

## Дискретно-событийное моделирование процесса 2D-кристаллизации

*Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского «ХАИ»*

### Введение

Основные физические свойства твердого тела определяются свойствами атомов веществ, из которых оно состоит [1]. Сопоставим с каждым атомом, имеющим номер  $k$ , вектор  $\vec{X}_k$ , компонентами которого являются вектор координат центра  $\vec{x}_k$  и вектор скорости  $\vec{v}_k$ . Совместное поведение  $n$  атомов может быть смоделировано в виде системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\dot{\vec{X}}_k = \vec{F}_k(\vec{X}_1, \vec{X}_2, \dots, \vec{X}_n). \quad (1)$$

Количество уравнений, входящих в систему, очень велико. Тем не менее, с развитием вычислительной техники постоянно делаются попытки составления и решения таких систем уравнений. Чем точнее описывается взаимодействие атомов, тем меньше возможностей для численного решения.

В данной работе рассмотрена модель атома, несколько более сложная, чем модель твердых сфер [2]. Парное взаимодействие задается следующим образом:

- если расстояние  $\rho_{ij} = |\vec{x}_j - \vec{x}_i|$  между центрами модельных частиц с номерами  $i$  и  $j$  превышает величину  $D_{\text{внешн}}$ , то частицы перемещаются свободно;
- если выполняется неравенство  $D_{\text{внутр}} < \rho_{ij} < D_{\text{внешн}}$ , то потенциальная составляющая  $U$  полной энергии движения обеих частиц является постоянной отрицательной величиной; полная энергия двух частиц, суммарный импульс и суммарный момент импульса неизменны;
- при выполнении равенства  $\rho_{ij} = D_{\text{внутр}}$  происходит упругое отражение частиц друг от друга.

Таким образом, каждую из частиц моделируют в виде двух концентрических сфер. Внутренние сферы радиусами  $R_{0i}$  и  $R_{0j}$  (причем  $R_{0i} + R_{0j} = D_{\text{внутр}}$ ) абсолютно упруги; если расстояние между частицами превышает сумму радиусов внешних сфер  $R_{1i}$  и  $R_{1j}$ , равную  $D_{\text{внешн}}$ , то частицы не взаимодействуют. Взаимодействие задается потенциалом  $U(\rho)$  с бесконечно большой положительной центральной частью при выполнении неравенства  $\rho \leq D_{\text{внутр}}$  и прямоугольной ямой глубины  $|U|$  на интервале  $(D_{\text{внутр}}, D_{\text{внешн}})$ . Если  $\rho > D_{\text{внешн}}$ , потенциал взаимодействия равен нулю. Существенно то, что в моменты времени, когда не выполняется ни одно из равенств  $\rho_{ij} = D_{\text{внешн}}$ ,  $\rho_{ij} = D_{\text{внутр}}$ , система уравнений (1) принимает следующий вид:

$$\dot{\vec{x}}_k = \vec{v}_k = \text{const}, \quad \dot{\vec{v}}_k = 0. \quad (2)$$

Значит, между этими моментами времени каждая из частиц перемещается прямолинейно с постоянной скоростью.

## Формулирование проблематики

Математическое моделирование является эффективным, если найден метод для установления координат центров и скоростей всех модельных частиц в произвольный момент времени. Для этого должна быть численно решена система уравнений (1) с учетом соотношений (2). Стандартные методы численного решения, приведенные, например, в работах [1 – 4], совершенно неприменимы, поскольку правые части уравнений системы содержат дельта-функции, зависящие от расстояний  $\rho_{ij}$ . Дискретно-временные алгоритмы [5, 6] неоптимальны. К

настоящему времени развит аппарат дискретно-событийного программирования в применении к задачам физики [7 – 10]. В его основе лежат следующие постулаты:

- основным понятием является «событие»; каждому событию соответствует значение ведущего параметра  $t$ , который обычно называется временем;
- события рассматриваются в порядке возрастания соответствующих моментов времени;
- после реализации ближайшего по времени события возникает некоторое множество новых событий, которые могут произойти в будущем; для каждого из них необходимо вычислить соответствующее значение параметра  $t$  и поставить в очередь.

При рассмотрении модели вещества, задаваемой системой уравнений (1) и соотношениями (2), возникают следующие задачи:

- установить структуру событий для данной конкретной модели;
- установить степень адекватности предложенной модели реальному поведению совокупности атомов (молекул) реального вещества;
- оценить влияние параметров отдельной модельной частицы на поведение их совокупности в целом.

## Решение поставленных задач

Предлагается воспользоваться расчетной схемой, рассмотренной в [7 – 9]. Она является оптимальной по затратам времени расчетов на ЭВМ; установлена ее эффективность в применении к изучению одноатомного газа [9, 10]. Очередность наступления событий строят на базе хипа [8, 9, 11]. Систему модельных частиц (или агентов) в целом разбивают на подсистемы, так что для каждого из агентов, участвующих в событиях, требуется последовательно рассмотреть агенты только в его подсистеме и соседних с ней подсистемах. Вводят новый тип событий, связанных с переходом из одной подсистемы в другую. В качестве подсистем рассматривают подмножества агентов, находящихся в ячейках квадратной сетки, нанесенной на рабочую область.

