

# ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ РАСЧЕТА СЕТЕВЫХ ПАРАМЕТРОВ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ФИЗИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Федорчук Иван Иванович

Винницкий государственный педагогический университет имени Михаила Коцюбинского

В научном исследовании большую роль играют математические модели, которые с помощью уравнений превращают физическое явление в дискретную алгебраическую форму, подвергающуюся числовому анализу. Дискретные алгебраические уравнения описывают вычислительную модель. Воплощение последней в машинные команды является программой для ЭВМ. Компьютер и программа разрешают исследовать эволюцию моделированной физической системы в вычислительных экспериментах.

Наиболее привлекательным, на наш взгляд, есть использование метода моделирования с применением частиц, который дает возможность проследить эволюцию системы. Кроме этого, данный метод исключает вероятностные погрешности, которые, по обыкновению, присутствуют при реализации математической модели с использованием метода Монте-Карло на ЭВМ.

**Нерешенные вопросы проблемы.** При построении математических моделей, в основе которых лежит метод частиц, в частности, метод частица-сетка (PM) или частица-частица-сетка (P<sup>3</sup>M), важным есть расчет сетевой плотности заряда и сетевых сил (PM-сил) или потенциалов. Это связано с тем, что в этих методах используется формализм короткодействующей силы и уравнений поля для потенциала (уравнения Пуассона).

В связи с этим **целью нашей работы** есть выяснение возможных методов нахождения неизвестных величин и выяснение условий, при которых становится возможным использование предложенных методов моделирования и расчета сетевых параметров физической системы.

**Изложение основного материала исследования.** Преобразование Фурье, или разложение в ряды Фурье владеет четырьмя характерными свойствами, которые делают его особо ценным при моделировании физических систем методом частиц и исследовании методов вычисления PM-силы. В частности, теорема о свертке, теорема об аналитическом представлении сигнала, компактность представления спектров кусковополиномиальных функций и связь прямого и обратного преобразований разрешают провести волновое и кинетическое рассмотрение физической системы. Инициаторами применений спектральных методов к PM-моделей выступили С.Бердсол [1, 9] и А.Ленгдон [7, 8] - создатели современной теоретической основы для моделирования систем без столкновений. Осознание того, что дает спектральное средство, привело к усовершенствованию разработок моделей без столкновений [3, 4] и разрешило создать целиком жизнеспособный алгоритм P<sup>3</sup>M для моделирования плазмы [5, 6].

Вместе с этим, использование метода частиц открывает новые возможности в материаловедении и физике твердых тел. При этом, как и раньше, остается проблема расчета сетевых параметров смоделированной системы. В большинстве случаев, учитывая необходимую и достаточную точность расчетов, силу взаимодействия между частицами раскладывают на сетевую  $\mathbf{F}_i$  и короткодействующую  $\mathbf{F}_{ij}^{SR}$  (парного взаимодействия). В таком случае этапы вычисления PM-силы суммарно выражаются такими уравнениями:

Распределение заряда

$$\rho(\mathbf{x}_p) = \frac{q}{V_c} \sum_{i=1}^{N_p} W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_p) . \quad (1)$$

Нахождение потенциала

$$\varphi(\mathbf{x}_p) = V_c \sum_p G(\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_{p'}) \rho(\mathbf{x}_{p'}). \quad (2)$$

Вычисление сил

$$E(\mathbf{x}_p) = -D\varphi(\mathbf{x}_p). \quad (3)$$

$$F(\mathbf{x}_i) = q \sum_p W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_p) E(\mathbf{x}_p), \quad (4)$$

$$\text{или } F(\mathbf{x}_i) = -q \sum_p \nabla W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_p) \varphi(\mathbf{x}_p), \quad (5)$$

где  $\rho(\mathbf{x}_p)$  – функция плотности заряда,  $W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_p)$  – функция распределения заряда,  $D$  – оператор дифференцирования потенциала,  $G$  – функция Грина. В уравнении (2) функцию Грина  $G$  можно определить так, чтобы она вобрала в себя операторы "обострения", которые можно включить в расчетный цикл. При выводе преобразований Фурье уравнений (1) – (5) сначала рассмотрим одноизмеримые бесконечные системы с шагом сетки  $H$ ; обобщение на более высокие размерности проводится заменой скаляров векторами и переопределением, где это необходимо, нормировочных коэффициентов.

