_g^2 = \sum r_i^2$.

* Экспериментально можно определять размерность агрегатов методом малоуглового рассеяния света, рентгеновских лучей или нейтронов. Зависимость интенсивности рассеяния от угла определяется выражением

$$I(s) \sim s^{-D}, \quad s = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \frac{\theta}{2},$$

где s — длина вектора рассеяния, θ — угол рассеяния, λ — длина волны излучения. Эта формула справедлива при $s \ll a^{-1}$, где a — размер частиц, из которых состоит кластер. Для больших s начинает преобладать рассеяние отдельными частицами, и $I(s) \sim s^{-4}$.

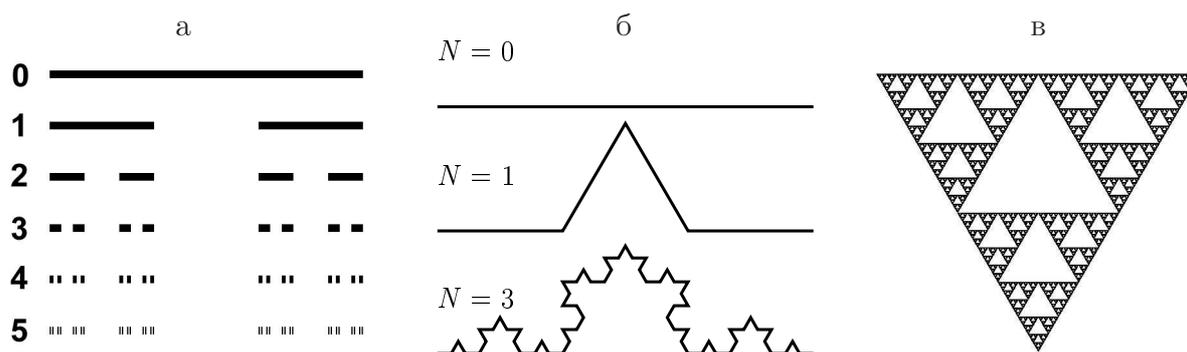


Рис. 2.1. Множество Кантора (а), кривая Коха (б), треугольник Серпинского (в)

Примеры «математических» фракталов

1. *Множество Кантора.* Возьмем отрезок и выкинем среднюю его треть. Далее у двух оставшихся частей также удаляем среднюю треть. Так продолжаем до бесконечности. На рис. 2.1,а показаны первые пять итераций. То, что остается, называется множеством Кантора («Канторовой пылью»). Его размерность легко определяется методом подсчета клеток. Удобно взять $L_{i+1} = L_i/3$, тогда $N_{i+1} = 2N_i$ и $D = \ln 2 / \ln 3 \approx 0,631$.
2. *Кривая Коха.* Снова начинаем с отрезка, среднюю треть которого заменяем на два кусочка такой же длины, но расположенных под углом 60° . Поступаем так же с каждым из получившихся отрезков. Размерность получившейся «снежинки» $\ln 4 / \ln 3 \approx 1,262$ (рис. 2.1,б).
3. *Треугольник Серпинского.* Берем равносторонний треугольник и соединяем середины сторон. Внутренний маленький треугольник выкидываем. Продолжаем процесс. Размерность оставшейся «салфетки» $\ln 3 / \ln 2 \approx 1,585$ (рис. 2.1,в).
4. *Траектория броуновской частицы.* При случайных блужданиях смещение частицы за время t изменяется по закону $r \sim \sqrt{t}$ (см. раздел 1.5). При этом длина пути $L = v_a t$, где v_a — средняя скорость движения. То есть, $L \sim r^2$, $D = 2$, если не учитывать самопересечения.

Желающим более подробно познакомиться с фракталами рекомендуем книгу [10].

2.1.3. Бессеточная модель

Структура полученных DLA-кластеров отражает структуру сетки (имеются выделенные направления). Чтобы получить более симметричные кластеры, можно отказаться от сетки. В этом случае рост происходит следующим образом: вначале помещаем в центр поля затравочную частицу, затем с круга некоторого радиуса выпускаем следующую, которая случайно блуждает. Если частицы сближаются на расстояние взаимодействия (например, их удвоенный радиус), они слипаются. После этого выпускаем новую частицу и т. д.

2.1.4. Химически-ограниченная агрегация

При диффузионно-ограниченной агрегации частица всегда прилипает к кластеру с вероятностью 1. Можно уменьшить вероятность прилипания. Такой процесс роста называется химически-ограниченной агрегацией. Он моделирует ситуацию, когда вероятность зависит от того, каким концом молекула повернута к другой. Это приведет к появлению более плотных агрегатов (увеличению размерности), потому что у частицы увеличится шанс проникать во внутренние области и заполнять пустоты. Размерность, однако, остается меньше размерности пространства, т. е. кластер остается фракталом.

Физически прилипание частицы к агрегату — это возникновение химической связи. Очевидно, что связь тем прочнее, чем больше соседей у данной частицы. Поэтому вероятность прилипания должна увеличиваться при росте числа занятых соседних узлов. В этом случае процесс роста приводит к образованию более плотных кластеров (размерность увеличивается). Тем не менее, агрегат остается фрактальным, это следствие необратимости — возможно только прилипание частиц к растущему кластеру, но не их обратный переход в свободное состояние.

2.1.5. Баллистическая агрегация

До сих пор мы рассматривали рост кластеров с точечной затравки. Однако, довольно часто встречаются ситуации, когда агрегаты растут на поверхности, например, при выпадении осадка на дне или стенках сосуда. Если новые частицы доставляются к растущему кластеру за счет диффузии, имеем просто модель DLA с измененными начальными условиями.

Другой случай — *баллистическая агрегация*, при которой частицы свободно падают по прямолинейным траекториям. Частица прилипает, когда оказывается рядом с занятым узлом. В этом процессе получается более плотный агрегат (но не сплошной), однако его граница сильно изрезана и является фракталом.

2.1.6. Кластер–кластерная агрегация

В случае роста агрегатов из первоначально однородной системы маловероятно, что возникнет только одна затравка. Скорее следует ожидать одновременного возникновения нескольких кластеров и их роста за счет поглощения мелких частиц, а также слипания друг с другом. Такой рост описывается моделью *кластер–кластерной агрегации*. При этом коэффициент диффузии (величина случайного смещения) может зависеть от размера агрегата. Ясно, что в этом случае размерность образовавшегося кластера будет меньше, чем в модели DLA (большие кластеры не могут проникать внутрь пустот, поэтому агрегат получается более разреженным).

Задания

1. Напишите программу модели DLA на сетке.
2. Постройте график зависимости $\ln N$ (числа частиц в кластере) от $\ln R_g$ (радиуса гирации). Определите размерность агрегата.
3. Определите размерность кластера методом ящиков.
4. Найдите зависимость размерности от вероятности прилипания частицы. Указания. Генератор случайных чисел **random** выдает числа, равномерно распределенные между 0 и 1. Поэтому условие **random** $< p$ будет выполняться с вероятностью p , если $p \leq 1$. В случае неудачной попытки прилипания необходимо вернуть частицу в предыдущую точку во избежание ее попадания в уже занятые узлы.
5. Рассмотрите случай химически-ограниченной агрегации. Можно задать, например, следующие вероятности прилипания в зависимости от числа соседей: $p_1 = 0,01$, $p_2 = 0,1$, $p_3 = 0,9$. Определите размерность полученного кластера.
6. Реализуйте бессеточную модель DLA.

7. Напишите программу моделирования баллистической агрегации. Определите методом ящиков фрактальную размерность границы.
8. Рассмотрите кластер-кластерную агрегацию. Какова размерность получившегося агрегата?

2.2. Электрический пробой

Человек познакомился с искровым разрядом задолго до того, как приступил к научному познанию мира. Феерическое и грозное явление природы — молния с точки зрения физики является собой пример грандиозного искрового разряда в атмосфере. Началом систематического исследования электрического разряда можно считать экспериментальные исследования Б. Франклина в середине XVIII века, в которых было доказано единство природы молнии и лабораторной электрической искры.

С развитием электроэнергетики искровой разряд пришел в технику, принеся с собой массу проблем. В частности, оказалось, что искровые разряды могут возникать между различными частями электрооборудования, находящегося под электрическим напряжением, между проводами высоковольтных линий электропередачи и землей, вызывая короткое замыкание и, как следствие, выход оборудования из строя. Явление электрического разряда стали интенсивно изучать. Результаты этих исследований пролили свет на физику многих микроскопических процессов, приводящих к разряду, и позволили создать устройства, использующие это явление. Хорошо известно, что электрический разряд используется: в люминесцентных лампах для освещения и ночной рекламы, в ртутно-кварцевых лампах с целью получения ультрафиолетового излучения, в плазменных мониторах для создания изображения и т. д. В физических экспериментах с помощью газового разряда создается плазма, которую затем можно использовать в различных целях, например, для создания МГД-генераторов, термоядерного синтеза и т. п. Несмотря на столь широкое применение и длительное изучение, до сих пор механизм возникновения некоторых разрядов, в частности искровых, не изучен до конца.

Возникновение искрового электрического разряда сильно зависит от условий эксперимента. В длинных искровых промежутках (когда расстояние между электродами составляет десятки сантиметров или даже метры) при постепенном увеличении напряжения между электродами вначале наблюдается коронный разряд. Коронный разряд наблюдается в виде синевато-фиолетового свечения на одном из электродов (като-

де), охватывающего ту область электрода, где поле наиболее сильное, и затухающего по мере удаления от металлической поверхности. Корона возникает в основном в области неоднородного поля — возле металлических выступов, «заусенцев», любых неоднородностей на электродах. Кстати, сильное впечатление производят фотографии короны, возникающей вокруг биологических объектов при разряде в высокочастотном электрическом поле.

При напряжениях, более высоких, чем те, которые приводят к образованию короны, в газах возникают так называемые стримеры. Стримеры представляют собой систему слабосветящихся проводящих каналов, образующуюся в газе в области наиболее сильного электрического поля. Стример прорастает, как правило, с одного из электродов и при высоких напряжениях может ветвиться. Ветвление стримера происходит нерегулярно, и на сегодняшний день можно считать, что эти ветвления носят случайный характер. Разветвленную стримерную вспышку часто называют импульсной короной. Размер области, в которой развиваются стримеры, может составлять несколько метров даже в лабораторных условиях. Скорость продвижения стримера вглубь межэлектродного промежутка не меньше 10 км/с и может достигать 10000 км/с. Вспышкой импульсной короны начинается искровой разряд в воздухе или других газах в длинных промежутках между электродами. В случае пробоя в газах при определенных условиях энерговыделения в стримерных каналах они превращаются в так называемые лидерные каналы. Лидер — это плазменное образование очень высокой светимости и настолько высокой проводимости, что его в некотором смысле можно считать продолжением электрода. Скорость распространения лидера по порядку величины составляет 10 км/с. Перед головной частью лидера образуется стримерная корона, от которой зависит дальнейшая динамика лидерного канала. Развитие лидера определяет формирование искрового разряда в длинных газовых промежутках, так как именно лидерный процесс отвечает за «вынос» высокого потенциала электрического поля вглубь промежутка в направлении противоположного электрода.

На сегодняшний день менее всего изучен механизм роста и ветвления стримеров при электрическом разряде. Согласно современным представлениям, рост кончика стримера определяется величиной напряженности электрического поля перед ним. Величина электрического поля зависит не только от падения напряжения между электродами, но и от радиуса стримера и от скорости его роста. Эти три величины — радиус, локальная напряженность электрического поля и скорость роста кончика стриме-

ра — связаны между собой. При определенных значениях этих величин кончик стримера может разветвляться. В 1984 г. была предложена первая модель стохастического роста стримеров, в которой рост их ветвей связывался с локальным электрическим полем [11]. Основные положения модели изложены ниже. Модель легко реализуется на компьютере и позволяет качественно воссоздать картину системы стримеров, наблюдаемых при искровом разряде в газах. Авторы модели Нимейер, Пьетронеро и Висман (НПВ) использовали ее для описания пространственной структуры газового разряда, возникающего на поверхности диэлектрика, помещенного между двумя проводниками, в газе. Картины такого поверхностного разряда наблюдались впервые в 1777 г. и получили название фигур Лихтенберга. Предлагается смоделировать возникновение фигур Лихтенберга с помощью моделей стохастического роста стримеров.

2.2.1. Вычисление электрического потенциала

Рассмотрим простейший случай — вещество однородно (диэлектрическая проницаемость среды ε везде одинакова), и первоначально в нем нет свободных зарядов.

По теореме Гаусса поток вектора индукции электрического поля \mathbf{D} через любую замкнутую поверхность S равен нулю при отсутствии внутри поверхности свободных электрических зарядов

$$\oint_S \mathbf{D} \cdot \mathbf{n} ds = 0$$

(\mathbf{n} — вектор внешней нормали к поверхности). Для большинства диэлектриков индукция электрического поля выражается через электрическое поле как $\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}$. В общем случае вектор \mathbf{E} имеет три компоненты (E_x, E_y, E_z) .

Рассмотрим в пространстве кубическую решетку с ячейками со сторонами h по всем координатам $\Delta x = h$, $\Delta y = h$ и $\Delta z = h$. Сначала рассмотрим только один ряд ячеек вдоль оси x (рис. 2.2). Пусть электрический потенциал принимает в центре i -той ячейки значение $\varphi_{i,j,k}$. Тогда проекция электрического поля на ось x на левой грани ячейки приближенно равна $E_x(x) \approx -(\varphi_{i,j,k} - \varphi_{i-1,j,k})/h$, а на правой грани $E_x(x + \Delta x) \approx -(\varphi_{i+1,j,k} - \varphi_{i,j,k})/h$. Заметим, что эти формулы являются конечно-разностными аппроксимациями первых производных. Поток вектора индукции электрического поля изнутри ячейки через эти две

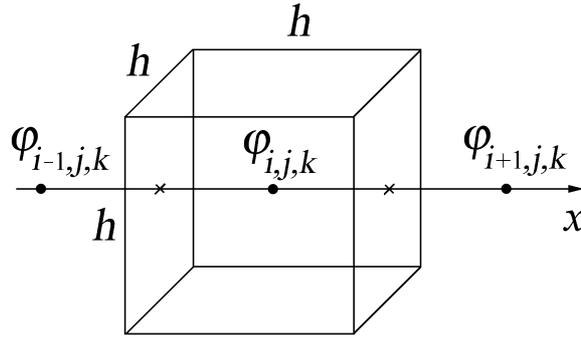


Рис. 2.2. Теорема Гаусса для кубической ячейки

границ равен

$$\Phi_x = \varepsilon E_x(x + \Delta x)h^2 - \varepsilon E_x(x)h^2 = -\varepsilon(\varphi_{i+1,j,k} - 2\varphi_{i,j,k} + \varphi_{i-1,j,k})h.$$

Аналогично поток через нижнюю и верхнюю грани равен

$$\Phi_y = \varepsilon E_y(y + \Delta y)h^2 - \varepsilon E_y(y)h^2 = -\varepsilon(\varphi_{i,j+1,k} - 2\varphi_{i,j,k} + \varphi_{i,j-1,k})h,$$

а через переднюю и заднюю грани —

$$\Phi_z = \varepsilon E_z(z + \Delta z)h^2 - \varepsilon E_z(z)h^2 = -\varepsilon(\varphi_{i,j,k+1} - 2\varphi_{i,j,k} + \varphi_{i,j,k-1})h.$$

Складывая эти уравнения, вычислим полный поток изнутри ячейки и поделим его на объем ячейки

$$\begin{aligned} \frac{\Phi}{h^3} &= \frac{\Phi_x + \Phi_y + \Phi_z}{h^3} = -\varepsilon \frac{(\varphi_{i+1,j,k} - 2\varphi_{i,j,k} + \varphi_{i-1,j,k})}{h^2} \\ &\quad - \varepsilon \frac{(\varphi_{i,j+1,k} - 2\varphi_{i,j,k} + \varphi_{i,j-1,k})}{h^2} - \varepsilon \frac{(\varphi_{i,j,k+1} - 2\varphi_{i,j,k} + \varphi_{i,j,k-1})}{h^2}. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Каждая дробь представляет собой разностную аппроксимацию второй частной производной от потенциала по соответствующей координате. Так как в данном случае полный поток равен нулю, то при $h \rightarrow 0$ уравнение для потенциала в однородном диэлектрике сводится к хорошо известному уравнению Лапласа:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} = 0.$$

Для краткости уравнение Лапласа часто записывают в символической форме $\nabla^2 \varphi = 0$, где оператор $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$.

Используя условие равенства нулю полного потока из уравнения (2.1) можно также получить уравнение

$$\varphi_{i-1,j,k} + \varphi_{i+1,j,k} + \varphi_{i,j-1,k} + \varphi_{i,j+1,k} + \varphi_{i,j,k-1} + \varphi_{i,j,k+1} - 6\varphi_{i,j,k} = 0. \quad (2.2)$$

Далее будем рассматривать плоский случай. Потенциал изменяется только в плоскости XU , поэтому по теореме Гаусса для квадратной ячейки сетки с номером i, j вместо формулы (2.2) получим

$$\varphi_{i-1,j} + \varphi_{i+1,j} + \varphi_{i,j-1} + \varphi_{i,j+1} - 4\varphi_{i,j} = 0.$$

Последнее уравнение можно переписать в виде:

$$\varphi_{i,j} = \frac{1}{4}(\varphi_{i-1,j} + \varphi_{i+1,j} + \varphi_{i,j-1} + \varphi_{i,j+1}). \quad (2.3)$$

Таким образом, если потенциал в каждом узле равен среднему арифметическому по соседним узлам, то эти значения как раз являются решением уравнений электростатики. Из электростатики известно, что распределение потенциала в замкнутой области диэлектрика в отсутствие свободных зарядов полностью определяется условиями на границе этой области.

Систему уравнений (2.3) удобно решать методом итераций. «Новое» значение потенциала в каждом внутреннем узле вычисляется как среднее арифметическое «старых» значений потенциала в соседних с ним узлах по уравнению (2.3). Для того, чтобы начать итерации, необходимо задать для внутренних узлов расчетной области некие (вообще говоря, произвольные) начальные значения $\varphi_{i,j}$. При этом необходимые значения $\varphi_{i,j}$ на границе расчетной области берутся из граничных условий. Таким образом можно вычислить новые значения потенциала во всех внутренних узлах. Повторяем эту процедуру до тех пор, пока новые значения будут отличаться от старых не более, чем на заданную величину (погрешность вычисления потенциала). Доказано, что итерации всегда сходятся, т.е. значения потенциала стремятся к точному решению. Начальные значения потенциала можно задать произвольно, однако, для ускорения сходимости их следует выбирать как можно ближе к точному решению.

Часто рассматривается система, состоящая из двух горизонтальных плоских электродов, пространство между которыми заполнено диэлектриком. Удобно задать потенциал одного из электродов равным нулю. Тогда потенциал второго электрода равен приложенному напряжению. Для простоты можно рассматривать задачу в прямоугольной области, ограниченной сверху и снизу электродами, а слева и справа — вертикальными границами, на которых тоже необходимо задать граничные условия.

Один из вариантов таких условий — это линейное падение потенциала от его значения на одном электроде до его значения на другом. Кстати,

так же можно выбрать и начальное приближение для итераций внутри области. Другой вариант — периодические граничные условия, связывающие левую и правую границы диэлектрика. Для этого надо ввести слева и справа по одному фиктивному ряду узлов. В левый фиктивный ряд переписываются значения потенциала с правой границы расчетной области, а правый фиктивный ряд заполняется значениями с левой границы.

2.2.2. Критерии и модели роста стримеров

Рассмотрим теперь развитие стримерной структуры в диэлектрике. Каналы стримеров заполнены плазмой, которая проводит электрический ток. Будем считать, что в первом приближении заряд успевает растечься по веткам стримера так, что потенциал структуры становится равным потенциалу электрода. Это означает, что при вычислении поля в диэлектрике стримерную структуру можно считать продолжением электрода, то есть тоже границей расчетной области. Удобно рассматривать рост структуры с электрода, имеющего нулевой потенциал.

Зная потенциал, можно вычислить электрическое поле. Среднее значение проекции электрического поля на звено, соединяющее узлы A и B , $\langle E_{AB} \rangle = (\varphi_A - \varphi_B)/l_{AB}$. Нам необходимо знать поле на звеньях, выходящих из стримерной структуры. Считая ее потенциал нулевым, получаем просто $|E| = \varphi_B$ для горизонтальных и вертикальных звеньев, $|E| = \varphi_B/\sqrt{2}$ для диагональных. Здесь индекс B означает узлы, соседние со структурой.

Электрический пробой — стохастический процесс, каждое звено может пробиваться с некоторой вероятностью, зависящей от поля. Такая зависимость называется *критерием роста*. Рассмотрим некоторые примеры.

Модель НПВ. Нимейером, Пьетронеро и Висманом [11] впервые была предложена модель, которая позволяет описать рост структур разряда в диэлектриках. В основе модели лежит предположение, что структура растет случайным образом, причем вероятность роста зависит только от локального электрического поля вблизи структуры. Эта модель достаточно легко реализуется на компьютере. Обычно моделируется разряд в диэлектрике, помещенном между двумя электродами, разность потенциалов между которыми V .

Для расчета электрического поля в диэлектрике область моделирования покрывается сеткой (например, квадратной в двумерном случае или

кубической — в трехмерном), на которой решается уравнение Лапласа.

Рост начинается с одной из точек на электроде. На каждом шаге роста с некоторой вероятностью может образоваться одна веточка разрядной структуры. Эта веточка будет соединять два соседних узла сетки, один из которых уже принадлежит разрядной структуре, а другой является «диэлектриком». Таким образом, из каждого узла двумерной сетки может образоваться до восьми веточек, если учитывать возможность роста и по диагоналям (для трехмерной сетки до 26 веточек). Пусть E — среднее значение проекции электрического поля на направление, соединяющего два соседних узла сетки, между которыми может образоваться новая ветвь разрядной структуры. Обычно предполагают, что вероятность ее образования приблизительно равна $p(E) \sim E^\eta$, где η — так называемый показатель роста, зависящий только от свойств диэлектрика.

На каждом шаге роста случайный процесс выбора новой веточки структуры реализуется следующим алгоритмом. Пробегаем по всем M узлам решетки, в которые возможен рост, и рассчитываем сумму

$$Z = \sum_{k=1}^M E_k^\eta, \quad (2.4)$$

где величина E_k — своя для каждой пары узлов и находится на каждом шаге роста по текущему распределению электрического поля. Затем разыгрывается случайное число ξ , равномерно распределенное от 0 до Z . Для этого используется формула $\xi = Z \cdot \mathbf{random}$. Затем повторно шаг за шагом рассчитывается (2.4) до тех пор, пока текущая сумма $\sum_{k=1}^S E_k^\eta$ не станет больше ξ . Тот узел, для которого сумма стала больше ξ , присоединяется к структуре. Новой образовавшейся веточке присваивается значение потенциала того электрода, с которого начался рост этого стримера. Таким образом формируется эквипотенциальная структура.

В этой модели каждый шаг роста во времени имеет номер, но, к сожалению, номеру не сопоставлен реальный интервал времени Δt . Структура разряда растет до тех пор, пока не достигнет противоположного электрода.

Такая модель роста принадлежит к классу *однозвенных* моделей, в которых считается, что проводящее звено, появившееся первым, подавляет рост остальных на текущем временном шаге.

Флуктуационный критерий роста. В *многозвенных* моделях, наоборот, пренебрегается влиянием друг на друга проводящих звеньев, возникающих на данном шаге по времени. Пусть пробой происходит в тех

областях диэлектрика, где величина поля превосходит некоторое пороговое значение E_* (электрическую прочность). Однако это не совсем правильно, так как реальный диэлектрик не является полностью однородным. Существуют «слабые» места, связанные, например, с повышенной ионизацией за счет космических частиц, с флуктуациями температуры и т. д. То есть, критерий возникновения пробоя можно представить в виде $E > E_* - \delta$, где δ — величина флуктуации [12, 13]. Очевидно, что большие значения δ будут встречаться реже, чем маленькие. Для такого случая независимых редких событий распределение для флуктуаций экспоненциальное $f(\delta) \sim \exp(-\delta/g)/g$, где g — некоторый параметр. Такое распределение вероятностей можно получить, задавая случайное число $\delta = -g \ln(\mathbf{random})$ (подробности в [4], глава 10). Это соответствует вероятности пробоя $p(E) = \exp((E - E_*)/g)$.

Развитие пробоя происходит следующим образом: проверяются все звенья, выходящие из стимерной структуры. Те из них, для которых $E_i > E_* - \delta_i$, присоединяются к структуре. Эта модель роста принадлежит к классу многозвенных. Шаг роста во времени Δt считается постоянным.

Модели стохастического времени запаздывания. В [14] для каждого возможного звена было введено случайное время ожидания пробоя $\tau_i = -\ln(\mathbf{random})/r(E)$. Случайные числа отражают стохастический (вероятностный) характер процесса. Тогда вероятность пробоя за малый интервал времени τ_0 равна $p(E) = \tau_0 r(E)$. Функция вероятности роста $r(E)$ может быть любой быстро растущей функцией от локального электрического поля. В однозвенной модели пробивается звено, у которого время τ_i минимально [14]. Шаг роста во времени принимается равным этому минимальному значению τ_i .

В [15] была предложена многозвенная модель. В этом случае пробиваются все звенья, для которых τ_i меньше заданного шага по времени Δt , который можно выбрать постоянным.

Как уже говорилось, вероятность пробоя резко возрастает с увеличением напряженности электрического поля. Поэтому часто используется степенная аппроксимация $p(E) \sim E^\eta$. При $\eta = 2$ вероятность пробоя пропорциональна мощности локального энерговыделения $w = \sigma E^2$, где σ — характерная величина электропроводности плазмы в каналах структуры.

Интересно отметить, что такой вид $p(E)$ может описывать не только электрический пробой, но и другие процессы. Например, при $\eta = 0$ вероятность роста не зависит от поля, таким образом можно описать

рост колоний бактерий. При $\eta = 1$ вероятность $p \sim \nabla\varphi$, что соответствует диффузионно-ограниченному росту (модель DLA, см. раздел 2.1). С увеличением η вырастает все более разреженная структура, которая в пределе $\eta \rightarrow \infty$ вырождается в единственный прямолинейный канал.

Задания

1. Напишите программу вычисления электрического потенциала итерационным методом.
2. Рассмотрите пробой в геометрии «острие – плоскость» с использованием флуктуационного критерия роста.
3. То же в геометрии «точка – окружность». Как меняется густота ветвей с радиусом стримерной структуры? Для этого можно рассмотреть отношение числа точек пересечения структуры с окружностью некоторого радиуса к длине этой окружности.
4. Реализуйте в геометрии «острие – плоскость» или «точка – окружность» однозвенную или многозвенную модель со степенной зависимостью вероятности роста от напряженности поля $p \sim E^\eta$. Рассмотрите случаи $\eta = 0, 1, 2$. Как меняется геометрия стримерной структуры?

2.3. Молекулярная динамика

Метод молекулярной динамики (МД) рассматривает поведение вещества на микроуровне — мы наблюдаем за движением отдельных молекул. При этом мы хотим понять поведение сложной многочастичной системы. Ясно, что макроскопические тела содержат слишком много молекул, чтобы их можно было смоделировать. Однако, применение метода МД даже к «небольшим» системам, состоящим из нескольких сотен или тысяч частиц, дает много для понимания наблюдаемых свойств газов, жидкостей и твердых тел. Кроме того, малые системы (наночастицы) имеют свои совершенно новые свойства, изучение которых очень интересно.

Чтобы получать осмысленные ответы, необходимо знать, какие вопросы следует задавать. Какие параметры нужно использовать для описания систем многих частиц, каковы основные свойства и закономерности их поведения? Подобными вопросами занимается статистическая механика и кинетическая теория, с элементами которых необходимо будет познакомиться.

2.3.1. Уравнения МД

Несмотря на то, что микрочастицы (атомы и молекулы) — квантовые объекты, в некоторых практически интересных случаях возможно рассматривать их классически. Тогда влияние молекул друг на друга описывается *потенциалом взаимодействия* U . Простейший случай — парное взаимодействие, когда $U_{ij} = U(r_{ij})$, где $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$. Суммарная потенциальная энергия равна $E_p = \sum_{i<j} U_{ij}$. Сила, действующая на данную молекулу, $\mathbf{F}_i = -\partial E_p / \partial \mathbf{r}_i$. Движение частиц описывается вторым законом Ньютона:

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i.$$

Получаем систему N обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка (N — число частиц). Как известно, такую систему можно переписать в виде $2N$ уравнений первого порядка:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} &= \mathbf{v}_i, \\ \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} &= \mathbf{a}_i. \end{aligned}$$

Здесь мы ввели скорости частиц \mathbf{v}_i и их ускорения $\mathbf{a}_i = \mathbf{F}_i / m_i$.

2.3.2. Алгоритм Верле

Полученную систему уравнений необходимо дополнить начальными условиями $\mathbf{r}_i(t=0) = \mathbf{r}_{i0}$, $\mathbf{v}_i(t=0) = \mathbf{v}_{i0}$ и решить каким-нибудь методом. При решении наибольшее время занимает расчет сил взаимодействия (число операций пропорционально N^2), поэтому хорошо бы выполнять его пореже. В то же время, порядок точности метода хотелось бы иметь побольше (говорят, что порядок точности метода равен k , если при уменьшении шага по времени Δt ошибка уменьшается как $(\Delta t)^k$). Подходящим методом оказывается алгоритм Верле в скоростной форме ([4], глава 6). Он записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_i^{n+1} &= \mathbf{r}_i^n + \mathbf{v}_i^n \cdot \Delta t + \mathbf{a}_i^n \cdot \frac{\Delta t^2}{2}, \\ \mathbf{v}_i^{n+1} &= \mathbf{v}_i^n + \frac{1}{2}(\mathbf{a}_i^n + \mathbf{a}_i^{n+1})\Delta t. \end{aligned}$$

Здесь верхние индексы обозначают номер шага по времени. Этот алгоритм имеет третий порядок точности, если шаг по времени постоянный.

В данном методе необходимо использовать два массива для хранения ускорений на двух шагах по времени. Однако этого неудобства можно избежать, если немного переписать схему:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_i^{n+1/2} &= \mathbf{v}_i^n + \mathbf{a}_i^n \cdot \frac{\Delta t}{2}, \\ \mathbf{r}_i^{n+1} &= \mathbf{r}_i^n + \mathbf{v}_i^{n+1/2} \cdot \Delta t, \\ \mathbf{v}_i^{n+1} &= \mathbf{v}_i^{n+1/2} + \mathbf{a}_i^{n+1} \cdot \frac{\Delta t}{2}. \end{aligned}$$

В этом случае необходимо вычислить значения ускорений перед началом цикла по времени.

Критерием для выбора шага по времени может служить условие сохранения полной энергии системы

$$E = \sum_i \frac{m_i v_i^2}{2} + \sum_{i < j} U_{ij}.$$

Приемлемым можно считать сохранение E с точностью 0,5 %.

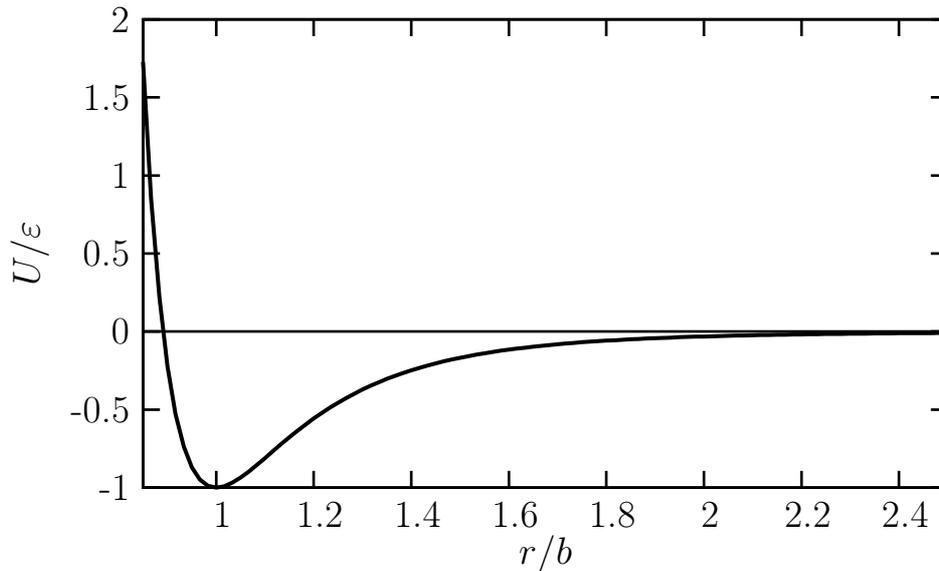


Рис. 2.3. Потенциал Леннарда-Джонса

Потенциал Леннарда-Джонса. Потенциал описывает парное взаимодействие молекул. Для удобства его можно записать в виде

$$U_{LJ}(r) = \varepsilon \left(\left(\frac{b}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{b}{r} \right)^6 \right).$$

Имеются два параметра: ε — энергия связи (глубина потенциальной ямы) и b — характерная длина (равновесное расстояние $r_0 = b$, при котором сила равна нулю, проверьте самостоятельно). Величину $r_p = b/2$

приближенно можно считать «радиусом» частиц. Первое слагаемое в скобках описывает сильное отталкивание на малых расстояниях из-за перекрывания электронных облаков, точный его вид не слишком важен. Второе слагаемое отвечает за притяжение на больших расстояниях. Зависимость r^{-6} соответствует Ван-дер-Ваальсовскому притяжению. Такой потенциал хорошо описывает инертные газы и может служить качественной моделью для других веществ. Его график показан на рис. 2.3.

Важное достоинство такого потенциала — то, что он *короткодействующий*. Сила взаимодействия быстро спадает с увеличением расстояния. Практически это означает, что при расстояниях $r > r_c$ взаимодействие можно не учитывать. Обычно в расчетах выбирают $r_c \geq 2,5b$. Значение r_c называется *радиусом обрезания*, то есть при $r > r_c$ силы не учитываются. При этом необходимо скорректировать значение потенциала так, чтобы он обращался в ноль на бесконечности $U'(r) = U_{LJ}(r) - U_{LJ}(r_c)$.

2.3.3. Вычисление ускорений

Как уже было сказано, расчет взаимодействий занимает основное время в ходе вычислений. Поэтому оптимизировать нужно именно его. Вдвое увеличить скорость можно, учитывая третий закон Ньютона $\mathbf{F}_{ij} = -\mathbf{F}_{ji}$. Примерный вид куска программы на языке Pascal имеет вид:

```

for i := 1 to N-1 do
  for j := i+1 to N do begin
    ...
    {Вычисление Fij}
    ...
    a[i] := a[i]+Fij/m[i];
    a[j] := a[j]-Fij/m[j];
    U := U+Uij;
  end;

```

Другие способы ускорения расчетов описаны в разделе 2.3.8.

2.3.4. Начальные и граничные условия

Обычно нас интересует внутреннее состояние системы частиц (можно исследовать, например, фазовые переходы). Из принципа относительности следует, что равномерное поступательное движение системы как целого не влияет на ее внутренние свойства. Поэтому естественно исключить

такое движение, т. е. задать суммарный импульс системы равным нулю. При исследовании изолированных кластеров необходимо исключить вращение системы как целого, занулив полный момент импульса.

Несмотря на непрерывно возрастающую мощность компьютеров, все же число частиц, доступное моделированию, гораздо меньше характерного числа молекул в макроскопическом объеме ($\sim 10^{22}$). Чтобы соотносить результаты расчета со свойствами гораздо большей системы, необходимо исключить влияние границ расчетной ячейки, которое пропорционально $N^{-1/2}$ в плоском случае и $N^{-1/3}$ для трех измерений. Простым способом является задание *периодических граничных условий*. При этом края расчетной области замыкаются в тор, т. е. частица, вылетающая за левую границу, появляется справа, вылетающая вверх — снизу и т. п. Такое поведение эквивалентно добавлению копий области с каждой из сторон и эффективному устранению границ. Ясно, что взаимодействие необходимо учитывать только для копий частиц, находящихся на минимальном расстоянии. То есть для расчетной области размером L имеем:

$$\text{если } |\Delta x| > L/2, \quad \Delta x = \Delta x - \text{sgn}(\Delta x) \cdot L.$$

Естественно, размер области должен быть не меньше радиуса обрезания потенциала для однозначности взаимодействия.

2.3.5. Вычисление внутренних характеристик системы

В описанной схеме МД сохраняется число частиц, объем и полная энергия системы. Температура и давление могут изменяться. Необходимо уметь их вычислять.

Температура пропорциональна средней кинетической энергии, приходящейся на одну внутреннюю степень свободы. При этом необходимо исключить движение центра масс — d степеней свободы (d — размерность пространства) и вращение системы как целого — для изолированных кластеров — 1 степень свободы в плоском случае, 3 в трехмерном. Например, для плоского кластера получаем:

$$T = \frac{2}{(2N - 3)k} \sum_i \frac{m_i (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_{cm})^2}{2},$$

где \mathbf{v}_{cm} — скорость центра масс кластера.

Давление можно вычислять различными способами. Один из них следует из теоремы вириала:

$$PV = NkT + \frac{1}{d} \left\langle \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{F}_i \right\rangle,$$

где \mathbf{r}_i и \mathbf{F}_i — координата и полная сила, действующая на частицу с номером i , угловые скобки означают усреднение по времени. В случае парных взаимодействий можно также воспользоваться равенством

$$\sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{F}_i = \sum_{i < j} \mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{F}_{ij}$$

и вычислять вириал одновременно с расчетом ускорений.

Другой способ определения давления заключается в вычислении потока импульса. Построим мысленно в веществе маленькую плоскую площадку (рис. 2.4). Поток импульса через такую площадку складывается из сил взаимодействия молекул, находящихся по разные стороны площадки, а также из переноса импульса частицами, пересекающими эту площадку за единицу времени.

Каждую молекулу, расположенную слева от плоскости площадки, соединим отрезками со всеми молекулами, расположенными правее площадки. Нужно учитывать только те пары молекул, для которых отрезки пересекают нашу площадку. Найдем проекцию силы взаимодействия для каждой такой пары на направление нормали к площадке $(F_k)_n$. Изменение импульса за единицу времени за счет взаимодействия молекул равно сумме проекций всех таких сил.

Полная проекция импульса на нормаль к площадке, переносимого частицами через площадку за время Δt , равна $p_x = p_{x+} - p_{x-}$. Здесь p_{x+} — суммарная проекция импульса частиц, пересекающих площадку слева направо, а p_{x-} — для частиц, движущихся справа налево.

Таким образом, давление равно

$$P = \frac{\sum_k (F_k)_n}{S} + \frac{p_x}{S\Delta t}.$$

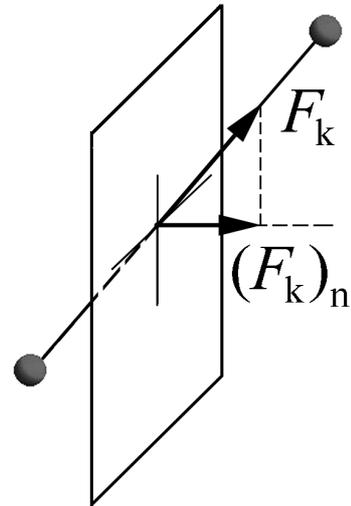


Рис. 2.4. Контрольная площадка для вычисления давления

2.3.6. Фазовые переходы в малых частицах

Предположим, мы возьмем кристалл и будем медленно подводить к нему тепло, одновременно измеряя температуру. Вначале температура будет повышаться, можно определить теплоемкость $c = \Delta Q / \Delta T$. В некоторый момент, однако, температура перестает расти, несмотря на приток тепла (теплоемкость формально становится бесконечной), при этом происходит *фазовый переход* — плавление. Вещество из упорядоченного кристаллического состояния переходит в неупорядоченное — жидкость, в этом процессе поглощается *теплота плавления* λ . При дальнейшем подводе тепла происходит еще один фазовый переход — испарение. Теплота испарения q обычно в несколько раз больше, чем λ . Некоторые вещества (например, йод при атмосферном давлении) могут переходить из твердого состояния сразу в газообразное, минуя жидкое. Такой переход называется *сублимацией*. При отводе тепла фазовые переходы происходят в обратном порядке и называются, соответственно, конденсацией и затвердеванием. Температуры плавления и испарения для конкретного вещества при определенном давлении — фиксированные величины, их измерение иногда используется для определения чистоты вещества (а также в качестве стандартных точек на шкале температур).

Постоянство температур фазовых переходов — следствие того, что макроскопические тела состоят из огромного числа частиц. Рассмотрим плавление вещества. Вероятность того, что система при температуре $T < T_c$ находится в жидком состоянии, пропорциональна $p_l \sim \exp\left(N \frac{T - T_c}{T}\right)$, где T_c — температура плавления. При больших N это практически ступенчатая функция, однако при конечных N область перехода имеет конечную ширину. При этом может наблюдаться *оболочечное плавление* кластеров, когда вначале в жидкое состояние переходят внешние слои, частицы в которых имеют меньшее число связей. Также возможно *квазиплавление* — в этом случае часть времени кластер проводит в твердом состоянии, а часть — в жидком. При этом гистограмма распределения температуры по времени будет иметь два выраженных пика. Квазиплавление более типично для маленьких кластеров, а оболочечное плавление — для больших.

При уменьшении числа частиц в кластере, помимо расширения переходной области, происходит также снижение температуры плавления T_c . Это происходит из-за увеличения доли частиц, расположенных на поверхности, которая пропорциональна $N^{-1/3}$. Поверхностные атомы имеют более высокую потенциальную энергию, поэтому средняя потенци-

альная энергия на одну частицу растет с уменьшением N , что и приводит к понижению T_c . Этот эффект наблюдается экспериментально, причем уменьшение температуры плавления может достигать сотен градусов [16].

Более подробно про теорию, а также результаты экспериментов и расчетов, касающихся плавления и замерзания кластеров, можно прочитать в статье [17].

Природа, как всегда, оказалась богаче, чем мы подозревали. Со всем недавно было обнаружено, что малые частицы галлия (температура плавления которого 302,9 К) плавятся при гораздо более высокой температуре: около 550 К для кластеров Ga_{39}^+ и Ga_{40}^+ , а плавления кластеров Ga_{17}^+ не удалось обнаружить вплоть до 800 К [18]. Исследования с помощью квантовомеханической молекулярной динамики показали, что причиной такого необычного поведения является изменение характера связи между атомами от металлического к ковалентному [19]. Эти же исследования предсказывают еще более высокую температуру плавления для кластеров Ga_{13}^+ (около 1400 К), содержащих «магическое» число атомов.