### 1. Распределение заряда

Если плотность центров частиц одноизмеримой бесконечной системы определить в виде  $n(x) = \sum_{i=1}^{N_p} \delta(x - x_i)$ , где  $x_i$  – положение  $i$ -ой частицы, и если (что всегда имеет место для рассматриваемых случаев)  $W$  – парная функция, то распределение заряда (1) описывается формулой

$$\rho(x_p) = \frac{q}{H} \int n(x') W(x_p - x') dx' \quad (6).$$

Выражение (6) для сетевых значений плотности заряда является сверткой плотности частиц с функцией распределения заряда, т.е.

**Распределение заряда  $\equiv$  Свертка + Дискретизация.**

Непрерывную функцию плотности заряда  $\rho$ , значение которой при  $x = x_p$  дает сетевую плотность, найдем, используя теорему о свертке:  $\rho' \supset \hat{\rho}'(k) = \frac{q}{H} \hat{n}(k) \hat{W}(k)$ .

Учитывая, что  $\rho'(x_p) = \rho(x_p)$ , мы получим

$$\rho(x_p) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \hat{\rho}'(k) e^{ikx_p}. \quad (7)$$

Разбивая область интегрирования в (7) на промежутки, равные длине периода в  $k$ -просторные,  $\mathbf{k}_g = 2\pi/H$  и осуществляя замену переменных ( $k \rightarrow k + nk_g$ ,  $n$  – целое) для сведения всех интегралов к одному интервалу интегрирования длиной  $k_g$ , получим

$$\rho(x_p) = \int_{k_g} \frac{dk'}{2\pi} \sum_{-\infty}^{\infty} \hat{\rho}'(k') e^{ik'x_p}, \quad (8)$$

или с учетом обратного преобразования

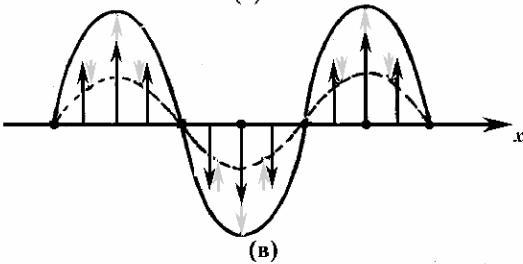
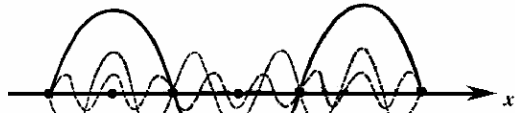
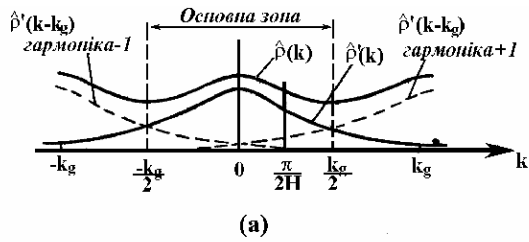


Рис.1. (а) Фурье-образ  $\hat{\rho}$  дискретного набора значений плотности заряда на сетке с шагом  $H$  равняется сумме частей копий образа  $\hat{\rho}'$  непрерывного распределения плотности, смещенных на интервал  $k_g = 2\pi/H$ . (б) При определенной длине волны в гармонику  $\hat{\rho}$  делают вклад основная величина  $\hat{\rho}'$  и связанные с ней сеточные гармоники. (в) В зависимости от соотношения фаз основной и сеточной гармоник амплитуда гармоники может восприниматься либо как очень завышенной, либо как очень заниженной

осуществляют взнос в гармонику  $\hat{\rho}$  с волновым числом, которое равняется волновому числу основных гармоник  $\hat{\rho}'$ , т.е. при вычислении на сетке те гармоники плотности заряда, волновые числа которых лежат вне основной зоны  $|k| \leq \pi/H$ , маскируются под гармоники с волновыми числами из основной зоны, накладываясь на них. В примере, проиллюстрированному на рис.1(б), в результате наложения сетевых гармоник амплитуда гармоники  $\hat{\rho}(\pi/2H)$  получается слишком большой.