* Если взглянуть на картинку расположения частиц, довольно просто отличить газообразное состояние от конденсированного. В газе среднее расстояние между частицами велико по сравнению с их размером, в жидкости и твердом теле эти величины близки. Отличить же на глаз жидкое состояние от твердого затруднительно. Одним из способов является расчет *корреляционной функции*.

Парная корреляционная функция $g(\mathbf{r})$ в случае парного взаимодействия зависит только от длины вектора r . Корреляционная функция связана с вероятностью найти частицу на расстоянии r от выбранной (пробной) частицы. Точнее надо говорить о вероятности для тонкого слоя $(r, r + dr)$. Эта вероятность равна $p = ng(r)dV/(N - 1)$. Здесь $n = N/V$ — средняя концентрация частиц, dV — элемент объема тонкого слоя. В трехмерном случае $dV = 4\pi r^2 dr$, в плоском $dV = 2\pi r dr$. Функция $g(r)$ стремится к нулю при $r \rightarrow 0$, поскольку частицы не могут проникать внутрь друг друга. При $r \rightarrow \infty$ $g(r) \rightarrow 1$, потому что в большом масштабе распределение частиц однородно. Величина $g(r)$ как раз и служит мерой неоднородности этого распределения. Стоит заметить, что интеграл $\int_V ng(r)dV$, взятый по всему объему системы, равен $N - 1$ — полному числу частиц за исключением пробной.

В конденсированном состоянии $g(r)$ имеет пик при r , равном расстоянию между соседями. Наличие этого пика называют *ближним поряд-*

ком. Для кристаллического твердого состояния будут еще пики при кратных расстояниях, наличие этих пиков говорит о том, что в системе существует *дальний порядок*. Для жидкости высота дополнительных пиков быстро (экспоненциально) убывает.

Вычисление корреляционной функции.

Один из способов вычисления корреляционной функции состоит в следующем. Возьмем два экземпляра кластера и сдвинем один из них относительно другого на расстояние r . Затем вычислим объем (площадь) перекрытия между различными частицами (можно для определенности считать частицы шарами или дисками радиусом r_p , перекрытие частицы с собой не учитываем). Необходимо произвести достаточно много сдвигов в различных направлениях и усреднить результаты. Затем повторяем процедуру для другого r .

Заметим, что значение корреляционной функции будет убывать при увеличении r и обратится в ноль при $r > r_{\max}$ (r_{\max} — максимальное расстояние между точками кластера). Так происходит из-за ограниченного размера системы, поэтому имеет смысл вычислять корреляционную функцию только для достаточно больших кластеров.

Другая величина, которая может служить индикатором начала плавления кластера — среднеквадратичная флуктуация длины связи δ . Она вычисляется следующим образом

$$\delta = \frac{2}{N(N-1)} \sum_{i < j} \frac{(\langle r_{ij}^2 \rangle - \langle r_{ij} \rangle^2)^{1/2}}{\langle r_{ij} \rangle}.$$

При начале фазового перехода величина δ начинает быстро возрастать с ростом средней полной энергии на одну частицу в кластере [20].

2.3.7. Уравнение состояния неидеального газа

Жидкость и газ можно приближенно описать уравнением состояния *Ван-дер-Ваальса*

$$P = \frac{RT}{v - b} - \frac{a}{v^2}, \quad (2.5)$$

где $v = V/\nu$ — молярный объем (ν — количество молей). Постоянная a учитывает притяжение молекул друг к другу, а постоянная b связана с собственным объемом молекул (отталкивание молекул друг от друга на близком расстоянии). Обе константы считаются независимыми от температуры.

Если построить изотерму на PV – диаграмме (рис. 2.5), то каждому значению P при относительно низких температурах соответствуют три значения v . При этом часть кривой, лежащая между экстремумами, отвечает отрицательному значению сжимаемости $\partial\rho/\partial P$, что физически невозможно. Если провести отрезок прямой линии $P = \text{const}$ так, чтобы площади под ней и под исходной кривой были одинаковы (правило Максвелла), то ее конечные точки пересечения с кривой $P(v)$ определяют молярные объемы жидкого и газообразного состояния (v_{liq} и v_{vap}) и, соответственно, плотности. Прямая соответствует двухфазному состоянию «жидкость-газ».

При повышении температуры значения v_{liq} и v_{vap} начинают сближаться и при определенной $T = T_c$ сливаются. Эта температура называется *критической*. Выше нее жидкое и газообразное состояния неразличимы. Значения параметров в *критической точке* можно найти из условия совпадения корней

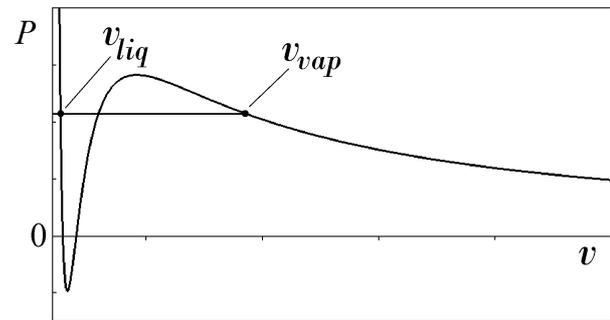


Рис. 2.5. Изотерма и правило Максвелла

$$P_c - \left(\frac{RT_c}{v - b} - \frac{a}{v^2} \right) = \frac{P_c(v - v_c)^3}{v^2(v - b)}.$$

Необходимо приравнять коэффициенты при всех степенях v , отсюда следует (проверьте самостоятельно) $v_c = 3b$, $P_c = a/27b^2$, $RT_c = 8a/27b$.

2.3.8. *Примечание. Методы ускорения расчета

Обычно при вычислении ускорений необходимо рассмотреть каждую пару частиц, хотя бы для того, чтобы вычислить расстояние между ними. В результате число операций растет как N^2 . Поэтому, если мы хотим моделировать системы, состоящие из большого числа молекул, необходимо позаботиться о сокращении количества операций.

Принципиально сократить объем вычислений можно, если разделить всю расчетную область на ячейки (прямоугольники или параллелепипеды) со сторонами не меньше радиуса обрезания. Пусть таких ячеек будет N_x по одной координате и N_y по другой, а размеры их r_x и r_y , соответственно. Тогда целая часть от деления x_i на r_x даст номер ячейки в горизонтальном ряду, аналогично по другим координатам. Определение, в какую

ячейку попадает каждая частица, занимает $O(N)$ операций. Путем некоторых ухищрений можно записать всю эту информацию в массив длиной $N + N_x N_y$. Затем нужно рассматривать взаимодействие данной частицы лишь с частицами, находящимися в этой же либо в соседних ячейках (здесь полезно опять вспомнить о третьем законе Ньютона, что сокращает количество вычислений вдвое). В итоге общее число операций пропорционально N , поэтому при увеличении числа частиц этот метод рано или поздно становится более выгодным.

Описанный способ все-таки приводит к большому числу лишних проверок, так как большая часть соседних ячеек лежит вне круга (шара) с центром в данной частице и радиусом r_c , внутри которого только и есть взаимодействие. Дальнейшее ускорение расчетов можно получить, заметив, что локальное окружение частицы меняется медленно. Если составить список всех частиц, находящихся на расстоянии $r_v > r_c$ от данной, то в течение по крайней мере нескольких шагов частица будет взаимодействовать только с этими соседями. Этот метод называется *методом списков Верле*. При составлении списков разумно пользоваться ячейками. В литературе рекомендуется брать $r_v = 1,05r_c$ и обновлять списки всякий раз, когда смещение какой-либо частицы превысит $0,5(r_v - r_c)$ [21]. В трехмерном случае использование списков Верле сокращает число расчетов раз в 6, в двумерном варианте ускорение не столь значительно.

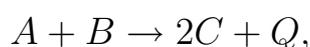
2.3.9. Химические реакции

Молекулярную динамику можно использовать для моделирования быстрых химических реакций. Рассмотрим простейшую модель. Пусть молекулы вещества могут иметь два состояния, отличающиеся внутренней потенциальной энергией. В таких молекулах может происходить внутренняя перестройка без изменения их химического состава, но с выделением энергии (мономолекулярная экзотермическая реакция). Сначала все молекулы находятся в «возбужденном состоянии». При соударении молекул, то есть при сближении их на достаточно малое расстояние, они могут перейти во второе состояние с выделением энергии. Это происходит, если потенциальная энергия взаимодействия превышает некоторое пороговое значение — энергию активации. Выделившаяся энергия делится поровну между парой прореагировавших частиц, увеличивая их скорость в системе центра масс. Сами частицы становятся неактивными (превращаются в инертные продукты реакции), но могут передавать свою кинетическую энергию молекулам исходного вещества, повышая вероят-

ность дальнейших реакций. Такая система будет моделировать поведение вещества при экзотермической реакции с неизменным числом частиц (подобные процессы могут происходить при взрыве).

При определенном соотношении начальной температуры, энергии активации и энерговыделения элементарной реакции в системе возможно распространение самоподдерживающихся волн сжатия, инициирующих новые реакции. Такие волны называются детонационными, а сам процесс — детонацией.

Возможно некоторое усложнение модели. Пусть вначале присутствуют молекулы двух видов A и B , между которыми происходит реакция



где Q — энерговыделение при реакции. В такой модели реакция будет происходить медленнее, чем в прошлом случае, потому что столкновения между молекулами разных видов составляют только часть парных столкновений. Кроме того, при разных начальных концентрациях веществ A и B вещество, находившееся в избытке, прореагирует не полностью, и повышение температуры будет меньше, чем в случае стехиометрической смеси.

Задания

1. Напишите программу двумерной молекулярной динамики. Задайте начальные условия с нулевым суммарным импульсом частиц. Граничные условия задайте периодическими. Подберите подходящий шаг по времени. Проверьте сохранение полной энергии и импульса.
2. Постройте гистограмму распределения частиц по скоростям. Сравните ее с распределением Максвелла.
3. Исследуйте в двумерной модели плавление и затвердевание малых кластеров с «магическим» числом атомов в них 7, 19, 37, 61 и т. д. Такие кластеры имеют форму шестиугольников — каждая следующая оболочка содержит на 6 атомов больше, чем предыдущая. У «магических» кластеров средняя энергия связи максимальна. Для этого следует приготовить кластеры при низкой температуре, а затем постепенно нагревать (например, умножая все скорости на число, немного большее 1). После нагревания кластер должен прийти в равновесие в течение достаточно большого промежутка времени.

Далее надо усреднить температуру тоже в течение некоторого времени. Затем эта процедура повторяется. Полученные значения удобно представить в виде графика зависимости средней температуры от полной энергии, приходящейся на один атом.

После расплавления кластера можно провести обратный процесс — охлаждения, что должно привести к затвердеванию. Совпадают ли графики прямого и обратного процесса? Подумайте, как должны выглядеть кривые при увеличении числа частиц в кластере $N \rightarrow \infty$?

- 4.* (3D-случай) Постройте гистограмму распределения по температуре, усредненной за достаточно большое время, для кластеров с различной средней энергией. Как меняется ее вид при увеличении энергии?
- 5.* При нескольких значениях плотности найдите зависимости P от T . По полученным зависимостям оцените постоянные a и b в уравнении состояния Ван-дер-Ваальса. Определите температуру, плотность и давление в критической точке.
6. Включите в программу возможность экзотермической химической реакции (раздел 2.3.9). Задавая начальный горячий слой вблизи одной из границ расчетной области, получите детонационную волну, исследуйте зависимость ее скорости от величины энерговыделения.

2.4. Решеточные газы, решеточное уравнение Больцмана

В методе молекулярной динамики изучается поведение вещества на уровне отдельных молекул. Для описания таким способом макроскопических явлений необходимы огромные вычислительные ресурсы. Однако, идея МД очень привлекательна — не задавать заранее уравнения движения для вещества (как это делается в механике сплошной среды), а получать их автоматически, зная свойства отдельных частиц. К счастью, показано, что вовсе не обязательно задавать детальную микроскопическую модель для правильного описания гидродинамики [22]. Поэтому можно попробовать выбрать микродинамику максимально просто. Например, давно известны *клеточные автоматы*, из которых самым популярным является знаменитая игра «Жизнь». В этом подходе пространство делится на одинаковые ячейки, и эволюция каждой зависит от состояния ближайшего окружения.

2.4.1. Решеточные газы (Lattice-Gas Automata, LGA)

Рассмотрим квадратную решетку, в узлах которой могут обитать частицы единичной массы. Выберем расстояние между узлами Δx в качестве единицы длины, а шаг по времени Δt — за единицу времени. Каждая из частиц может иметь скорость, направленную в один из соседних узлов, такой величины, что за один шаг по времени частицы могут перелететь как раз в соседний узел (рис. 2.6,а). В узле может быть не более одной частицы с данным направлением скорости (принцип исключения). Такая схема называется моделью НРР по первым буквам фамилий ее авторов [23]. К сожалению, хотя модель НРР ведет себя в каком-то смысле подобно жидкости, ее свойства не соответствуют реальности. Однако, на примере этой модели легче понять основные правила реализации различных моделей решеточных газов.

Начальное распределение частиц по пространству и по направлениям скоростей задается случайным образом в каждом узле сетки так, чтобы в среднем соответствовать распределению плотности вещества и его массовой скорости в рассматриваемом физическом явлении. Дальнейшая эволюция ансамбля частиц за каждый шаг по времени происходит в два этапа. На первом частицы перелетают в соседние узлы в соответствии со своими скоростями (этап распространения), на втором происходят соударения частиц в узлах (этап столкновений). При столкновениях должно сохраняться количество частиц и их полный импульс. Легко убедиться, что при этом нетривиальными столкновениями в модели НРР являются только соударения «почти лоб в лоб», после которых скорости частиц поворачиваются на 90° (рис. 2.6,б). Во всех остальных случаях можно считать, что столкновения не произошло (частицы пролетели мимо друг друга).

Благодаря принципу исключения наличие частицы, имеющей скорость по каждому направлению, может быть закодировано одним битом (0 — нет частицы, 1 — есть). Так можно записать состояние каждого узла в четырех битах. Можно пронумеровать направления в порядке возрастания угла. Например, в двоичной системе первое состояние на рис. 2.6,б записывается как $S = 0101_2$. Всего различных состояний в узле может быть 16, включая $S = 0$ (нет ни одной частицы). Все операции сводятся к целочисленной арифметике, это означает высокую скорость расчетов и отсутствие ошибок округления. Кроме того, все вычисления локальные, поэтому их можно выполнять параллельно.

Обозначим возможные направления скорости d_1, d_2, d_3, d_4 (рис. 2.6,а).

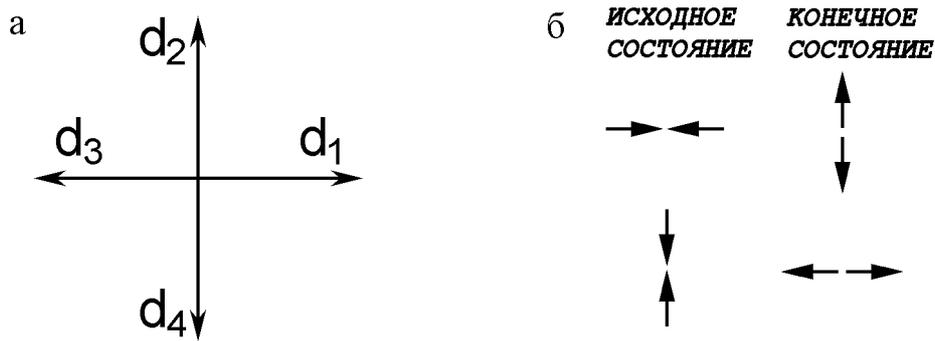


Рис. 2.6. Возможные направления скорости частиц в модели НРР (а) и возможные столкновения, в которых скорости частиц изменяются (б)

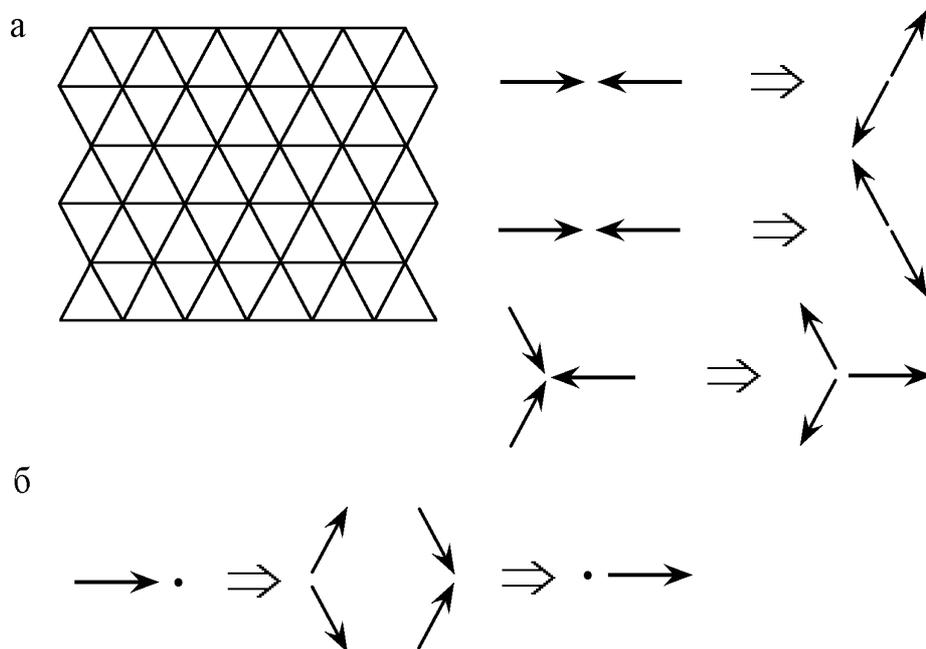


Рис. 2.7. Решетка и некоторые возможные столкновения частиц в модели ГНР-I (а), некоторые возможные столкновения с участием покоящихся частиц в модели ГНР-III (б)

Тогда $d_1 = 0001_2 = 1$, $d_2 = 0010_2 = 2$, $d_3 = 0100_2 = 4$, $d_4 = 1000_2 = 8$. Приведем в явном виде выражения для основных операций.

1) Добавление к состоянию S частицы с направлением скорости d_k :

$$S \text{ or } d_k \rightarrow S.$$

2) Проверка: есть ли в состоянии S частица с направлением скорости d_k :

if $(S \text{ and } d_k) \neq 0$ — такая частица есть, иначе нет.

Здесь **or** — двоичная побитовая операция «или», а **and** — двоичная операция «и».

$$\begin{array}{cccc} 0 \text{ or } 0 = 0 & 0 \text{ or } 1 = 1 & 1 \text{ or } 0 = 1 & 1 \text{ or } 1 = 1 \\ 1 \text{ and } 1 = 1 & 1 \text{ and } 0 = 0 & 0 \text{ and } 1 = 0 & 0 \text{ and } 0 = 0 \end{array}$$

Недостатки модели НРР связаны с тем, что квадратная сетка с 4 возможными направлениями скорости частиц недостаточно симметрична. Однако, уже простейшая модель LGA на треугольной сетке с 6 возможными векторами скорости частиц в узле (модель FHP-I, [24]) обладает достаточной симметрией. В более сложных вариантах возможно наличие покоящихся частиц (модель FHP-III, [24]). Геометрия решетки и возможные столкновения частиц для этих моделей показаны на рис. 2.7.

Другой способ устранить недостатки квадратной сетки — ввести еще возможность движения частиц по диагоналям (скорость $\sqrt{2}$). Вместе с покоящимися частицами получаем 9 направлений скорости [25]. Так как модули скоростей различны, возможен нетривиальный закон сохранения энергии, и можно ввести

температуру. Обозначим число покоящихся частиц n_0 , частиц, имеющих единичную скорость — n_1 , частиц со скоростью $\sqrt{2}$ — n_2 . Тогда в каждом узле плотность $\rho = n_0 + n_1 + n_2$, полная энергия $E = P + \rho u^2/2 = \sum_i n_i v_i^2/2 = n_1/2 + n_2$ (P — давление), температура $T = P/\rho$. Так можно моделировать течения с переменной температурой, теплопередачу и выделение энергии. Несколько примеров столкновений, в том числе с выделением энергии, приведены на рис. 2.8.

В методе решеточных газов просто задавать граничные условия любого вида. На твердых границах можно просто разворачивать скорости прилетевших частиц на угол 180° , так моделируются непроницаемые стенки без проскальзывания.

2.4.2. Решеточное уравнение Больцмана

В методе LGA существует значительный статистический шум, возникающий из-за случайности при столкновениях и из-за случайного начального распределения. Этот шум может быть полезен при моделировании процессов, в которых существенны флуктуации. Однако, для получения значений физических величин (плотности, скорости, давления, температуры) от него приходится избавляться путем усреднения по некоторой области пространства и/или за несколько шагов по времени. В случае детерминированных течений возможно также произвести несколько расчетов с одинаковыми (в среднем) начальными данными, а затем провести

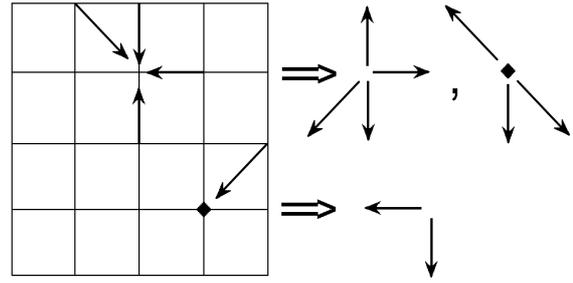


Рис. 2.8. Геометрия и примеры столкновений для квадратной решетки

усреднение по всем экземплярам системы. Если число экземпляров стремится к бесконечности, то средние значения заселенностей называются *одночастичными функциями распределения*, которые будем обозначать f_k . При отсутствии корреляций между одночастичными функциями распределения (гипотеза Л. Больцмана о молекулярном хаосе) эволюция системы описывается *уравнением Больцмана*. Так как у нас все значения заданы на решетке с небольшим числом возможных значений скорости и в дискретные моменты времени, имеем *решеточное уравнение Больцмана*, или LBE (Lattice Boltzmann Equation) [26]:

$$f_k(\mathbf{x} + \mathbf{c}_k \Delta t, t + \Delta t) = f_k(\mathbf{x}, t) + \Omega_k(\mathbf{x}, t).$$

За шаг по времени все частицы должны перелететь в соседние узлы. Для этого возможные скорости частиц \mathbf{c}_k должны удовлетворять условию $\mathbf{c}_k \Delta t = \mathbf{e}_k$, где \mathbf{e}_k — векторы, соединяющие узел с соседними. Обычно принимается $\Delta t = 1$. Левая часть уравнения соответствует перелету частиц из узла в узел (распространение). Последнее слагаемое отвечает за изменение заселенностей в столкновениях.

Макроскопические параметры — плотность и скорость вещества в узле вычисляются по функциям распределения

$$\rho = \sum_k f_k, \quad \rho \mathbf{u} = \sum_k f_k \mathbf{c}_k. \quad (2.6)$$

Очень простой и вместе с тем физически обоснованный вид столкновительного члена, предложенный в [27], описывает просто релаксацию системы к равновесному состоянию. Эта идея впервые была использована для метода LBE в [28] в виде:

$$\Omega_k = \frac{1}{\tau} (f_k^{eq} - f_k).$$

Равновесные функции распределения f_k^{eq} зависят от плотности и скорости вещества в узле, чтобы выполнялись законы сохранения массы и импульса в столкновениях, то есть

$$\rho = \sum_k f_k^{eq}, \quad \rho \mathbf{u} = \sum_k f_k^{eq} \mathbf{c}_k. \quad (2.7)$$

Кинетическая температура LBE частиц в энергетических единицах $\theta = kT/m$ задается уравнением

$$\rho \theta = \sum_k f_k^{eq} (\mathbf{c}_k - \mathbf{u})^2 / 2 \quad (2.8)$$

и в простых моделях считается постоянной. Часто масса ЛВЕ частиц принимается за единицу, $m = 1$.

Такая модель хорошо описывает течения вязкой жидкости в пределе малых скоростей (число Маха $M = u/c_s \ll 1$, где $c_s = \sqrt{\theta}$ — изотермическая скорость звука). Время релаксации τ определяет кинематическую вязкость $\nu = (\tau - 1/2)c_s^2\Delta t$. На твердых границах можно просто разворачивать скорости прилетевших частиц, так моделируются непроницаемые стенки без проскальзывания.

* Приложение. Явный вид функций f_k^{eq} . Обычно равновесные функции распределения выбираются в максвелловском виде:

$$f_k^{eq} \sim \exp(-(\mathbf{c}_k - \mathbf{u})^2/2\theta).$$

В изотермических моделях достаточно разложить экспоненту в ряд с точностью до членов порядка u^2 , используя приближенную формулу

$$e^x = 1 + x/1! + x^2/2! + \dots.$$

В результате получаем:

$$f_k^{eq} = w_k \rho \left(1 + \frac{\mathbf{c}_k \cdot \mathbf{u}}{\theta} + \frac{(\mathbf{c}_k \cdot \mathbf{u})^2}{2\theta^2} - \frac{u^2}{2\theta} \right).$$

Коэффициенты $w_k \sim \exp(-\mathbf{c}_k^2/2\theta)$ зависят только от модуля $|\mathbf{c}_k|$.

Необходимо подставить формулы для f_k^{eq} в уравнения (2.7, 2.8) и приравнять коэффициенты при всех степенях u вплоть до второй. Для одномерной модели $\mathbf{c}_0 = 0$, $\mathbf{c}_{-1} = -h/\Delta t$, $\mathbf{c}_1 = h/\Delta t$ получаем $\theta = 1/3(h/\Delta t)^2$, $w_0 = 2/3$, $w_{\pm 1} = 1/6$. В итоге, равновесные функции распределения имеют вид

$$f_0^{eq} = \frac{2}{3}\rho(1 - \frac{3}{2}\tilde{u}^2),$$

$$f_{\pm 1}^{eq} = \frac{1}{6}\rho(1 \pm 3\tilde{u} + 3\tilde{u}^2).$$

Здесь $\tilde{u} = u\Delta t/h$ — безразмерная скорость вещества.

В двумерной модели на квадратной сетке с 9 направлениями (рис. 2.9) $\mathbf{c}_0 = (0, 0)$; $\mathbf{c}_k = h/\Delta t(\cos(k\pi/2), \sin(k\pi/2))$ для $k = 1 \dots 4$; $\mathbf{c}_k = \sqrt{2}h/\Delta t(\cos((k+1/2)\pi/2), \sin((k+1/2)\pi/2))$ для $k = 5 \dots 8$. Здесь добавляется еще уравнение $w(0)/w(1) = w(1)/w(\sqrt{2})$. Получаем

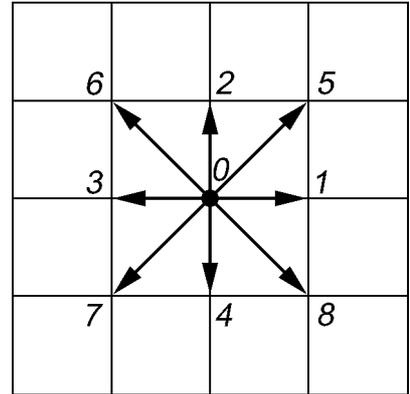


Рис. 2.9. Геометрия решетки и возможные векторы скорости

$\theta = 1/3(h/\Delta t)^2$, $w_0 = 4/9$, $w_{1-4} = 1/9$, $w_{5-8} = 1/36$. Равновесные функции распределения в этом случае имеют вид

$$\begin{aligned} f_0^{eq} &= w_0 \rho (1 - d\tilde{u}^2), \\ f_1^{eq} &= w_1 \rho (1 + a\tilde{u}_x + b\tilde{u}_x^2 - d\tilde{u}^2), \\ f_2^{eq} &= w_2 \rho (1 + a\tilde{u}_y + b\tilde{u}_y^2 - d\tilde{u}^2), \\ f_3^{eq} &= w_3 \rho (1 - a\tilde{u}_x + b\tilde{u}_x^2 - d\tilde{u}^2), \\ f_4^{eq} &= w_4 \rho (1 - a\tilde{u}_y + b\tilde{u}_y^2 - d\tilde{u}^2), \\ f_5^{eq} &= w_5 \rho (1 + a(\tilde{u}_x + \tilde{u}_y) + b(\tilde{u}_x + \tilde{u}_y)^2 - d\tilde{u}^2), \\ f_6^{eq} &= w_6 \rho (1 + a(\tilde{u}_y - \tilde{u}_x) + b(\tilde{u}_y - \tilde{u}_x)^2 - d\tilde{u}^2), \\ f_7^{eq} &= w_7 \rho (1 - a(\tilde{u}_x + \tilde{u}_y) + b(\tilde{u}_x + \tilde{u}_y)^2 - d\tilde{u}^2), \\ f_8^{eq} &= w_8 \rho (1 + a(\tilde{u}_x - \tilde{u}_y) + b(\tilde{u}_x - \tilde{u}_y)^2 - d\tilde{u}^2), \end{aligned}$$

где $a = (\Delta t/h)^2/\theta = 3$, $b = (\Delta t/h)^4/2\theta^2 = 9/2$, $d = (\Delta t/h)^2/2\theta = 3/2$. Далее для простоты будем опускать значок « \sim » у переменной u .

2.4.3. * Модели LGA со взаимодействием между частицами

Приведенные выше модели описывают скорее газ, чем жидкость. В жидкости между частицами существуют силы взаимодействия, проявлением которых являются поверхностное натяжение, а также фазовые переходы жидкость-газ.

Если ввести отталкивание между частицами разного типа, то при достаточной его силе получим разделение веществ (для различия принято вводить цвет, два типа частиц обычно называют «синими» и «красными»). В модели *несмешивающихся решеточных газов* [29] это достигается перераспределением цвета частиц после столкновений так, чтобы красные частицы в основном направлялись в узлы с преобладанием красного цвета и наоборот.

В модели LGA с переходом «жидкость-газ» [30] вводится притяжение между частицами, находящимися на некотором расстоянии. Импульсы частиц поворачиваются друг к другу, если это возможно, с учетом закона сохранения импульса согласно третьему закону Ньютона. При достаточно большой длине взаимодействия в некотором диапазоне плотностей возможно сосуществование плотной (жидкой) и разреженной (газообразной) фаз.

2.4.4. * Модель ЛВЕ с внешними силами и фазовыми переходами

Метод ЛВЕ позволяет достаточно просто моделировать течения с фазовыми переходами жидкость – пар, причем возможно задать произвольное уравнение состояния. Кроме того, небольшое изменение уравнений позволяет рассчитывать течения, в которых на вещество действуют внешние силы.

Действие внешних сил

Рассмотрим вначале, как моделировать силы, действующие на вещество. Природа сил может быть самой разной, например, электрические силы, действующие на заряженное вещество или на диэлектрик, сила тяжести, силы межмолекулярного взаимодействия и т.д. Пусть суммарная сила, действующая на вещество в узле равна \mathbf{F} . Действие силы в течение шага по времени Δt приводит к изменению скорости:

$$\Delta \mathbf{u} = \mathbf{F} \Delta t / \rho.$$

При учете действия объемных сил решеточное уравнение Больцмана принимает вид:

$$f_k(\mathbf{x} + \mathbf{c}_k \Delta t, t + \Delta t) = f_k(\mathbf{x}, t) + \Omega_k(\mathbf{x}, t) + \Delta f_k.$$

То есть, после действия оператора столкновений (в котором используется скорость \mathbf{u}) необходимо учесть изменение функций распределения Δf_k под действием сил. Эта добавка равна разнице равновесных функций распределения при одной и той же плотности, но с разными скоростями [31]

$$\Delta f_k = f_k^{eq}(\rho, \mathbf{u} + \Delta \mathbf{u}) - f_k^{eq}(\rho, \mathbf{u}).$$

Можно изменить порядок — сначала учесть действие сил, то есть вычислить промежуточные значения функций распределения

$$f_k^*(\mathbf{x}, t + \Delta t) = f_k(\mathbf{x}, t) + \Delta f_k,$$

а затем применить оператор столкновений

$$f_k(\mathbf{x}, t + \Delta t) = f_k^*(\mathbf{x}, t + \Delta t) + (f_k^{eq}(\mathbf{u} + \Delta \mathbf{u}) - f_k^*(\mathbf{x}, t + \Delta t)) / \tau.$$

Конечный результат будет тот же.

Часто нам необходимо знать скорость вещества (например, для расчета переноса примесей). Видно, что на каждом шаге по времени в каждом узле

существуют два значения скорости — до и после действия сил. Исследование уравнений LBE показывает, что в случае действия сил физическая скорость вещества равна их среднему арифметическому, то есть

$$\mathbf{u}^* = \frac{\mathbf{u} + (\mathbf{u} + \Delta\mathbf{u})}{2} = \mathbf{u} + \frac{\Delta\mathbf{u}}{2}.$$

Фазовые переходы

Достаточно простой способ моделирования фазовых переходов жидкость — пар был впервые предложен в статье [32]. Между частицами, находящимися в соседних узлах, задается сила взаимодействия:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \psi(\rho(\mathbf{x})) \sum_k G_k \mathbf{e}_k \psi(\rho(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k)). \quad (2.9)$$

Значения коэффициентов $G_k > 0$ соответствуют притяжению между соседними узлами, что необходимо для сосуществования жидкой фазы и паровой фазы. В обратном случае при $G_k < 0$ — отталкивание. Здесь G_k выбираются таким образом, чтобы сила была достаточно изотропной (чтобы, например, капли получались круглыми). При использовании модели LBE на квадратной сетке сила взаимодействия между узлами, расположенными по диагонали на расстоянии $\sqrt{2}$, должна быть в 4 раза меньше, чем между ближайшими соседями, то есть $G_{1-4} = G_0 > 0$, а $G_{5-8} = G_0/4$. «Эффективная плотность» $\psi(\rho)$ может выбираться достаточно произвольно.

Введение такого взаимодействия приводит к уравнению состояния среды в виде

$$P = \rho\theta - \alpha G_0 \psi^2(\rho). \quad (2.10)$$

Коэффициент α зависит от используемой решетки. Так, для одномерной модели с тремя значениями скорости частиц $\alpha = 1$, а в двумерной модели с 9 направлениями $\alpha = 3/2$. Напомним, что $\theta = 1/3(h/\Delta t)^2$ для рассматриваемых одномерной и двумерной моделей.

Теперь понятно, как ввести произвольное уравнение состояния $P = P(\rho, T)$ [33, 34]. Введем новую «эффективную плотность» $\Phi(\rho, T) = \sqrt{\alpha G_0} \psi(\rho, T)$, которую выразим из уравнения (2.10):

$$\Phi(\rho, T) = \sqrt{\rho\theta - P(\rho, T)}. \quad (2.11)$$

Сила, действующая на вещество в узле, вычисляется в одномерном случае по уравнению, аналогичному (2.9)

$$F(x) = \Phi(x) [\Phi(x + 1) - \Phi(x - 1)],$$

а в двумерном случае по уравнению

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \frac{2}{3}\Phi(\mathbf{x}) \sum_k \frac{G_k}{G_0} \Phi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k) \mathbf{e}_k,$$

где $\Phi(x) = \Phi(\rho(x))$.

Здесь опять $G_k = G_0$ для основных направлений и $G_k = G_0/4$ — для диагональных.

Для лучшего согласования получаемых в расчетах плотностей жидкости и газа на кривой сосуществования с теоретическими значениями следует использовать формулы более общего вида:

$$F(x) = [A\Phi(x+1) + (1-2A)\Phi(x) + A\Phi(x-1)] \cdot [\Phi(x+1) - \Phi(x-1)] \quad (2.12)$$

в одномерном случае и

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \frac{2}{3} \left[(1-2A)\Phi(\mathbf{x}) \sum_k \frac{G_k}{G_0} \Phi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k) \mathbf{e}_k + A \sum_k \frac{G_k}{G_0} \Phi^2(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k) \mathbf{e}_k \right] \quad (2.13)$$

в двумерном. Коэффициент A зависит от используемого уравнения состояния.

Одним из достаточно простых уравнений состояния, позволяющих описать как жидкую, так и газообразную фазы, является уравнение Ван-дер-Ваальса (2.5). Удобно переписать его в безразмерных переменных $\tilde{\rho} = \rho/\rho_c, \tilde{p} = P/P_c, \tilde{T} = T/T_c$:

$$\tilde{p} = \frac{8\tilde{T}\tilde{\rho}}{3 - \tilde{\rho}} - 3\tilde{\rho}^2. \quad (2.14)$$

Для согласования размерностей в методе ЛВЕ в правой части уравнения (2.11) необходимо давление $P(\rho, T)$ домножить на коэффициент $k_{eff} = P_c/\rho_c \cdot (\Delta t/h)^2$, который для инертных газов равен примерно $k \approx 0,01$ (если взять $h = 1$ мм, $\Delta t = 1$ мкс — такие единицы часто используются в физике быстропротекающих процессов). Для уравнения состояния (2.14) наилучшее значение параметра A в формуле (2.13) равно $A = -0,152$.

2.4.5. Модель ЛВЕ для двухкомпонентных течений

Интересные (и сложные) задачи возникают, когда в течениях присутствуют несколько веществ. Рассмотрим простейший случай двух компонентов — такие течения возникают, например, при перемешивании

веществ, которые втекают по отдельным трубам в общий объем. Для простоты будем считать поверхностное натяжение на границе раздела пренебрежимо малым.

Метод решеточных уравнений Больцмана в этом случае конструируется так. Введем два сорта функций распределения — по одному для каждого вещества. Обозначим их $f_{k,1}$ и $f_{k,2}$. На шаге распространения частицы каждого вещества независимо перемещаются в соседние узлы, как и в случае одного компонента. Взаимодействие проявляется на шаге столкновений, который также записывается в виде релаксации к локально-равновесным значениям:

$$\Omega_{k,s} = \left(f_{k,s} - f_{k,s}^{eq}(\rho_s, \mathbf{u}) \right) / \tau_s,$$

где индекс s означает номер вещества (1 или 2). Плотности и скорости каждого вещества в узле вычисляются по обычным формулам

$$\rho_s = \sum_k f_{k,s}, \quad \rho_s \mathbf{u}_s = \sum_k f_{k,s} \mathbf{c}_k.$$

Общая плотность в узле ρ равна сумме плотностей компонентов

$$\rho = \rho_1 + \rho_2,$$

а выражение для «общей» скорости получается более сложным

$$\mathbf{u} = \sum_s \frac{\rho_s \mathbf{u}_s}{\tau_s} / \sum_s \frac{\rho_s}{\tau_s}.$$

Такая формула необходима для сохранения импульса после действия оператора столкновений.

Главный недостаток такой простой модели — то, что у каждого вещества коэффициент диффузии D равен коэффициенту кинематической вязкости ν , поэтому моделироваться будет течение скорее газов, чем жидкостей. Но это ограничение не принципиальное, и, по крайней мере, качественные закономерности процессов перемешивания в расчетах воспроизводятся верно.

2.4.6. Химические реакции в решеточных моделях

В статье [35] рассмотрено применение метода LGA для моделирования системы «реакция-диффузия». Такие системы обладают многими интересными свойствами. Например, могут происходить колебания концентраций во времени. Хороший пример такого поведения дает реакция Белоусова – Жаботинского — окисление малоновой или лимонной кислоты

бромат-ионом, катализируемое ионами церия (про эту красивую реакцию можно прочитать, например, в [36]). В других случаях возможна самоорганизация — возникновение устойчивых пространственно-неоднородных структур. Уравнение для системы «реакция-диффузия» в покоящейся среде имеет вид:

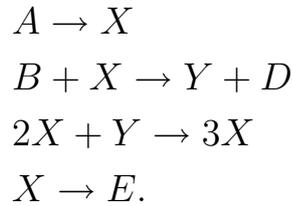
$$\frac{\partial n_s}{\partial t} = \nabla^2 n_s + C(\{n\}).$$

Здесь s — номер вещества, ∇^2 — оператор Лапласа (см. раздел 2.2.1), слагаемое $C(\{n\})$ отвечает за химическую реакцию и обычно выражается в виде суммы произведений вида $k_{s_1 s_2 \dots} n_{s_1}^{a_1} n_{s_2}^{a_2} \dots$.

Применение модели решеточных газов для описания химических реакций требует, однако, задания таблицы столкновений весьма сложного вида.

Гораздо более изящно описывается реакция в методе LBE [37]. Оператор столкновений делится на две части: гидродинамическую, обычного вида, и химическую, соответствующую уравнению реакции. Распространение и гидродинамическая часть оператора столкновений отвечают за диффузию, химическая часть — за реакцию. Химическая часть записывается в том же виде, что и $C(\{n\})$, необходимо только принять меры к тому, чтобы реакция не приводила к изменению скорости вещества.

* Пример. Брюсселятор. Приведем пример системы химических реакций:



Эта система называется *Брюсселятором* [38] в честь города Брюсселя, в котором работает предложившая данную модель группа Нобелевского лауреата И. Пригожина. Концентрации веществ A и B поддерживаются постоянными, вещества D и E удаляются из системы. Обозначим безразмерные концентрации веществ A, B, X, Y буквами a, b, x, y , соответственно. Дифференциальные уравнения для концентраций веществ X и Y выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial x}{\partial t} &= \nabla^2 x + a - (b+1)x + x^2 y, \\ \frac{\partial y}{\partial t} &= \nabla^2 y + bx - x^2 y. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Для однородного состояния диффузия отсутствует, так как $\nabla^2 x = \nabla^2 y = 0$. В этом случае равновесие в системе (2.15) достигается при $x_0 = a$,

$y_0 = b/a$. Однако при $b > a^2 + 1$ это равновесное состояние становится неустойчивым, и в системе возникают колебания — концентрации веществ X, Y периодически изменяются. При усилении неравновесности возникают также колебания в пространстве — образуются волны концентраций, периодически пробегающие по системе.

Другой пример системы, обнаруживающей интересное поведение, можно найти в статье [37].

Достаточно полный (хотя и несколько устаревший) обзор работ, посвященных методу ЛВЕ, можно найти в статьях [39, 40], а также в Интернете по адресу:

http://www.scholarpedia.org/article/Lattice_Boltzmann_Method.