Выводы, которые можно сделать на примере одной гармоники, изображенной на рис.1, а именно, что распределение заряда ведет к потере информации, носят общий характер. В  $k$ -пространстве эта потеря информации проявляется в виде несуществующих спектральных компонент – нефизического взаимодействия гармоник, а в  $x$ -пространстве – как потеря инвариантности по отношению к смещению. На рис.1(в) потеря инвариантности относительно смещений выглядит как флуктуация значений сетевой плотности заряда. В результате этого возникают флуктуации силы взаимодействия частичек. Сетевые эффекты, как бы их не описывать - через взаимодействие гармоник или как флуктуации, могут только

$$\hat{\rho}(k) = \frac{q}{H} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{n}'(k - nk_g) \hat{W}(k - nk_g). \quad (9)$$

Если бы вследствие наложения всегда получались гармоники с весьма завышенной амплитудой, то можно было бы ввести в расчет корректирующие множители и компенсировать погрешность. Тем не менее, это не всегда возможно, так как гармоники могут иметь различные знаки, и суммарное значение может быть как завышенным, так и заниженным.

На рис.1(а) изображена графическая интерпретация действительной части выражения (9). Фурье-Образ  $\hat{\rho}$  набора сетевых значений получается добавлением взносов от копий образа  $\hat{\rho}'$  непрерывной функции плотности, при этом копии, смещенные одна относительно одной на длину, кратную  $k_g (= 2\pi/H)$ . Аналогичная графическая интерпретация справедлива и для мнимой части выражения (9) с тем единым отличием, что мнимые части  $\hat{\rho}$  и  $\hat{\rho}'$  являются непарными функциями от  $k$ , поскольку (действительное)  $\supset$ (ермитовое).

Очевидно, что сетка никак не может отделить основную гармонику от сетевых. Иначе говоря, основная гармоника и связанные с ней сетевые гармоники

пагубно повлиять на качество физики модели частиц, и потому их нужно по возможности уменьшать, не выходя за границы установленных вычислительных затрат.

## 2. Нахождение потенциала

В случае одноизмеримой бесконечной системы уравнение (2) будет иметь вид

$$\varphi(x_p) = H \sum_{p'=-\infty}^{\infty} G(x_p - x_{p'}) \rho(x_{p'}). \quad (10)$$

Учитывая теорему о свертках и их преобразовании, видим, что это выражение представляет свертку для системы, которая дискретная в  $x$ -пространстве и периодическая в  $k$ -пространстве.

$$\varphi(x_p) \supset \widehat{\varphi}(k) = \widehat{G}(k) \widehat{\rho}(k), \quad (11)$$

где периодичность означает, что для целых  $n$

$$\widehat{\varphi}(k + nk_g) = \widehat{\varphi}(k). \quad (12)$$

Свертку двух последовательностей в данном случае (10) можно представить в виде интеграла типа свертки, построив непрерывные функции  $\varphi'$  и  $G'$  для потенциала и функции Грина. Ясно, что существует бесконечное количество непрерывных функций  $\varphi'$  и  $G'$ , которые можно было бы избрать, и в то же время есть только один вариант, который не вносит вредной информации. Этим частичным вариантом есть как раз тот, где наборы величин  $\{\varphi(x_p)\}$  и  $\{G(x_p)\}$  получаются путем дискретизации  $\varphi'$  и  $G'$  с критическим шагом, т.е.

$$G'(x) \supset \widehat{G}'(k) = \Pi\left(\frac{k}{k_g}\right) \widehat{G}(k) \Rightarrow G'(x) = \sum \sin c\left(\frac{x-x_p}{H}\right) G(x_p), \quad (13)$$

и аналогично для  $\varphi'$ . Переписывая уравнение (10) через  $\varphi'$  и  $G'$ , используя соотношение

$\rho^+(x) = \mathbf{M}\left(\frac{x}{H}\right) \rho'(x)$ , которое содержит бесконечную гребенку импульсных функций с

интервалом  $H$ , амплитуды которых дают значение сетевой плотности заряда, чтобы представить плотность заряда как функцию непрерывного аргумента  $x'$ , получим

$\varphi'(x) = \int dx' G'(x-x') \rho^+(x')$ , что при переходе к Фурье-образу дает

$$\varphi'(x) \supset \widehat{\varphi}'(k) = \widehat{G}'(k) \widehat{\rho}^+(k) = \Pi\left(\frac{k}{k_g}\right) \widehat{\varphi}(k). \quad (14)$$