Задания

1. Реализуйте модель НРР. Задайте периодические граничные условия. Это просто сделать, добавив по одному ряду узлов с каждой стороны области (фиктивные узлы). Перед шагом распространения необходимо скопировать значения левого ряда физических узлов в правый фиктивный ряд. Тогда частицы, вылетая из левой границы области налево, появятся на ее правой границе. С другими границами поступают также. Вначале возьмите одну единственную частицу и проверьте правильность всех граничных условий. Затем убедитесь, что для двух частиц их столкновения «почти лоб в лоб» и под прямым углом происходят верно. Для любого числа частиц должны сохраняться их полное число и полный импульс.
2. Рассмотрите «одномерную» задачу *распада разрыва*. Для этого в некотором вертикальном слое $x_1 < x < x_2$ первоначально задается повышенное значение плотности. На границах этого слоя плотность вещества испытывает разрыв. В одномерном случае все величины не зависят от вертикальной координаты. Постройте графики плотности и горизонтальной скорости в зависимости от горизонтальной координаты. Для этого их надо усреднить по y , то есть по вертикальным рядам узлов.
3. Смоделируйте разлет газового облака (круглой области), плотность которого выше, чем у окружающей среды.
4. Кинематическая модель детонации. Пусть горизонтально вдоль оси расчетной области, заполненной газом низкой плотности, располо-

жен стержень, состоящий из «взрывчатого вещества», вдоль которого идет детонационная волна (ДВ). Скорость волны считается постоянной (подумайте, как задать ее не целым числом). Вещество перед волной можно считать абсолютно твердым, прохождение волны приводит к химическому превращению с выделением энергии и превращает вещество в газ с максимально возможной плотностью частиц (продукты детонации, ПД). ПД начинают расширяться вбок, порождая ударные волны. Если скорость ДВ больше скорости звука, то ударная волна расходится в форме конуса Маха под углом к оси заряда. Случай дозвуковой скорости волны соответствует медленному горению. Когда ДВ доходит до конца стержня, ПД начинают расширяться также вперед. Левая и правая граница области должны быть твердыми стенками, сверху и снизу можно задать периодические граничные условия или также стенки.

5. Напишите программу расчета по одномерной модели ЛВЕ. Рассмотрите задачу распада разрыва.
6. С помощью двумерной модели ЛВЕ с 9 скоростями частиц смоделируйте течение Пуазейля в плоском канале. Граничные условия на входе и выходе канала задайте периодическими. Перепад давления по длине канала, вызывающий течение вещества, можно смоделировать небольшой объемной силой, направленной вдоль канала.
7. Рассмотрите течение, в котором первоначально существует тангенциальный разрыв скорости (например, по разные стороны искривленной границы параллельная ей компонента скорости принимает противоположные значения). Исследуйте развитие неустойчивости такого течения (неустойчивости Кельвина – Гельмгольца).
- 8.* В одномерном и двумерном случаях введите взаимодействие между частицами, находящимися в разных узлах. Получите в расчетах разделение фаз (спинодальную декомпозицию), в частности, конденсацию капель из пересыщенного пара и вскипание перегретой жидкости. Для уравнения состояния Ван-дер-Ваальса вычислите значения плотностей жидкости и насыщенного пара при нескольких значениях температуры, постройте схематично кривую сосуществования фаз (бинодаль).
9. Создайте модель с несколькими компонентами. Смоделируйте разделение смеси веществ на компоненты из первоначально однородного состояния. Введите возможность превращения веществ (химиче-

ские реакции). Исследуйте задачу «реакция-диффузия».

2.5. Химические реакции, стохастическое горение

2.5.1. Мономолекулярная экзотермическая реакция

Рассмотрим мономолекулярную экзотермическую химическую реакцию. В ней одна молекула вещества A превращается в одну молекулу вещества B . В химии такие молекулы называются изомерами. Смысл такой химической реакции состоит в том, что активный атом или группа атомов внутри молекулы переходят из одного устойчивого положения в другое. При этом выделяется энергия q (теплота реакции). Для наглядного представления происходящего процесса удобно ввести *координату реакции* x , которая меняется в пределах от 0 (вещество A) до 1 (вещество B). Промежуточные значения x соответствуют различным стадиям реакции. Например, если активный атом один, то x — это просто его координата вдоль траектории между устойчивыми положениями. Для простоты рассмотрим именно этот случай. Примерный график зависимости потенциальной энергии от x приведен на рис. 2.10. Для того, чтобы произошла реакция, необходимо вначале затратить *энергию активации* E_a (иначе все возможные экзотермические реакции давно бы произошли, и наше собственное существование было бы невозможно). На графике это выражено потенциальным барьером, который необходимо преодолеть (от точки A до точки C). Затем система скатывается в потенциальную яму до точки B с выделением теплоты реакции q . Выделившаяся энергия перераспределяется по внутренним степеням свободы молекулы B .

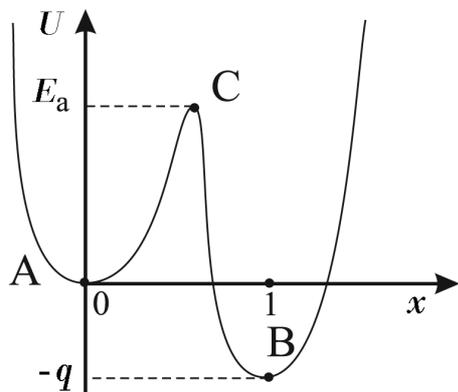


Рис. 2.10. Зависимость потенциальной энергии от координаты реакции

Рассмотрим среду, состоящую из N_0 молекул вещества A при температуре T_0 . При нормальных температурах обычно $E_a \gg kT$. Почему же реакции все-таки иногда происходят? Дело в том, что существует тепловое движение, за счет которого энергия активного атома E может иногда становиться заметно большей, чем kT . Можно считать, что состояния активных атомов подчиняются распределению Больцмана $f(E) = \frac{1}{kT} \exp(-E/kT)$. За характерное время τ могут прореагировать все молекулы, энергия активного атома в которых больше, чем E_a . Доля

таких молекул выражается интегралом

$$\alpha = \int_{E_a}^{\infty} f(E) dE = \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right).$$

Это выражение можно рассматривать также как вероятность того, что для данной молекулы произойдет реакция за характерное время τ , которое имеет физический смысл времени между столкновениями молекул или времени перераспределения энергии между внутренними колебательными степенями свободы молекулы. На каждом шаге по времени для каждой молекулы вычисляется энергия текущего состояния активного атома E . Если $E > E_a$, реакция происходит, иначе — нет. Для моделирования необходимо иметь генератор случайных чисел с экспоненциальным распределением. Оказывается, это можно сделать достаточно просто, вычисляя случайное значение текущей энергии по формуле $E = -kT \ln(\mathbf{random})$ (подробности в [4], глава 10).

Проследим за судьбой выделившейся энергии. Один крайний случай — теплопроводность вещества нулевая, тепло остается там, где произошла реакция, и никак не влияет на реакцию других молекул. Реакция происходит при постоянной температуре непрореагировавших молекул T_0 . Тогда изменение со временем их числа задается уравнением

$$\frac{dN}{dt} = -\frac{N}{\tau} \exp\left(-\frac{E_a}{kT_0}\right) = -uN.$$

Заметим, что скорость химической реакции, приведенная к одной молекуле, $u = \frac{1}{\tau} \exp\left(-\frac{E_a}{kT_0}\right)$ не зависит от времени. В этом случае решение уравнения хорошо известно $N = N_0 \exp(-ut)$. То же самое происходит, если теплопроводность среды бесконечна, а температура стенок поддерживается постоянной и равной T_0 .

Другой крайний случай — когда выделившаяся энергия мгновенно перераспределяется между всеми молекулами (бесконечная теплопроводность), а стенки тепло не проводят (процесс адиабатический). Тогда при реакции одной молекулы температура среды увеличивается на $\Delta T = q/N_0 c$. Здесь c — теплоемкость одной молекулы, она считается одинаковой для веществ A и B , хотя нетрудно задать и различные зна-

чения. В этом случае необходимо решать систему уравнений¹

$$\begin{aligned}\frac{dN}{dt} &= -\frac{N}{\tau} \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right), \\ \frac{dT}{dt} &= -\frac{q}{N_0 c} \frac{dN}{dt}.\end{aligned}\quad (2.16)$$

Второе уравнение описывает скорость увеличения температуры системы за счет выделяющейся энергии. Здесь существует положительная обратная связь. Повышение температуры приводит к увеличению вероятности перехода для следующих молекул, то есть к увеличению скорости реакции и дальнейшему росту температуры. При некоторых соотношениях величин E_a , c , q возможно интересное явление: вначале в течение длительного времени количество прореагировавшего вещества почти не увеличивается, а затем за короткое время реакция проходит практически полностью. Это явление называется *тепловым взрывом*.

* Следует подчеркнуть, что дифференциальные уравнения соответствуют нашей системе только в пределе $N_0 \rightarrow \infty$. При конечном числе частиц результаты моделирования будут различаться от опыта к опыту. Можно провести несколько расчетов и усреднить полученные решения, отклонения средних значений от решения дифференциальных уравнений будут уменьшаться с ростом числа опытов n как $1/\sqrt{n}$.

Ясно, что в реальности коэффициент теплопроводности имеет некоторое промежуточное значение. В этом случае обычно распространяется волна горения.

Кроме распространения тепла по объему реагирующего вещества обычно происходит еще и теплоотвод в окружающую среду. Если вклад излучения мал, поток тепла пропорционален разнице температур $j = \alpha(T - T_0)$, где T_0 — температура окружающей среды (логично принять ее равной начальной температуре вещества T_0), а α — некий постоянный коэффициент. Если теплоотвод достаточно велик, то температура повышается мало, и реакция замедляется.

В природе для каждой прямой реакции существует обратная — вещество B может превращаться в вещество A . Эта реакция эндотермическая — в ее ходе поглощается тепло q . Энергия активации обратной реакции $E'_a = E_a + q$. По мере хода прямой реакции скорость обратной реакции увеличивается, и в конце концов наступает равновесие, когда скорости прямой и обратной реакций сравниваются. Концентрации веществ

¹О решении дифференциальных уравнений см. раздел 2.5.2, а также [4](гл. 2, 3, 5) и [5](гл. 16).

A и B в равновесии связаны законом Больцмана $n_A/n_B = \exp(-q/kT)$. Чем меньше температура, тем полнее происходит превращение.

2.5.2. *Решение обыкновенных дифференциальных уравнений

Дифференциальные уравнения часто возникают при описании физических процессов. Действительно, одной из основных задач является такая: пусть наша система описывается переменными x_1, \dots, x_N , и мы знаем их значения в некоторый момент времени t_0 , а хотим узнать значения в другой момент $t > t_0$. При этом известны также скорости изменения переменных x_1, \dots, x_N :

$$\frac{dx_1}{dt} = f_1(t, x_1, \dots, x_N), \dots, \frac{dx_N}{dt} = f_N(t, x_1, \dots, x_N). \quad (2.17)$$

В *обыкновенных* дифференциальных уравнениях все переменные x_1, \dots, x_N являются функциями одной независимой переменной t . Мы будем рассматривать уравнения только с первыми производными по времени (первого порядка), так как уравнение n -го порядка можно свести к системе n уравнений первого порядка (пример в разделе 2.3.1).

Обозначим набор наших переменных $x_1, \dots, x_N \equiv X$, а набор функций $f_1, \dots, f_N \equiv F$, тогда систему уравнений (2.17) можно записать в символическом виде:

$$\frac{dX}{dt} = F(t, X). \quad (2.18)$$

Мы хотим описать эволюцию системы на промежутке времени от t_0 до $t_1 > t_0$. Совокупность полученных зависимостей всех переменных, входящих в X , от времени называется решением системы. Для того, чтобы решение системы (2.18) (или (2.17)) было однозначным, необходимо задать N *начальных условий* — значений X_0 . Если все эти значения известны при $t = t_0$, такая задача называется *задачей Коши*. Когда значения некоторых переменных заданы при $t = t_0$, а некоторых — при $t = t_1$, имеем *краевую задачу*. Будем рассматривать только первый случай.

Естественно, невозможно знать состояние системы в *каждый* момент времени, потому что их бесконечно много, а мы можем иметь дело только с конечными числами. Поэтому поступим так же, как мы уже делали раньше: разделим наш интервал времени (t_0, t_1) на k равных частей и обозначим $\Delta t = (t_1 - t_0)/k$ (хотя приращения Δt не обязательно должны быть равными). Ясно, что достаточно уметь находить значения $X(t + \Delta t)$

по значениям $X(t)$. Повторяя эту процедуру необходимое число раз получим значения $X(t)$ в любой момент времени. Чем меньше Δt , тем точнее наше решение. Приведем несколько простых способов.

Метод Эйлера

Вычислим значения функций $F(t, X(t))$. Если за малый интервал времени Δt эти значения меняются слабо, то приближенно можно считать, что $X(t + \Delta t) = X(t) + F(t, X(t)) \Delta t$. Видно, что этот метод максимально прост, однако мы не рекомендуем его применять по двум причинам:

- 1) он имеет низкую точность и, что более важно,
- 2) отклонения вычисленных значений X от точного решения нарастают со временем — метод *неустойчив*.

Метод Эйлера несимметричен — при продвижении на промежутке $(t, t + \Delta t)$ мы используем значение производной лишь в его начальной точке. Это приводит к тому, что метод Эйлера имеет первый порядок точности по Δt , то есть погрешность расчетов пропорциональна Δt . Описанные далее два метода частично исправляют этот недостаток.

Методы Рунге – Кутты второго порядка

Метод 1 (метод средней точки). Опять вычислим значения производных в начальной точке, но сместимся только на *половину* шага:

$$\bar{X}(t + \frac{\Delta t}{2}) = X(t) + F(t, X(t)) \frac{\Delta t}{2}.$$

Теперь можно вычислить значения производных в точке $t + \Delta t/2$, используя промежуточные значения переменных в этой точке \bar{X} . Затем делается полный шаг снова из начальной точки:

$$X(t + \Delta t) = X(t) + F(t + \frac{\Delta t}{2}, \bar{X}) \Delta t.$$

Метод 2. Можно действовать по-другому — брать не значения производных в средней точке, а среднее от значений в крайних точках интервала Δt :

$$\begin{aligned} \bar{X} &= X(t) + F(t, X(t)) \Delta t, \\ X(t + \Delta t) &= X(t) + \frac{1}{2} (F(t, X(t)) + F(t + \Delta t, \bar{X})) \Delta t. \end{aligned}$$

Как легко можно видеть, этот метод совпадает с методом средней точки для *половинных* временных шагов $t + \Delta t/2, t + 3\Delta t/2, \dots$

Мы рассмотрели лишь наиболее простые методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений. Желаящие познакомиться с более

сложными (и более точными) методами могут обратиться, например, к книге [5].

Задания

1. Напишите программу, моделирующую ансамбль частиц, в которых возможна мономолекулярная экзотермическая реакция. Рассмотрите случай нулевой теплопроводности. Постройте графики зависимости числа непрореагировавших частиц от времени при разных температурах. Сравните полученные графики с теоретическими зависимостями.
2. Постройте графики зависимости числа непрореагировавших частиц, температуры и скорости реакции от времени в случае бесконечной теплопроводности внутри области моделирования, считая процесс адиабатическим.
- 3.* Модифицируйте программу предыдущего задания так, чтобы выполнялось последовательно несколько расчетов. Сравните полученные графики для каждого расчета. Нарисуйте график, усредненный по всем вариантам. Кроме того, выведите результаты численного решения системы уравнений (2.16) и сравните их со средними значениями.
4. В случае бесконечной теплопроводности добавьте теплоотвод от системы. Исследуйте, как влияет его величина на время, за которое реакция происходит полностью.
5. Введите возможность обратной реакции. Чему равны ее энергия активации и тепловыделение? Найдите равновесное отношение числа прореагировавших частиц к числу непрореагировавших и сравните его с теоретическим значением.
6. Введите в программу простейшую модель теплопроводности. Для этого надо разместить «неподвижные» частицы в узлах пространственной решетки. Пусть при каждом акте реакции тепло q выделяется в данном узле в виде нескольких N_q квантов энергии $\Delta q = q/N_q$, которые затем могут блуждать случайным образом по решетке. Тогда температура в каждом узле $T = T_0 + n_q \Delta q / c$, где n_q — совокупное число квантов, находящихся в данном узле в текущий момент времени. Задайте прямоугольную область, которую «поджигают» с одной стороны, создавая горячий слой $T > T_0$.

На боковых стенках задайте периодические граничные условия. Как происходит дальнейшее горение?

2.6. Теплопроводность, детерминированное горение

Горение — это завораживающий и зрелищный феномен природы, одновременно являющийся интересным объектом для исследований. Несмотря на множество сложных и разнообразных физико-химических процессов, его определяющих, удается качественно описать многие его реальные особенности, используя довольно простые модели. В простейшем случае среда должна обладать теплопроводностью и возможностью протекания экзотермической реакции, скорость которой сильно возрастает при увеличении температуры. Уже в такой простой системе возможны различные режимы горения. Оказывается, обычное стационарное горение, при котором скорость фронта не зависит от времени, может стать неустойчивым. Быстрые выгорания вещества чередуются со стагнационными периодами. В двумерном случае фронт может искривляться и состоять из нескольких горячих зон, которые движутся не только вглубь непрореагировавшего вещества, но и вдоль фронта. Эти горячие участки могут сталкиваться, исчезать и появляться снова. Рассмотрим пустотелый цилиндр, на поверхность которого нанесен тонкий слой реагирующего вещества. В этом случае возможен режим, когда горячие зоны двигаются по спирали вокруг цилиндра («спиновый режим»).

Предлагается рассмотреть среду с учетом теплопроводности, в которой возможна экзотермическая химическая реакция (ХР). Численно решая систему дифференциальных уравнений, можно исследовать различные режимы горения в одномерном и двумерном случаях.

2.6.1. Размерная система уравнений

Пусть скорость ХР резко возрастает при увеличении температуры. В таких системах возможен самораспространяющийся режим горения, при котором тепло из прореагировавшей разогретой зоны распространяется в новые слои вещества и ускоряет в них ХР. При некоторых условиях этот процесс может самостоятельно распространяться неограниченно далеко.

В первом приближении для моделирования волны горения ограничимся системой с постоянными коэффициентами теплоемкости и теплопроводности. Будем моделировать ХР простейшим образом: вещество вида A переходит в B , при этом выделяется тепло. Для скорости ХР

воспользуемся законом Аррениуса для реакции первого порядка

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\frac{N}{\tau} e^{-E/RT},$$

где N — доля непрореагировавшего вещества A , меняющаяся от 1 — исходное состояние, до 0 — все прореагировало, E — энергия активации ХР, τ — характерное время перераспределения энергии, T — температура в данной точке. В одномерном случае необходимо добавить уравнение теплопроводности с дополнительным членом, отвечающим за энергосыделение,

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \rho Q \frac{\partial N}{\partial t}, \quad (2.19)$$

где ρ — плотность, c — удельная теплоемкость, κ — коэффициент теплопроводности, Q — удельное энергосыделение при ХР. Все коэффициенты в системе постоянны, что является серьезным отличием от реальности. Несмотря на это, модель качественно верно отражает многие стороны явления. В этой системе уравнений возможен режим в виде самостоятельно распространяющейся волны горения. На рис. 2.11 показан пример волны, распространяющейся вдоль оси X со скоростью U (T_0 — температура перед волной горения). Подробнее о системах, в которых возможно горение, можно прочесть в [41].

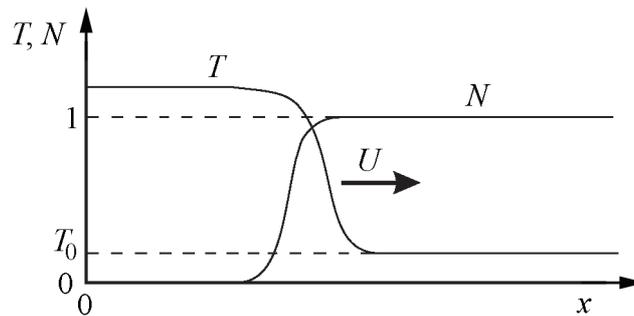


Рис. 2.11. Профили температуры и исходного компонента в стационарной волне горения

2.6.2. Система уравнений для безразмерных величин

Поделив уравнение теплопроводности на ρQ и перейдя к безразмерным температуре $\tilde{T} = cT/Q$ и энергии активации $\tilde{E} = cE/(RQ)$, получим

систему уравнений:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \chi \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \frac{\partial N}{\partial t}, \quad (2.20)$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\frac{N}{\tau} e^{-E/T}, \quad (2.21)$$

где $\chi = \kappa/\rho c$ называется коэффициентом температуропроводности. Значок « \sim » у новых безразмерных величин \tilde{T} и \tilde{E} для простоты опущен. Теперь безразмерные температура и энергия активации измеряются в энергетических единицах, равных энергии, выделяющейся в узле при полном выгорании вещества. Таким образом, из закона сохранения энергии следует, что в волне горения температура всегда должна подниматься на единицу от начальной температуры среды T_0 , что удобно. Получившаяся система более наглядно и просто описывает явление, и в дальнейшем мы будем ссылаться именно на нее.

2.6.3. Различные режимы горения

Из имеющихся в системе уравнений (2.20) и (2.21) трех параметров наиболее интересна безразмерная энергия активации E , равная отношению энергии активации к теплоте реакции. Именно этот параметр определяет режим волны горения, а остальные параметры τ и χ только масштабируют явление во времени и в пространстве.

Для начала рассмотрим одномерный случай. Здесь возможны два режима горения: стационарный и пульсирующий (автоколебательный). В первом — скорость распространения волны постоянна, а профили температуры и концентрации переносятся вдоль оси X не деформируясь (рис. 2.11). Во втором — скорость волны переменная, и горение распространяется в виде чередующихся вспышек и угасаний. От значения параметра E , зависит какой режим реализуется. Существует критическое значение безразмерной энергии активации E_* . При $E < E_*$ — стационарное горение, а при $E > E_*$ — пульсирующее. Теоретически можно показать, что при $T_0 \ll 1$ критическое значение $E_* = 6,56$. При увеличении начальной температуры T_0 критическое значение E_* возрастает [42].

Для моделирования волны горения в двумерном случае в уравнение (2.20) нужно добавить перенос тепла по второй координате — $\chi \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}$. Если использовать периодические граничные условия по координате Y , то такая постановка соответствует горению, распространяющемуся по

поверхности пустотелого теплопроводящего цилиндра, покрытого реагирующим веществом.

Кроме стационарного и пульсирующего режимов для этой двухмерной системы возможен третий режим распространения волны горения — спиновый. При этом фронт состоит из нескольких зон горения, распространяющихся по винтовой линии вдоль цилиндра (рис. 2.12). Область существования спинового режима — $E > E_{**}$. Можно показать, что критическое значение $E_{**} = 6,3$ при $T_0 \ll 1$. Критическое значение энергии активации для спинового режима также возрастает с увеличением T_0 [42].

Видно, что $E_* > E_{**}$, это означает, что фронт горения в большей степени неустойчив к двумерным возмущениям, чем к одномерным. В реальных условиях автоколебательный режим будет неустойчив, что и наблюдается в экспериментах [43].

На рисунке 2.12 приведен характерный пример численного моделирования спинового режима горения. Градациями серого цвета показано поле температур: черный — маленькая, белый — большая температура. Отдельно черными пятнами выделены горячие зоны. Волна горения распространяется слева направо, по вертикали — периодические граничные условия.

Примером реальной физической системы, где бы реализовывались все выше перечисленные режимы, может служить горение бенгальской свечи. При внимательном рассмотрении во фронте горения хорошо заметны яркие точки, «бегающие» вдоль фронта, это и есть аналог спинового режима. Пульсирующий режим наиболее ярко проявляется незадолго до угасания самой свечи.

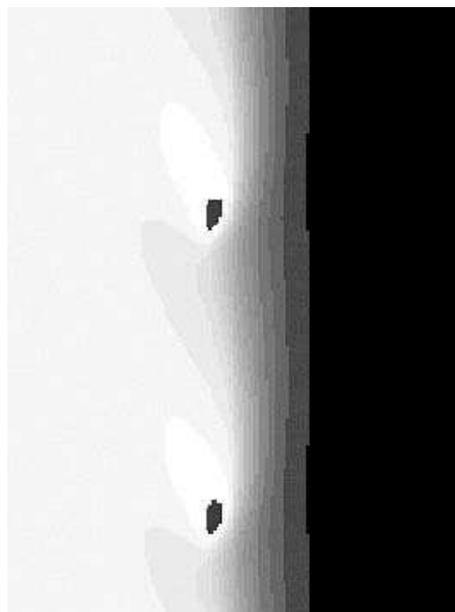


Рис. 2.12. Режим спинового горения

2.6.4. Явная разностная схема

Прежде чем решать систему уравнений горения (2.20) и (2.21), рассмотрим численные методы решения одномерного уравнения теплопроводности

сти без химических реакций

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \chi \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}.$$

Для этого в уравнении теплопроводности заменим частные производные на разностные. Для сетки с постоянным шагом получаем соотношение, связывающее температуру в узле на новом шаге по времени с температурой в узлах текущего временного слоя

$$\frac{\hat{T}_i - T_i}{\Delta t} = \chi \frac{\frac{T_{i+1} - T_i}{h} - \frac{T_i - T_{i-1}}{h}}{h} = \chi \frac{(T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}))}{h^2}. \quad (2.22)$$

Здесь \hat{T}_i — новая температура в узле. Прделав эту процедуру для каждого узла, мы «явно» найдем температуру на новом слое по времени. Такая разностная схема называется *явной*. Метод требует два массива для хранения старой и новой температур, устойчив при условии $\chi \Delta t / h^2 < 0,5$, на практике значения $\chi \Delta t / h^2 = 0,4$ вполне достаточно. Для вычисления температуры в крайних точках предлагается использовать адиабатические граничные условия: $(T_2 - T_0) / 2h = 0$ и $(T_{n+1} - T_{n-1}) / 2h = 0$, что эквивалентно условиям $T_0 = T_2$, $T_{n+1} = T_{n-1}$.

Теперь, чтобы учесть ХР, добавим к (2.22) изменение безразмерной температуры за счет энерговыделения в химических реакциях за шаг по времени

$$\begin{aligned} \Delta N_i &= -\frac{N_i}{\tau} e^{-E/T_i} \Delta t, \\ \hat{T}_i &= T_i + \frac{\chi \Delta t}{h^2} (T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}) - \Delta N_i, \\ \hat{N}_i &= N_i - \Delta N_i, \end{aligned} \quad (2.23)$$

где $i = 1, 2, \dots, n$.

Используя эту разностную схему, можно численно решать изначальную систему дифференциальных уравнений (2.20) и (2.21) для безразмерных величин.

2.6.5. * Неявные разностные схемы

В разделе 2.6.4 мы говорили о явной разностной схеме для уравнения теплопроводности. Это простой, но не всегда самый эффективный способ решения уравнения теплопроводности. Рассмотрим и сравним некоторые альтернативные варианты. Введем обозначения для разностной аппроксимации второй производной по координате $(\delta^2 T)_i = T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}$. Ниже приведены несколько разностных схем:

1.  $\frac{\hat{T}_i - T_i}{\Delta t} = \chi \frac{(\delta^2 T)_i}{h^2}, \quad e = O[\Delta t] + O[h^2],$

явная схема, устойчива, если $\chi \Delta t / h^2 \leq 1/2$;

2.  $\frac{\hat{T}_i - T_i}{\Delta t} = \chi \frac{(\delta^2 \hat{T})_i}{h^2}, \quad e = O[\Delta t] + O[h^2],$

неявная схема, всегда устойчива;

3.  $\frac{\hat{T}_i - T_i}{\Delta t} = \chi \frac{(\delta^2 T)_i + (\delta^2 \hat{T})_i}{2h^2}, \quad e = O[(\Delta t)^2] + O[h^2],$

неявная схема Кранка – Николсон² (1947), всегда устойчива.

Рисунки слева называются шаблонами разностных схем. Запись $e = O[(\Delta t)^{k_1}] + O[h^{k_2}]$ указывает погрешность аппроксимации схемы и отражает ошибку численного решения. В частности, с некоторым приближением можно сказать, что отклонение от точного решения пропорционально $(\Delta t)^{k_1}$ и h^{k_2} .

Преимущество первой схемы — простота реализации. Недостатки: низкий порядок аппроксимации по времени и ограничение сверху на шаг Δt . Вторая схема абсолютно устойчива (то есть при любом шаге по времени), но имеет только первый порядок точности по времени.

Третья схема имеет второй порядок аппроксимации по обоим переменным, и тоже абсолютно устойчива, что особенно удобно, если параллельно с уравнением теплопроводности вычисляется еще что-то со своим шагом по времени. Но, как и вторая схема, она неявная, и для вычисления температур на новом слое необходимо решать систему линейных уравнений.

Преобразовав выражение для третьей схемы, получим систему n уравнений относительно $n + 2$ неизвестных \hat{T}_i на новом временном слое

$$\hat{T}_{i-1} - \left(2 + \frac{2h^2}{\chi \Delta t}\right) \hat{T}_i + \hat{T}_{i+1} = -T_{i-1} + \left(2 - \frac{2h^2}{\chi \Delta t}\right) T_i - T_{i+1},$$

где $i = 1, 2, \dots, n$. Недостающие \hat{T}_0 и \hat{T}_{n+1} выберем в соответствии с граничными условиями. Решив систему, например, методом прогонки (см. раздел 2.6.6), найдем температуру в каждом узле на новом слое по времени.

Подробнее об этих и других разностных схемах можно узнать в книге [44]. Отметим, что двумерная явная схема устойчива при условии $\chi \Delta t / h^2 < 1/4$.

²Phyllis Nicolson — известная английская ученая.

2.6.6. *Метод прогонки

Часто при решении задач физики и математики нужно решать систему линейных уравнений. Есть универсальные алгоритмы для решения системы из N уравнений, где N ограничивается только ресурсами вычислительной машины. Для таких алгоритмов число арифметических операций растет пропорционально N^2 , что часто неприемлемо много.

Для более частных случаев, когда в системе много нулевых элементов, число арифметических операций в алгоритме может расти пропорционально N , что резко снижает время, необходимое для вычислений, и, что более важно, уменьшает требования к ресурсам памяти ЭВМ. Например, для диагональных систем, в которых ненулевые элементы расположены только на главной и соседних диагоналях, есть алгоритмы, называемые прогонкой. Авторам известны методы прогонки для трех- и пятидиагональных систем. Для примера познакомимся только с первым из них.

Пусть есть система линейных уравнений в каноническом виде

$$\begin{aligned} a_i x_{i-1} + b_i x_i + c_i x_{i+1} &= d_i, \quad \text{где } i = 1, 2, \dots, n, \\ a_1 &= c_n = 0. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Решение сводится к двум циклам расчетов по рекуррентным формулам, которые называются *прямым и обратным ходами прогонки*. Для системы (2.24) прямой ход сводится к исключению неизвестных x_{i-1} .

Первые два уравнения системы (2.24) имеют вид

$$b_1 x_1 + c_1 x_2 = d_1, \quad a_2 x_1 + b_2 x_2 + c_2 x_3 = d_2. \quad (2.25)$$

Первое из них можно переписать в виде

$$x_1 = \frac{d_1 - c_1 x_2}{b_1} = A_2 x_2 + B_2,$$

где

$$A_2 = -c_1/b_1, \quad B_2 = d_1/b_1. \quad (2.26)$$

Подставим x_1 во второе уравнение. Получим связь между x_2 и x_3 в виде $x_2 = A_3 x_3 + B_3$. Аналогично, подставляя $x_{i-1} = A_i x_i + B_i$ в очередное уравнение (2.24) получим: $a_i(A_i x_i + B_i) + b_i x_i + c_i x_{i+1} = d_i$. Выразим x_i через x_{i+1}

$$x_i = -\frac{c_i}{a_i A_i + b_i} x_{i+1} + \frac{d_i - a_i B_i}{a_i A_i + b_i}.$$

Это уравнение опять можно переписать в виде:

$$x_i = A_{i+1} x_{i+1} + B_{i+1}, \quad i = n, n-1, \dots, 1, \quad (2.27)$$

где

$$\begin{aligned} A_{i+1} &= -\frac{c_i}{b_i - a_i A_i}, \\ B_{i+1} &= \frac{d_i - a_i B_i}{b_i - a_i A_i}. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Таким образом, мы имеем рекуррентные формулы для вычисления коэффициентов A_i и B_i (прямой ход прогонки), а затем рекуррентно вычисляем неизвестные x_i по формулам (2.27) (обратный ход прогонки).

Чтобы начать прямую прогонку, нужно сначала вычислить A_2 и B_2 из (2.26).

Одним из частных случаев (например, если для уравнения теплопроводности заданы граничные условия $T_1 = \varphi$) является граничное условие $x_1 = \varphi$ вместо первого уравнения системы (2.24), то есть кроме $a_1 = 0$ еще и $c_1 = 0$, а $b_1 = 1$ и $d_1 = \varphi$.

Для адиабатических граничных условий поток тепла $q = -\kappa \partial T / \partial x$ на границе равен нулю. Соответствующая разностная формула имеет вид $q = -\kappa(T_2 - T_1)/h = 0$. При этом $T_2 - T_1 = 0$ и коэффициенты в первом уравнении системы (2.24) равны $b_1 = 1$, $c_1 = -1$, а $d_1 = 0$.

В обоих случаях можно начать вычисления сразу по формуле (2.28), полагая для простоты $A_1 = 0$, $B_1 = 0$.

На правой границе граничные условия тоже могут быть разными. Если известно значение $x_n = \psi$, то обратный ход прогонки начинается сразу по рекуррентным формулам (2.27). В случае адиабатических граничных условий в качестве последнего уравнения опять используется условие равенства теплового потока нулю $T_n - T_{n-1} = 0$, то есть $x_n - x_{n-1} = 0$. Кроме того, после прямого хода прогонки имеем $x_{n-1} = A_n x_n + B_n$. Сначала решаем систему из этих двух уравнений и находим $x_{n-1} = x_n = B_n / (1 - A_n)$.

Прогонка требует всего $3N$ ячеек памяти и $9N$ арифметических операций, что весьма эффективно. Можно показать, что если выполнено условие преобладания диагональных элементов

$$|b_i| \geq |a_i| + |c_i|$$

(причем хотя бы для одного i имеет место неравенство), то в формулах прямого хода (2.28) не возникает деления на нуль, и поэтому исходная система (2.24) имеет единственное решение.

Подробнее о решении систем уравнений и о численных методах вообще можно прочитать в книге [45].

Задания

1. Напишите программу, решающую одномерное уравнение теплопроводности с адиабатическими граничными условиями, используя явную разностную схему. Исследуйте поведение численного решения при различных значениях $\chi\Delta t/h^2$.
- 2.* Напишите программу, решающую одномерное уравнение теплопроводности с адиабатическими граничными условиями, используя неявную разностную схему.
3. Сравните полученное численное решение с аналитическим в том случае, если в начальный момент в точке $x = x_0$ мгновенно выделяется количество тепла Q_0 . Теоретическое решение уравнения теплопроводности на неограниченной прямой для этого случая имеет вид
$$T(x, t) = T_0 + \frac{Q_0}{Q} \frac{1}{\sqrt{4\pi\chi t}} e^{-(x-x_0)^2/4\chi t}$$
. Посмотрите скорость нарастания ошибки численного решения, сравните результаты с предсказаниями раздела 2.6.5. Проверьте сохранение энергии при ненулевом тепловом потоке на границе счетной области.
4. Добавьте химическую реакцию. Посмотрите профили $T(x)$ и $N(x)$. Подберите параметры системы и начальные условия, чтобы получилась волна горения. Какой из профилей более крутой — $T(x)$ или $N(x)$, и почему?
5. По профилю $N(x)$ рассчитайте положение фронта. Достаточно точным и простым способом является нахождение координаты с $N = 0,5$. Предлагается воспользоваться линейной интерполяцией между двумя соседними точками. Постройте график скорости горения от координаты фронта.
6. Исследуйте влияние E на режим горения. При каком минимальном значении E возникает пульсирующий режим?
- 7.* Напишите программу, моделирующую двумерную волну горения, с периодическими условиями по горизонтальным границам и адиабатическими по вертикальным. Получите спиновый режим горения. Проверьте неустойчивость пульсирующего режима.

2.7. Образование планетной системы

Для того, чтобы промоделировать один моль вещества, необходим один моль компьютеров.

2.7.1. Происхождение звезд и звездных систем

Согласно теории Фридмана, Леметра, Гамова возникновение Вселенной произошло из точки в результате *Большого взрыва* примерно 13,7 млрд. лет назад [46]. В этот момент времени, который берется за начало отсчета, Вселенная имела очень малый размер и экстремально высокие плотность и температуру. С тех пор Вселенная непрерывно расширяется и остывает. Самая ранняя эпоха, о которой существуют теоретические предположения, называется *Планковской*. Она продолжалась порядка 10^{-43} секунды. В это время гравитационное взаимодействие отделилось от остальных фундаментальных взаимодействий (электрослабого и сильного). Вселенная представляла собой высокооднородную и изотропную среду плотностью $\sim 10^{93}$ г/см³ при температуре $\sim 10^{32}$ К. Через $\sim 10^{-35}$ секунды начался период так называемой *Космической инфляции* - экспоненциального расширения Вселенной. После окончания этого периода ($\sim 10^{-32}$ секунды) Вселенная представляла собой сгусток *кварк-глюонной плазмы*. Через $\sim 10^{-5}$ секунды Вселенная остыла настолько, что стало возможным объединение кварков и глюонов в протоны и нейтроны. Затем образовались элементарные частицы и простейшие ядра дейтерия и гелия. Примерно через 400 тысяч лет температура понизилась настолько, что стали возможными рекомбинация электронов с протонами и существование устойчивых атомов водорода. После этого материя стала прозрачной для излучения, часть которого дошла до нас в виде реликтового излучения.

Первоначально очень слабые нерегулярности в распределении и движении вещества Вселенной усиливались из-за гравитационной неустойчивости и привели к возникновению сильных неоднородностей — протоскоплений. Границами этих уплотнений служили ударные волны, на фронте которых первоначально безвихревое движение вещества приобрело завихренность. Распад уплотнений на отдельные сгущения происходил тоже, по-видимому, из-за гравитационной неустойчивости, и это дало начало протогалактикам. Фрагментация протогалактических облаков в результате их гравитационной неустойчивости вела к возникновению первых галактик, в которых шло формирование звезд. Параллельно

с этим процессом происходило формирование крупномасштабной структуры Вселенной — возникали сверхскопления галактик. Более крупных образований в Метагалактике — наблюдаемой области Вселенной — нет.

Образовавшиеся звезды эволюционировали. Наиболее массивные, масса которых превышала массу Солнца в несколько десятков раз, исчерпали свое водородное топливо за 3–8 миллионов лет и после этого превратились в сверхновые звезды, быстро проходя этап красного гиганта и сбрасывая оболочку мощным взрывом, в результате которого образовались ударные волны. Во время взрыва синтезировались тяжелые элементы. Ядро таких звезд быстро сжимается, и, если его масса не превышает двух масс Солнца, превращается в нейтронную звезду. Звезды, сравнимые по массе с Солнцем, после выгорания водородного топлива за время порядка 10 миллиардов лет превращались в красные гиганты и постепенно сбрасывали свою оболочку. Потерявшее оболочку ядро становилось белым карликом, который постепенно остывал. Сброшенная оболочка становилась межзвездным газом и пылью.

2.7.2. Образование Солнечной системы

Газопылевое облако, из которого позднее образовались планеты и Солнце нашей Солнечной системы, имело ненулевой момент импульса, то есть вращалось. Известно, что суммарный момент импульса в замкнутой системе сохраняется. По мере гравитационного сжатия газопылевого облака расстояние всех его частей от оси вращения сокращалось и скорость вращения сгущающегося облака увеличивалась. Очевидно, что в плоскости, перпендикулярной оси вращения, сжатие происходило медленнее. Поэтому облако, бывшее изначально шаровидным, становилось все более плоским. Из-за гравитационной неустойчивости на периферии формирующегося диска отделилось кольцо вещества. Оставшееся облако продолжало сжиматься и вращаться еще быстрее. Затем от него отделилось новое кольцо вещества. Позднее кольца вещества сгустились в планеты³. Более подробно об образовании Солнечной системы можно прочитать в [47]. Зависимость скорости обращения планет от расстояния до Солнца соответствует третьему закону Кеплера: скорость убывает обратно пропорционально корню квадратному из расстояния до центра.

³В нашей Солнечной системе расстояние от планет до Солнца возрастает согласно закону Тициуса – Боде $r_n = 0,3 \cdot 2^n + 0,4$, где за 1 принимается расстояние от Земли до Солнца, n — целое число ($n = -\infty$ соответствует Меркурию, $n = 3$ — поясу астероидов). Для Нептуна закон не выполняется, нет целого значения n , соответствующего ему. Для остальных планет выполняется с точностью 5 %. Физический смысл этого закона до сих пор не ясен.

2.7.3. Уравнения динамики частиц

Интересно провести моделирование одного из этапов эволюции Вселенной — образование некоей «солнечной» системы из межзвездного газа. Так как число моделируемых частиц весьма ограничено, то можно сказать, что в этой модели планеты образуются из уже сформировавшихся газопылевых уплотнений, которыми и являются задаваемые частицы.

В разделе «Молекулярная динамика» в параграфах 2.3.1—2.3.3 описываются необходимые уравнения, алгоритм Верле и способ оптимизации программы, за исключением потенциала взаимодействия частиц.

Потенциальная энергия гравитационного взаимодействия одной частицы со всеми остальными описывается формулой:

$$U_i = - \sum_{j \neq i} \frac{\gamma m_j m_i}{r_{ij}}.$$

Полная потенциальная энергия системы частиц равна

$$U = \frac{1}{2} \sum_i U_i.$$

Множитель $1/2$ нужен, так как энергия взаимодействия между каждой парой частиц учитывается в этой сумме дважды.

* Есть существенное отличие между потенциалами, используемыми в молекулярной динамике, и гравитационным потенциалом, которое состоит в том, что гравитация — дальнодействующая сила. Поэтому нельзя игнорировать взаимодействие между удаленными частицами. Если вычислять взаимодействия каждой частицы с каждой, то число необходимых операций возрастает как N^2 (N — число частиц в системе). Такая зависимость сильно ограничивает возможности моделирования больших систем, даже на современных компьютерах. Существуют, однако, способы ускорения расчетов, применимые в случаях, когда частицы распределены в пространстве достаточно равномерно или собраны в большое число кластеров. Такие способы основаны на модели взаимодействия «частица–сетка» [48] или на применении мультипольного разложения [49]. За счет некоторой потери точности удается построить методы, в которых число операций возрастает пропорционально $N \log N$, и даже пропорционально N . Из-за больших накладных расходов по сравнению с прямым вычислением взаимодействий, такие изощренные методы становятся быстрее, начиная с некоторого достаточно большого числа частиц в системе. Заметим, что все эти способы неприменимы, когда все частицы собираются в один или несколько компактных кластеров.