Выражение (14) для потенциала имеет тот же вид, что и интегральная форма записи уравнения Пуассона через функцию Грина для физической системы. В непрерывной системе

функция Грина  $g$  удовлетворяет уравнение  $\nabla^2 g = -\frac{\delta(x)}{\varepsilon_0}$ , т.е.  $\widehat{g}(k) = \frac{1}{\varepsilon_0 k^2}$ , где в

двухмерном и трехмерном случаях  $k^2 = k \cdot k$ . Если в качестве  $\varphi'(x)$  взять лучше всего приближение к точному потенциалу

$$\Phi(x) = \int dx' g(x-x') \rho^+(x'), \quad (15)$$

то найдем, что

$$\widehat{G}'(k) = \Pi\left(\frac{k}{k_g}\right) \widehat{g}(k) , \quad (16)$$

а в соответствующем двумерном случае получим:

$$\widehat{G}'(k_1, k_2) = \Pi\left(\frac{k_1}{k_g}\right) \Pi\left(\frac{k_2}{k_g}\right) \frac{(H/2)^2}{\sin^2\left(\frac{k_1 H}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{k_2 H}{2}\right)} . \quad (17)$$

Сравнивая выражения (16) и (17), видим, что для конечно-разностной аппроксимации коротковолновые гармоники потенциала получаются намного большими, чем для наилучшей среднеквадратичной аппроксимации, т.е. погрешности дискретизации и погрешности распределения заряда действуют в противоположном направлении: погрешности, связанные с распределением заряда, ослабляют коротковолновые компоненты, тогда, как погрешности дискретизации их усиливают. Итак, если к распределенному на сетку заряду применяется оператор обострения и при этом не учитывается влияние погрешностей аппроксимации в уравнении для поля на восстановление начальной формы частички, то в результате можно прийти к тому, что аппроксимация получится худшей сравнительно со случаем, когда не было никаких попыток коррекции.

### Выводы

При рассмотрении чрезвычайно больших физических систем с точки зрения математики на количество дифференциальных уравнений, которые потом аппроксимируются с помощью линейных конечноразностных, наиболее привлекательным для нас может быть выбор спектрального метода нахождения сетевых параметров взаимодействия. Использование этого метода делает возможным быстрое нахождение необходимых величин, введение корреляционных коэффициентов или функций для уменьшения погрешностей аппроксимации, самодействия, дискретизации и т.д. для получения результатов моделирования в области достоверности. Однако, при определенных условиях, конечный результат при введении соответствующих операторов обострения может быть худшим, чем при их отсутствии. Это объясняется тем, что на определенном этапе расчета мы не учли погрешностей аппроксимации, которые могли иметь противоположный знак.

Кроме этого, предложенный метод расчета владеет большой стойкостью к изменению параметров и разрешает вносить коррективы на определенных этапах расчета или дополнительные силовые поля в смоделированную систему. Это свойство делает его незаменимым инструментом при моделировании твердых тел и их свойств с учетом внешних тепловых и силовых факторов.

### Литература

1. Бэрдсол Ч., Легтдон А., Окуда Х. Физика системы частиц конечных размеров и ее применение к моделированию плазмы.- В кн. Вычислительные методы в физике плазмы. под ред. Б. Олдера, С.Фернбаха и М. Ротснберга. - М. Мир, 1974, с. 242
2. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики.-М.: Наука, 1980. 432с.
3. Eastwood, J. W. Optimal Particle Mesh Algorithms, J. Comput. Phys., 1975, vol. 18, pp. 1-20
4. Eastwood, J. W. Value for Money in Particle-Mesh Plasma Simulations, in "Computational Methods in Classical and Quantum Physics" ed. M. B. Hooper, Advance Publications Ltd., London, 1976, pp. 196- 205.
5. Eastwood, J. W., Hockney R. W. Shaping the Force Law in Two- Dimensional Particle Mesh Models, J. Comput. Phys., 1974, vol. 16. pp. 342-359.
6. Eastttood J W., Roberts K. V. The Authentication of Computer Programs, Computer Phys. Commun., to be submitted, 1979.