Распределение частиц в плоскости в начальный момент времени задается случайным образом, при достаточно большом количестве частиц распределение будет равномерным, если для двумерного случая модуль радиус-вектора выбирать как $r = r_0 \sqrt{\mathbf{random}}$ (способ получения описан в главе 10 книги [4]). Здесь r_0 – радиус газопылевого диска. Случайное значение азимутального угла вычисляется по формуле $\alpha = 2\pi \cdot \mathbf{random}$. Для нахождения начальной скорости, используя третий закон Кеплера, получаем, что $v_x = -y\omega_0(r_0/r)^{3/2}$, $v_y = x\omega_0(r_0/r)^{3/2}$, $v_z = 0$, где ω_0 – угловая скорость частиц на расстоянии r_0 от оси диска.

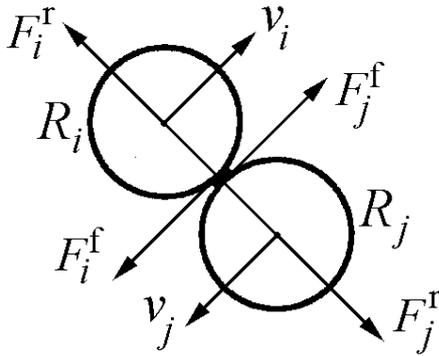


Рис. 2.13. Силы трения и отталкивания

Для частиц, у которых расстояние между центрами меньше суммы их радиусов, необходимо ввести силы трения и отталкивания (рис. 2.13). Это делается для удобства написания программы, так как в реальности при столкновении двух газопылевых облаков произойдет их слипание, в облаках возникнут ударные волны, и при слишком больших скоростях возможно их разбиение на более мелкие.

Силу отталкивания можно взять в виде

$$F^r(b) = k \left(\left(\frac{a}{b} \right)^8 - 1 \right),$$

где $a = R_i + R_j$ – сумма радиусов частиц i и j , b – модуль радиус-вектора взаимодействия $\mathbf{b} = \mathbf{r}_{i,j} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$. Для того, чтобы сила быстро нарастала при уменьшении расстояния между частицами, взята восьмая степень. При $b = a$ сила отталкивания обращается в ноль. При сближении частиц на расстояние меньше суммы их радиусов возникает энергия отталкивания, она равна

$$E = - \int^r F^r(x) dx.$$

Интеграл вычислите самостоятельно.

Сила трения перпендикулярна радиус-вектору взаимодействия \mathbf{b} и направлена против движения частиц относительно друг друга. Единичный вектор вдоль силы трения для двумерной модели равен

$$\mathbf{n} = (n_x, n_y) = \frac{(-b_y, b_x)}{\sqrt{b_x^2 + b_y^2}}.$$

Относительная скорость поверхностей частиц, перпендикулярная радиусу, $W_{\perp} = \mathbf{W} \cdot \mathbf{n} - \omega_i R_i - \omega_j R_j$, где ω_i и ω_j — угловые скорости вращения частиц i и j , $\mathbf{W} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$ — относительная скорость двух взаимодействующих частиц.

Сила трения по модулю равна $F^f = \mu F^r(b)$, где μ — коэффициент трения, зависящий от скорости W_{\perp} . В простейшем приближении $\mu = \beta W_{\perp}$. Тогда вектор силы трения равен

$$\mathbf{F}^f = \beta W_{\perp} F^r(b) \mathbf{n}.$$

Угловую скорость каждой частицы можно найти с помощью системы уравнений:

$$I_i \varepsilon_i = R_i \sum F_{ij}^f \frac{b}{R_i + R_j},$$

$$\frac{d\omega_i}{dt} = \varepsilon_i,$$

где $I_i = \frac{2}{5} m_i R_i^2$ — момент инерции, ε_i — угловое ускорение. Энергия вращения равна $E_{rot} = I_i \omega^2 / 2$.

Единичный вектор вдоль силы трения для трехмерной модели равен

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{z}}{|\mathbf{z}|},$$

где $\mathbf{z} = [(\mathbf{b} \times \mathbf{W}) \times \mathbf{b}] = \mathbf{W}(\mathbf{b} \cdot \mathbf{b}) - \mathbf{b}(\mathbf{b} \cdot \mathbf{W})$.

Для системы, в которой есть сила трения, полная энергия не сохраняется, часть энергии в результате трения переходит в тепло. Энергию, перешедшую в тепло, можно найти в виде разности начальной и текущей полной энергии.

Возможно полное слипание пары частиц. В результате образуется одна, радиус которой вычисляется как

$$R = \sqrt[3]{R_i^3 + R_j^3},$$

а масса равна сумме масс слипшихся облаков. Координаты новой частицы вычисляются по формуле

$$\mathbf{r} = \frac{m_i \mathbf{r}_i + m_j \mathbf{r}_j}{m_i + m_j}.$$

Аналогично вычисляется скорость

$$\mathbf{v} = \frac{m_i \mathbf{v}_i + m_j \mathbf{v}_j}{m_i + m_j}.$$

Надо иметь ввиду, что при слипании частиц гравитационная энергия результирующей частицы не равна сумме гравитационных энергий исходных частиц

$$(E_g)_i = -\frac{\gamma m_i^2}{2R_i}.$$

Задания

1. Напишите программу, моделирующую движение N точек в плоскости, испытывающих притяжение к центральной неподвижной точке, не взаимодействующих между собой и двигающихся по орбитам с первой космической скоростью.
2. Введите гравитационное взаимодействие между частицами. Уберите неподвижную центральную точку. Добавьте отталкивание между частицами при их сближении на расстояние меньше суммы их радиусов. Выведите на экран кинетическую и потенциальную энергии. Сделайте импульс системы равным 0. Добавьте силы трения между частицами.
- 3.* Включите в модель угловые скорости вращения вокруг собственной оси каждой частицы.
4. Смоделируйте трехмерный случай N взаимодействующих частиц с отталкиванием без трения. Выведите на экран проекции движения частиц в плоскостях XU , YU , XZ . Нарисуйте зависимость кинетической, потенциальной и полной энергии от времени.
- 5.* Введите в трехмерном случае слипание частиц после того, как они приблизятся на малое расстояние. При образовании бóльшей частицы должны сохраняться суммарные масса и импульс системы.
6. Введите силы трения. Объясните вид кинетической и потенциальной энергии.
7. Введите частицы двух сортов с разной массой и соответствующим массе радиусом. Добавьте силу трения между частицами. Выведите на экран график энергии, переходящей в тепло. Объясните график полной энергии. Введите частицы с массами, задаваемыми случайным образом, и соответствующими радиусами.

2.7.4. Лирическое отступление. Звезды и люди

Изложение во многом следует статье [50].

Представим себе группу людей в помещении, в котором возникает внезапная опасность (например, начавшееся землетрясение). Каждый будет стремиться поскорее выйти, при этом они будут мешать друг другу. Наверно, каждый мог наблюдать, что, когда много людей слишком стремятся пройти в двери, движение сильно замедляется — возникают пробки, в которых людей могут даже и покалечить.

Попробуем описать эти явления математически.

Во-первых, все хотят выйти в дверь. Немного упростив ситуацию, можно сказать, что есть некоторая желаемая скорость \mathbf{v}_* , которую люди могут набрать за какое-то характерное время τ . Это можно представить так, что на каждого действует сила $\mathbf{F}_i^s = m(\mathbf{v}_* - \mathbf{v}_i)/\tau$, где \mathbf{v}_i — скорость человека с номером i в данный момент. Желаемая скорость \mathbf{v}_* всегда направлена на дверь, поэтому ее величина постоянна, а направление зависит от текущего положения человека.

Во-вторых, между людьми существует сила отталкивания. На расстоянии это психологическое отталкивание, при контакте — физическое. Очевидно, эта сила должна быстро возрастать при уменьшении расстояния, например,

$$\mathbf{F}_{ij}^r = \begin{cases} F_0 \left(\left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^n - 1 \right) \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}}, & \text{при } r_{ij} < r_0, \\ 0, & \text{при } r_{ij} > r_0, \end{cases}$$

где n — достаточно большое число. Здесь $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ — расстояние между людьми i и j . Такая же сила отталкивания действует при приближении к стенам помещения (возможно также в этом случае подставлять вместо r_{ij} удвоенное расстояния до стены — считать, что взаимодействие происходит с «отражением» каждого человека).

В-третьих, при контакте двух человек, если их относительная скорость имеет ненулевую тангенциальную составляющую, возникает сила трения, направленная против скорости и по модулю равная $F_{ij}^f = \mu F_{ij}^r$ (при $r_{ij} < r_*$, r_* — «характерный размер» человека; понятно, что $r_* \leq r_0$).

Объединив все сказанное выше, получаем уравнения движения для каждого человека:

$$m \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \mathbf{F}_i^s + \sum_{j \neq i, r_{ij} \leq r_0} \mathbf{F}_{ij}^r + \sum_{j \neq i, r_{ij} \leq r_*} \mathbf{F}_{ij}^f.$$

Даже с первого взгляда видно, что эти уравнения практически совпадают с уравнениями движения для «частиц» протопланетного облака. Очевидно, что одинаковые уравнения и решаются одинаковым способом.

Однако, люди обладают свойством, которого нет у газопылевых сгустков — они живые, поэтому, если на человека действует слишком большая сила, это может привести к травме, потере сознания и даже смерти.

Задания

1. Напишите программу, описывающую продвижение людей к выходу, без учета силы трения. Как зависит полное время выхода от величины v_* ?
2. Введите силу трения. Она не равна нулю при ненулевой проекции относительной скорости $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$ на перпендикуляр к вектору \mathbf{r}_{ij} , то есть $\mathbf{v}_{ij} \times \mathbf{r}_{ij} \neq 0$. Вектор силы трения получим, умножив ее величину на единичный вектор \mathbf{n} , перпендикулярный \mathbf{r}_{ij} . Он находится из условий $\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}_{ij} = 0$, $|\mathbf{n}| = 1$. Нетрудно показать (проверьте самостоятельно!), что $\mathbf{n} = (-y_{ij}/r_{ij}, x_{ij}/r_{ij})$.
3. Подберите величины коэффициентов F_0, μ и исследуйте зависимость полного времени выхода от v_* . Что происходит, при увеличении v_* ?
4. Добавьте возможность травмирования людей, посмотрите, как это влияет на процесс выхода.

2.8. Колебания цепочек

Все тела состоят из атомов. Каждый атом имеет 3 степени свободы, поэтому система из N атомов будет иметь $3N$ степеней свободы. В кристаллах подавляющее большинство этих степеней свободы — колебательные. Из термодинамики известно, что в состоянии теплового равновесия на каждое колебание приходится энергия kT . Поэтому молярная теплоемкость любого кристалла должна быть $c_V = 3R$ (закон Дюлонга и Пти, который хорошо выполняется при не слишком низких температурах, пока влияние квантовых эффектов невелико).

В этой задаче Вам предлагается исследовать, какие условия необходимы для установления равновесия, как происходит приближение к равновесию, и какие интересные явления возможны в простейшем одномерном случае.

2.8.1. Гармоническая цепочка

Рассмотрим простейшую одномерную модель твердого тела. N точечных частиц массой m соединены между собой пружинками жесткости k . Крайние частицы прикреплены пружинками к неподвижным стенкам. Всего пружинок будет $N+1$, длина каждой из них d . В одномерной модели частицы могут двигаться только вдоль прямой. Если пружинки первоначально не деформированы, то положение равновесия i -ой частицы $x_i = id$. Введем смещения частиц от положений равновесия y_i (считаем $y_i \ll d$). На каждую частицу действуют по две силы со стороны левой и правой пружинок. Растяжение каждой из них определяется разностью координат их концов $y_{i+1} - y_i$. Для единообразия введены условия, что смещения стенок $y_0 = 0$ и $y_{N+1} = 0$. Тогда суммарная сила, действующая на частицу с номером i , равна

$$F_i = k(y_{i+1} - y_i) - k(y_i - y_{i-1}) = k(y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}).$$

Уравнение движения для i -частицы

$$m \frac{d^2 y_i}{dt^2} = k(y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}), \quad i = 1 \dots N. \quad (2.29)$$

Можно записать также полную энергию системы, учитывая скорость частиц, равную $v_i = dy_i/dt$,

$$U = \frac{m}{2} \sum_{i=1}^N \left(\frac{dy_i}{dt} \right)^2 + \frac{k}{2} \sum_{i=1}^{N+1} (y_i - y_{i-1})^2. \quad (2.30)$$

Из физических соображений ясно, что решениями системы (2.29) должны быть стоячие волны

$$y_i = (A \cos(px_i) + B \sin(px_i)) \cos(\omega t). \quad (2.31)$$

В этом выражении ω — частота колебаний стоячей волны, p — ее волновое число. Полученное решение должно удовлетворять граничным условиям

$$y_0 = 0, \quad y_{N+1} = 0.$$

Отсюда следует

$$A = 0, \quad \sin(p(N+1)d) = 0.$$

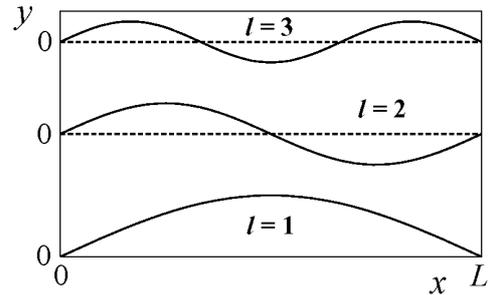


Рис. 2.14. Первые три гармоники

Это может выполняться только при определенных значениях p , называемых *собственными значениями*

$$p_l = \frac{l\pi}{(N+1)d}, \quad l = 1 \dots N. \quad (2.32)$$

Подставив выражение для p_l в уравнение (2.29), после тригонометрических преобразований получаем *дисперсионное соотношение*

$$\omega_l = 2\omega_0 \sin\left(\frac{l\pi}{2(N+1)}\right), \quad l = 1 \dots N, \quad (2.33)$$

где $\omega_0 = \sqrt{k/m}$.

В гармонической цепочке стоячие волны с различными волновыми числами p_l не взаимодействуют (коэффициенты B_l не зависят от времени). Такие волны называют *собственными модами* или *гармониками* системы. В музыке волну с волновым числом p_1 называют *основным тоном*, а прочие — *обертонами*. Как выглядят гармоники, можно увидеть на рис. 2.14.

2.8.2. Ангармоническая цепочка.

Задача Ферми – Паста – Улама

Для реальных пружин линейное выражение для возвращающей силы $F = -kx$ верно только для малых деформаций. При больших сжатиях пружины сила обычно больше, а при больших растяжениях меньше, чем kx . Такую зависимость можно получить, добавив еще одно слагаемое к силе:

$$F = -kx \left(1 - \frac{\alpha x}{d}\right). \quad (2.34)$$

Здесь α — безразмерный коэффициент. В этом случае выражение для энергии будет выглядеть так:

$$U = \frac{m}{2} \sum_{i=1}^N \left(\frac{dy_i}{dt}\right)^2 + \frac{k}{2} \sum_{i=1}^{N+1} (y_i - y_{i-1})^2 - \frac{k\alpha}{3d} \sum_{i=1}^{N+1} (y_i - y_{i-1})^3. \quad (2.35)$$

Такая задача была впервые предложена Э. Ферми, С. Уламом и Д. Паста (FPU) в начале 50-х годов прошлого века для численного решения на только что построенном компьютере MANIAC-I [51]. (На самом деле была рассмотрена более общая задача, в которой энергия одной пружинки выражалась уравнением $U = kx^2/2 + \alpha x^3/3 + \beta x^4/4$.) Ожидалось, что за счет нелинейностей система будет *термализоваться*: если

подождать достаточно долго, то энергия равномерно распределится по собственным модам (2.31). Авторы хотели исследовать, как именно и на каких временных масштабах происходит термализация. Результаты расчетов оказались поразительными — никаких признаков равномерного распределения не наблюдалось! Из первоначально возбужденной первой моды энергия распределялась по небольшому числу других собственных колебаний (в оригинальном расчете FPU с 32 частицами моды с номерами > 5 никогда не получали более 1 % энергии), и через сравнительно короткое время (~ 160 периодов основной моды) система возвращалась в состояние, очень близкое к начальному (такое поведение называется *квазипериодическим*).

Этот неожиданный результат сильно стимулировал изучение нелинейных динамических систем. О некоторых дальнейших исследованиях рассказывается в статье [51], более подробно — в книге [52]. Например, более длительные расчеты показали, что возврат к начальному состоянию был не совсем полным (лишь около 98 % энергии собиралось обратно). К концу следующего «большого периода» дефицит увеличивался, это породило надежду все же достичь термализации, подождав достаточно долго. Однако, через 8 «больших периодов» разница начала уменьшаться, а через 16 произошел практически полный возврат к начальному состоянию. Так было открыто еще одно интересное свойство этой нелинейной системы — *сверхпериодичность*.

Дальнейшие исследования с применением подходов из различных областей математики и механики продолжались около 20 лет и привели ко многим открытиям. Об этом рассказывает книга [52], автор которой считает, что задача FPU положила начало применению численного моделирования в физике.

2.8.3. * Преобразование Фурье

Непрерывное преобразование Фурье

Известно, что любую периодическую функцию можно разложить в *ряд Фурье* (см. [6] и задание 1.1.). Если функция $f(x)$ имеет период L , этот ряд записывается следующим образом:

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{l=1}^{\infty} \left(a_l \cos \left(\frac{2\pi l}{L} x \right) + b_l \sin \left(\frac{2\pi l}{L} x \right) \right). \quad (2.36)$$

Коэффициенты разложения a_l и b_l вычисляются по формулам

$$\begin{aligned} a_l &= \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \cos\left(\frac{2\pi l}{L}x\right) dx, \quad l = 0, \dots, \infty; \\ b_l &= \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \sin\left(\frac{2\pi l}{L}x\right) dx, \quad l = 1, \dots, \infty. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Эти выражения следуют из равенств

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \cos nx \cos mx dx &= \int_0^{2\pi} \sin nx \sin mx dx = 0, \quad n \neq m; \\ \int_0^{2\pi} \cos nx \sin mx dx &= 0, \quad \forall n, m; \\ \int_0^{2\pi} \cos^2 nx dx &= \int_0^{2\pi} \sin^2 nx dx = \pi. \end{aligned}$$

Дискретное преобразование Фурье

В численном эксперименте функция всегда задана в конечном числе точек $x_j = \frac{jL}{N}$, $j = 0, \dots, N - 1$. В этом случае говорят о *дискретном преобразовании Фурье*

$$f_N(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{l=1}^{n-1} \left(a_l \cos\left(\frac{2\pi l}{L}x\right) + b_l \sin\left(\frac{2\pi l}{L}x\right) \right) + \frac{a_n}{2} \cos\left(\frac{2\pi n}{L}x\right). \quad (2.38)$$

Количество членов суммы $n = \text{int}((N + 1)/2)$ ($\text{int}(x)$ — целая часть x). Последнее слагаемое возникает только при четном N [53]. В узловых точках значения $f_N(x_j) = f(x_j)$.

Коэффициенты вычисляются почти так же, как в формуле (2.38):

$$\begin{aligned} a_l &= \frac{2}{N} \sum_{j=0}^{N-1} f(x_j) \cos\left(\frac{2\pi jl}{L}\right), \quad l = 0, \dots, n; \\ b_l &= \frac{2}{N} \sum_{j=0}^{N-1} f(x_j) \sin\left(\frac{2\pi jl}{L}\right), \quad l = 1, \dots, n - 1. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Часто формулы (2.39) называют *прямым преобразованием Фурье*, а формулы (2.38) — *обратным преобразованием Фурье*.

Задания

1. Напишите программу, моделирующую поведение цепочки из N частиц. Можно выбрать параметры $m = 1$, $k = 1$, $d = 1$.

2. Задайте начальные условия в виде гармоник с номером l . Измерьте собственную частоту этой гармоник ω_l . Сравните полученные значения ω_l с теоретическими (2.33).
3. Задайте какие-нибудь начальные условия. С помощью преобразования Фурье координат и скоростей частиц проверьте, что энергия каждой гармоник не меняется — гармоник не взаимодействуют друг с другом. *Подсказка 1:* достаточно считать коэффициенты только при синусах (b_l). *Подсказка 2:* энергии гармоник равны $E_l = b_l^2(u) + \omega_l^2 b_l^2(y)$.
4. Рассмотрите цепочку с чередующимися частицами различных масс m и M . Эта задача разобрана в книге [7] (задача 7.4а).
5. Введите ангармонизм. Задайте начальные условия в виде первой гармоник, выведите графики энергии гармоник от времени.

2.9. Рост дендритов

С *дендритами*⁴ знакомы все, хотя, может, и не все знают это слово. Достаточно посмотреть на снежинки или на морозные узоры на оконном стекле. Не так наглядно, но практически более важно появление дендритов в металлургии — при затвердевании различных металлов и сплавов, при сварке и т. п. Микроструктура образующихся дендритов во многом определяет свойства полученных материалов, поэтому изучение их свойств важно не только для теории, но и для практики.

По внешнему виду и особенностям процесса роста дендриты (рис. 2.15) представляют собой нечто среднее между обычными четко ограниченными кристаллами и фрактальными кластерами, описанными в разделе 2.1. В них сочетается шероховатая на микроуровне поверхность и выраженная структура на больших масштабах, связанная с наличием анизотропии. Хотя дендриты и отличаются от истинных кристаллов тем, что у них нет четко выраженных граней, мы все же будем в дальнейшем употреблять слова «кристалл» и «дендрит» как синонимы.

Возможны как микроскопические модели роста дендритов, подобные модели DLA, описанной в разделе 2.1, так и макроскопические. Мы рассмотрим комбинированную модель, описанную в [55].

⁴Дендрит — от греческого слова *το δένδρον*, обозначающего *дерево*.

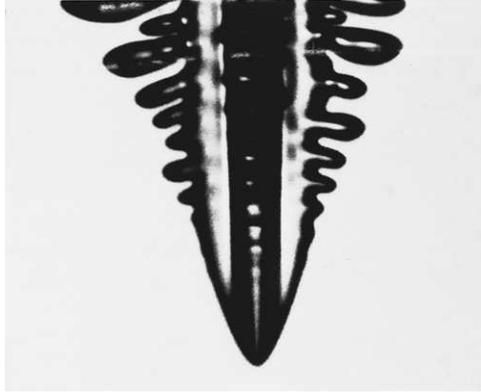


Рис. 2.15. Ксеноновый дендрит
(Fig. 1 из [54])

2.9.1. Основные понятия и уравнения

Рассмотрим образование кристаллической структуры из переохлажденного расплава. Известно, что для роста необходима затравка — небольшая затвердевшая область, на границе которой происходит дальнейшая кристаллизация. Зададим физические свойства вещества: плотность ρ , удельная теплота плавления на единицу массы L , теплоемкость при постоянном давлении c_p (также на единицу массы), коэффициент теплопроводности κ (для простоты будем считать теплопроводность и плотность не зависящими от температуры и одинаковыми для твердой и жидкой фаз — так называемая симметричная модель), температура плавления T_m . Пусть начальная температура расплава $T_\infty < T_m$. Полезно ввести безразмерное переохлаждение $S = c_p(T_m - T_\infty)/L$. В адиабатических условиях при $S \geq 1$ затвердевает весь расплав, при $S < 1$ — только часть, этот случай мы и будем рассматривать.

Ограничимся двумерным случаем. Изменение температуры со временем описывается уравнением теплопроводности, которое более подробно рассмотрено в разделах 2.2 и 2.6:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T \equiv \kappa \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right). \quad (2.40)$$

Найдем теперь скорость движения границы кристаллизации перпендикулярно самой себе, обозначим эту скорость V . За время Δt на участке площади s затвердевает масса вещества, равная $\Delta m = \rho s V \Delta t$. При кристаллизации вещества выделяется теплота $\Delta Q = \Delta m L$. Закон сохранения энергии требует, чтобы все выделившееся тепло было отведено за счет теплопроводности, суммарный поток тепла на границе $\mathbf{q} = -\kappa (\nabla T|_l - \nabla T|_s)$. Значок « ∇ » называется *градиент*, например ∇T — вектор с компонентами $(\partial T/\partial x, \partial T/\partial y)$. Индексы « l » и « s » относятся к жидкой (liquid) и твердой (solid) фазам. Должно выполняться

равенство $qs\Delta t = \Delta Q$, отсюда следует выражение для скорости

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{V} = \frac{\kappa}{\rho L} \mathbf{n} \cdot (\nabla T|_s - \nabla T|_l). \quad (2.41)$$

Это выражение называется *условием Стефана*. Здесь \mathbf{n} – вектор единичной длины, перпендикулярный границе (*вектор нормали*).

Для того, чтобы определить, как будет меняться положение и форма границы затвердевания со временем, необходимо еще задать температуру на границе T_b . Самая простая возможность – принять ее равной температуре плавления, $T_b = T_m$. (При этом внутри твердой области температура также будет постоянной и равной T_m . В этом случае наша проблема называется *задачей Стефана*.)

Простые соображения показывают, что граница затвердевания в этом случае неустойчива. Действительно, рассмотрим первоначально плоскую границу, которая движется с некоторой скоростью. Пусть теперь на ней возникает небольшой выступ. Нарисовав несколько изотерм, легко сообразить, что перед выступом градиент температуры будет больше, то есть выступ начнет расти быстрее. Увеличение выступа приводит к дальнейшему росту градиента температуры перед ним, поэтому выступ должен ускоряться все больше и больше. Этот процесс называется *неустойчивостью Муллинса – Секерки*. Именно такая ситуация наблюдается при диффузионно-ограниченной агрегации (раздел 2.1).

В действительности при затвердевании веществ такого не наблюдается, поэтому существует какой-то механизм, ограничивающий рост выступов (это значит, что температура границы на выступах должна быть ниже температуры плавления). На самом деле таких механизмов по крайней мере два.

Первый из них связан с поверхностным натяжением (поверхностной энергией). Атомы на поверхности имеют меньшее число соседей, находящихся в той же фазе, чем атомы в объеме, поэтому их потенциальная энергия выше. Добавка потенциальной энергии пропорциональна площади поверхности $\Delta E_p = \gamma s$, γ – коэффициент поверхностного натяжения. Рост выступов приводит к увеличению площади поверхности, а значит, является энергетически невыгодным. Можно рассуждать и по-другому (на микроскопическом уровне). На выступах число соседей у атомов меньше, чем во впадинах, поэтому атомам выгоднее заполнять впадины, восстанавливая ровную поверхность. Математически это выражается такой формулой

$$T_b = T_m \left(1 - \frac{\gamma T_m}{\rho L^2 R} \right). \quad (2.42)$$

Здесь R — радиус кривизны в данной точке границы (для плоской поверхности $R = \infty$). Эта формула называется *условием Гиббса – Томсона*. Полезно ввести *капиллярный радиус* $d_0 = \gamma T_m c_p / (\rho L^2)$. Размер образующейся структуры пропорционален d_0 .

Второй механизм замедления роста выступов состоит в том, что присоединение атомов к твердой поверхности не происходит мгновенно, на это надо затратить некоторое время, за которое движущиеся участки границы успевают переохладиться. В простейшем случае влияние этого на температуру границы можно записать так

$$\Delta T_b = -T_m \beta V. \quad (2.43)$$

Величина β называется *кинетическим коэффициентом*.

Введем безразмерную температуру $\tilde{T} = c_p(T - T_\infty)/L$. Тогда уравнение для \tilde{T} будет

$$\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} = \chi \nabla^2 \tilde{T}, \quad (2.44)$$

а начальное условие $\tilde{T} = 0$ везде, кроме затравки. Величина $\chi = \kappa / \rho c_p$ называется *коэффициентом температуропроводности*. При затвердевании всего вещества \tilde{T} повысится на единицу. В дальнейшем для простоты опустим значок « \sim » у переменной \tilde{T} .

2.9.2. Модель роста дендритов

Пусть у нас есть квадратная область размера $N \times N$ узлов, в центре которой задана некоторая затравка (удобно, хотя и не обязательно, взять N нечетным). Естественно, квадратная область выбрана только для примера. Расстояние между узлами по горизонтали и вертикали обозначим h . В дальнейшем удобно считать $h = 1$. Шаг по времени Δt тоже можно задать равным единице.

Рассмотрим вначале уравнение теплопроводности (2.40). Как уже было показано в разделах 2.2 и 2.6, величина $\nabla^2 T$ в узле (i, j) может быть записана как разность среднего значения температуры в соседних узлах $\langle T_{(i,j)} \rangle$ и температуры в самом узле, $\nabla^2 T \approx (\langle T_{(i,j)} \rangle - T_{i,j})/h^2$. Среднее значение можно вычислять по-разному, приведем общую формулу

$$\begin{aligned} \langle T_{(i,j)} \rangle = & (T_{i+1,j} + T_{i-1,j} + T_{i,j+1} + T_{i,j-1} + \\ & + w(T_{i+1,j+1} + T_{i+1,j-1} + T_{i-1,j+1} + T_{i-1,j-1})) / (4 + 4w). \end{aligned}$$

Коэффициент $0 \leq w < 1$ учитывает влияние диагональных соседей. В статье [55] принимается $w = 1/2$, другой разумный выбор $w = 1/4$.

Строго говоря,

$$\nabla^2 T \approx \frac{\langle T_{(i,j)} \rangle - T_{i,j}}{(4 + 4w)(1 + 2w)h^2}.$$

То есть, в первом приближении можно записать новое значение температуры (используя явную разностную схему) $\hat{T}_{i,j} = T_{i,j} + \chi \Delta t \nabla^2 T$. Однако, при этом изменение температуры в узле через один шаг по времени ощутят только соседи. Это может быть правильно для больших скоростей кристаллизации. Обычно все же установление температуры происходит гораздо быстрее, чем рост кристалла. Это можно корректно учесть, если за один шаг процесса роста кристалла Δt выполнять m шагов $\Delta t/m$ расчета температуры $m > 1$. То есть, мы разбиваем шаг по времени Δt на m маленьких шагов длительностью $\Delta t/m$ каждый. Новое значение температуры после каждого такого шага вычисляется как $\hat{T}_{i,j} = T_{i,j} + \chi \Delta t \nabla^2 T/m$. Как было указано в разделе 2.6, такая схема устойчива при $\chi \Delta t/(mh^2) < 1/4$.

Перейдем теперь к росту дендрита. Запишем состояние каждого узла n . Пусть $n = 0$ соответствует жидкой фазе, $n = 1$ – твердой. Промежуточные состояния учитывать не будем. Тогда для затвердевания вещества в узле необходимо, чтобы узел лежал на границе (то есть, имел хотя бы одного соседа с $n = 1$), и температура в нем была ниже локальной температуры плавления (уравнения (2.42) и (2.43)), которая зависит от кривизны границы и скорости ее движения.

Влияние кривизны границы достаточно легко учесть, рассмотрев узлы, соседние с данным. Всего может быть четыре ближайших соседа и четыре диагональных. Разумно считать, что граница плоская ($1/R = 0$ в уравнении (2.42)), когда $n = 1$ у пяти соседей. Можно записать это формально, учитывая, что расстояние по диагонали больше, то есть, эти узлы должны влиять слабее. Получим такое выражение

$$1/R \approx s_{i,j} = \sum_1 n_{i,j} + w_n \sum_2 n_{i,j} - \left(\frac{5}{2} + \frac{5}{2} w_n \right).$$

Здесь первая сумма – по ближайшим соседям, вторая – по диагональным. Коэффициент $0 \leq w_n \leq 1$ учитывает ослабление влияния соседей с ростом расстояния. Авторы работы [55] брали $w_n = 1/2$.

Необходимо еще учитывать тепловой шум, о важности которого говорится также в разделах 2.2 и 2.5. В простейшем случае можно прибавлять к температуре в узле некоторую случайную добавку $\eta_{i,j} \delta$, где $\eta_{i,j}$ – случайное число, равномерно распределенное в интервале $[-1, 1]$, а δ – величина флуктуаций температуры.

Объединим теперь все эффекты в одном выражении. Итак, узел, расположенный на границе, меняет свое состояние с жидкого на твердое, если

$$T \leq \tilde{T}_m (1 + \eta_{i,j} \delta) + \lambda s_{i,j}, \quad (2.45)$$

где T_m — температура плавления, а \tilde{T}_m — безразмерное начальное переохлаждение. Величина λ в этом уравнении играет роль капиллярного радиуса. Знак « \leq » приводит к тому, что температура на границе меньше равновесной, определяемой выражением (2.42), причем разница тем больше, чем больше скорость затвердевания, то есть, кинетическое переохлаждение (2.43) тоже неявно учитывается. Естественно, при затвердевании вещества температура в узле повышается на 1 в наших безразмерных единицах.

Задания

1. Напишите программу, моделирующую теплопроводность. Задайте начальную температуру равной нулю везде, кроме центральной точки и посмотрите, как меняется распределение температуры.
2. Добавьте затвердевание, исследуйте влияние начального переохлаждения S и величины капиллярного радиуса λ на форму образующихся дендритов.
3. Исследуйте зависимость от времени числа частиц в агрегате и его среднеквадратичного радиуса в разных режимах.
4. Определите фрактальную размерность полученных образцов (см. раздел 2.1).
5. Исследуйте, как влияет величина теплового шума δ на вид образующихся агрегатов.

Литература

- [1] Альтшуль Л. М., Мушер С. Л. Применение терминальной вычислительной системы в учебном процессе на физическом факультете Новосибирского университета // В кн.: *Автоматизированные системы управления вузом*. Новосибирск: Изд. Новосибирского университета, 1978.
- [2] Израилев Ф. М., Коткин Г. Л., Фрумин Л. Л., Эйдельман С. И. *Моделирование физических процессов и явлений*. Новосибирск: Изд. Новосибирского университета, 1986.
- [3] Коткин Г. Л., Черкасский В. С. *Численное моделирование физических процессов*. Новосибирск: Изд. Новосибирского университета, 1998.
- [4] Гулд Х., Тобочник Я. *Компьютерное моделирование в физике: В 2-х частях*. М.: Мир, 1990.
- [5] Press W. H., Teukolsky S. A., Vetterling W. T., Flannery B. P. *Numerical Recipes in C. The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 1995. Web-pages: www.nr.com, http://www.ulib.org/webRoot/Books/Numerical_Recipes/, <http://libwww.lanl.gov/numerical/index.html>.
- [6] Фихтенгольц Г. М. *Курс дифференциального и интегрального исчисления, т. 3*. М.: Наука, 1966.
- [7] Коткин Г. Л., Сербо В. Г. *Сборник задач по классической механике*. М.: Наука, 1977.
- [8] Witten T. A. Jr., Sander L. M. Diffusion-limited aggregation, a kinetic critical phenomenon // *Physical Review Letters*. 1981. V. 47, N 19. P. 1400–1403.
- [9] Mandelbrot B. *The Fractal Geometry of Nature*. W. H. Freeman, 1983.

- [10] Федер Е. *Фракталы*. М.: Мир, 1991.
- [11] Niemeyer L., Pietronero L., Wiesmann H. J. Fractal dimension of dielectric breakdown // *Physical Review Letters*. 1984. V. 52, N 12. P. 1033–1036.
- [12] Куперштох А. Л. Флуктуационная модель пробоя жидких диэлектриков // *Письма в ЖТФ*. 1992. Т. 18, № 19. С. 91–96.
- [13] Kupershtokh A. L., Charalambakos V., Agoris D., Karpov D. I. Simulation of breakdown in air using cellular automata with streamer to leader transition // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2001. V. 34, N 6. P. 936–946.
- [14] Biller P. Fractal streamer models with physical time // *Proc. 11th Int. Conf. on Conduction and Breakdown in Dielectric Liquids, IEEE N 93CH3204-5*. Baden-Dättwil, Switzerland, 1993. P. 199–203.
- [15] Karpov D. I., Kupershtokh A. L. Models of streamers growth with physical time and fractal characteristics of streamer structures // *Conference Record of the 1998 IEEE Int. Symp. on Electrical Insulation, Vol. 2*. Arlington, Virginia, 1998. P. 607–610.
- [16] Нагаев Э. Л. Малые металлические частицы // *Успехи физических наук*. 1992. Т. 162, № 9. С. 49–124.
- [17] Берри Р. С. Когда температура плавления не равна температуре замерзания // *В мире науки*. 1990. № 10. С. 46–52.
- [18] Breaux G. A., Benirschke R. C., Kinnear B. S., Jarrold M. F. Hot and solid gallium clusters: too small to melt // *Physical Review Letters*. 2003. V. 91, N 21. P. 215508.
- [19] Chacko S., Joshi K., Kanhere D. G., Blundell S. A. Why do gallium clusters have a higher melting point than the bulk? // *Physical Review Letters*. 2003. V. 92, N 13. P. 135506.
- [20] Tanner G. M., Bhattacharya A., Nayak S. K., Mahanti S. D. Dynamics of melting argon clusters // *Physical Review E*. 1997. V. 55, N 1. P. 322–328.
- [21] Rapaport D. C. *The art of molecular dynamics simulation*. Cambridge University Press, 1995.
- [22] Kadanoff L. On two levels // *Physics Today*. 1986. V. 39. P. 7–9.

- [23] Hardy J., de Pazzis O., Pomeau Y. Molecular dynamics of a classical lattice gas: transport properties and time correlation functions // *Physical Review A*. 1976. V. 13, N 5. P. 1949–1961.
- [24] Frisch U., Hasslacher B., Pomeau Y. Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation // *Physical Review Letters*. 1986. V. 56, N 14. P. 1505–1508.
- [25] Chen S., Lee M., Zhao K. H., Doolen G. D. A lattice gas model with temperature // *Physica D*. 1989. V. 37. P. 42–59.
- [26] McNamara G., Zanetti G. Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata // *Physical Review Letters*. 1988. V. 61, N 20. P. 2332–2335.
- [27] Bhatnagar P., Gross E. P., Krook M. K. A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems // *Physical Review*. 1954. V. 94, N 3. P. 511–525.
- [28] Qian Y. H., d’Humières D., Lallemand P. Lattice BGK models for Navier-Stokes equation // *Europhysics Letters*. 1992. V. 17, N 6. P. 479–484.
- [29] Rothman D. H., Keller J. M. Immiscible Cellular-Automaton Fluids // *Journal of Statistical Physics*. 1988. V. 52, N 3/4. P. 1119–1127.
- [30] Appert C., Zaleski S. Lattice gas with a liquid-gas transition // *Physical Review Letters*. 1990. V. 64, N 1. P. 1–4.
- [31] Куперштох А. Л. Учет действия объемных сил в решеточных уравнениях Больцмана // *Вестник НГУ. Сер. Математика, механика и информатика*. 2004. Т. 4, № 2. С. 75–96.
- [32] Shan X., Chen H. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components // *Physical Review E*. 1993. V. 47, N 3. P. 1815–1819.
- [33] Zhang R., Chen H. Lattice Boltzmann method for simulations of liquid-vapor thermal flows // *Physical Review E*. 2003. V. 67, N 6. P. 066711.
- [34] Куперштох А. Л. Моделирование течений с границами раздела жидкость-пар методом решеточных уравнениях Больцмана // *Вестник НГУ. Сер. Математика, механика и информатика*. 2005. Т. 5, № 3. С. 29–42.

- [35] Kapral R., Lawniszak A., Masiar P. Reactive dynamics in a multispecies lattice-gas automaton // *Journal of Chemical Physics*. 1992. V. 96, N 4. P. 2762–2776.
- [36] Полищук В. Р. *Мастеровые науки*. М.: Наука, 1989.
- [37] Ponce Dawson S., Chen S., Doolen G. D. Lattice Boltzmann computations for reaction-diffusion equations // *Journal of Chemical Physics*. 1993. V. 98, N 2. P. 1514–1523.
- [38] Пригожин И., Стенгерс И. *Порядок из хаоса. Новый диалог человека с природой*. М.: Эдиториал УРСС, 2000.
- [39] Chen S., Doolen G. Lattice Boltzmann method for fluid flows // *Annual Review of Fluid Mechanics*. 1998. V. 30. P. 329–364.
- [40] Aidun C. K., Clausen J. R. Lattice-Boltzmann method for complex flows // *Annu. Rev. Fluid Mech.* 2010. V. 42. P. 439–472.
- [41] Зельдович Я. Б., Баренблат Г. И. *Математическая теория горения и взрыва*. М.: Наука, 1990.
- [42] Борисова О. А., Лидский Б. В. Устойчивость горения безгазовых систем по отношению к двумерным возмущениям // *Химическая физика*. 1986. Т. 5, № 6. С. 822–830.
- [43] Максимов Ю. М., Мержанов А. Г. Режимы неустойчивого горения безгазовых систем // *Физика горения и взрыва*. 1979. Т. 5, № 6. С. 51–58.
- [44] Рихтмайер Р., Мортон К. *Разностные методы решения краевых задач*. М.: Мир, 1972.
- [45] Калиткин Н. Н. *Численные методы*. М.: Наука, 1978.
- [46] Гуревич Л. Э., Чернин А. Д. *Происхождение галактик и звезд, 2-е изд.* М.: Наука, 1987.
- [47] Азимов А. *Взрывающиеся солнца. Тайны сверхновых*. М.: Наука, 1991.
- [48] Хокни Р., Иствуд Дж. *Численное моделирование методом частиц*. М.: Мир, 1987.
- [49] Greengard L. The numerical solution of the N-body problem // *Computers in Physics*. 1990. V. 4, N 2. P. 142–152.

- [50] Helbing D., Farkas I., Vicsek T. Simulating dynamical features of escape panic // *Nature*. 2000. V. 407. P. 487–490.
- [51] Ford J. The Fermi–Pasta–Ulam problem: paradox turns discovery // *Physics Reports*. 1992. V. 213, N 5. P. 271–310.
- [52] Weissert T. P. *The genesis of simulation in dynamics: pursuing the Fermi–Pasta–Ulam problem*. Springer, 1997.
- [53] Бронштейн И. Н., Семендяев К. А. *Справочник по математике для инженеров и учащихся ВТУЗов*. М.: Наука, 1986.
- [54] Bisang U, Bilgram J. H. Shape of the tip and the formation of sidebranches of xenon dendrites // *Physical Review E*. 1996. V. 54, N 5. P. 5309–5326.
- [55] Liu F., Goldenfeld N. Generic features of late-stage crystal growth // *Physical Review A*. 1990. V. 42, N 2. P. 895–903.

Медведев Дмитрий Александрович,
Куперштох Александр Леонидович,
Прууэл Эдуард Рейнович,
Сатонкина Наталья Петровна,
Карпов Денис Иванович

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ
ПРОЦЕССОВ И ЯВЛЕНИЙ НА ПК**

Учебное пособие

Технический редактор Т. В. Иванова

Верстка А. Л. Куперштох

Подписано к печати 23.11.2010
Заказ №

Формат 60x84/16
Усл.печ.л. 5,81
Уч.-изд. л. 6,97
Тираж 150 экз.

Редакционно-издательский центр НГУ
630090 Новосибирск, ул. Пирогова, 2