Существенным элементом рассматриваемого алгоритма является то, что перемещаются только те из агентов, которые участвуют в событии. Это означает, что на каждом шаге вычисления, связанные с перемещением, относятся только к одному – двум агентам, а не ко всем.

Каждый агент рассматривают как структуру, полями которой являются неизменные физические свойства (радиусы  $R_0, R_1$ , масса  $m$ ), координаты  $x, y$  центра агента, координаты вектора скорости  $v_x$  и  $v_y$ , локальное время  $t_{loc}$ , момент времени  $t$  наступления ближайшего события, тип ближайшего события  $event$ , номер объекта  $next$ , с которым должно произойти ближайшее по времени событие,

мультииндекс [i,j] ячейки, в которой находится агент и, возможно, иные поля, связанные со спецификой задачи.

Следует подчеркнуть, что не используют априорные вероятностные распределения. Таким образом, данная расчетная схема является строго детерминистической в отличие от широко распространенных вариантов метода частиц, основывающихся на методе Монте-Карло [2, 5, 6].

События, характерные для рассматриваемой задачи, можно перенумеровать следующим образом:

- «0» – внешнее столкновение модельных частиц;
- «1» – столкновение внешних оболочек частиц изнутри;
- «2» – упругое столкновение внутренних частей;
- «3» – упругое столкновение частицы с отражающей стенкой;
- «11» – пересечение центром модельной частицы границы подобласти.

Отметим, что в модели твердых сфер события «0» и «1» отсутствуют, поскольку в наличии имеется только одна (внутренняя) граница.

Моменты наступления указанных событий сводятся к простому решению линейных и квадратных уравнений [9].

Скорости частиц, участвующих в событии, изменяются. Рассмотрим две частицы с номерами 1 и 2. Предположим, что они участвуют в событии «2». Учет сохранения суммарных энергии, импульса и момента импульса при упругом отражении приводит к следующим формулам, позволяющим вычислить скорости  $\vec{v}'_1, \vec{v}'_2$  после столкновения:

$$\vec{v}'_1 = \vec{v}_1 + \frac{\lambda_2}{m_1} \cdot \vec{\mu}, \quad \vec{v}'_2 = \vec{v}_2 - \frac{\lambda_2}{m_2} \cdot \vec{\mu}, \quad (3)$$

где  $\lambda_2 = 2 \cdot M \cdot (\Delta\vec{v}, \vec{\mu})$ ,  $M = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}$ ,  $\Delta\vec{v} = \vec{v}_2 - \vec{v}_1$ ,  $\vec{\mu} = \frac{\Delta\vec{r}}{|\Delta\vec{r}|}$ ,  $\Delta\vec{r} = \vec{x}_2 - \vec{x}_1$ .

В формулах пересчета скоростей при наступлении событий «0» и «1» должно быть учтено изменение величины потенциальной энергии. Введем в рассмотрение следующую величину:

$$\Delta_{\pm} = (\Delta\vec{v}, \vec{\mu})^2 \pm 2 \cdot \frac{U}{M}.$$

При внешнем столкновении скорости изменяются согласно формулам

$$\vec{v}'_1 = \vec{v}_1 + \frac{\lambda_0}{m_1} \cdot \vec{\mu}, \quad \vec{v}'_2 = \vec{v}_2 - \frac{\lambda_0}{m_2} \cdot \vec{\mu}, \quad (4)$$

где  $\lambda_0 = M \cdot \left\{ (\Delta\vec{v}, \vec{\mu}) + \sqrt{\Delta_-} \right\}$ .

Рассмотрим реакцию на событие «1». Если выражение  $\Delta_+$  неотрицательно, то в результате столкновения внешних границ модельные частицы покидают зону притяжения и разлетаются со следующими новыми скоростями:

$$\vec{v}'_1 = \vec{v}_1 + \frac{\lambda_1}{m_1} \cdot \vec{\mu}, \quad \vec{v}'_2 = \vec{v}_2 - \frac{\lambda_1}{m_2} \cdot \vec{\mu}, \quad (5)$$

где  $\lambda_1 = M \cdot \left\{ (\Delta\vec{v}, \vec{\mu}) - \sqrt{\Delta_+} \right\}$ .

Если же кинетической энергии частиц недостаточно для преодоления потенциального барьера, т.е.  $\Delta_+ < 0$ , то происходит обычное упругое отражение и формулы для пересчета скоростей совпадают с формулами (3).

Рассмотрим реакцию агента на событие, связанное с пересечением проникаемой границы. При этом из списка агентов, принадлежащих ячейке с мультииндексом  $[i, j]$ , в которой находился агент до столкновения, вычеркивается номер данного агента. После нахождения мультииндекса ячейки, в которую переходит агент, список агентов этой ячейки должен быть дополнен номером данного агента. При наличии векторного поля к вектору скорости при переходе границы добавляются вектор поля в данной точке.

### Результаты расчетов

При использовании рассматриваемой схемы количество модельных частиц, для которого время расчетов на обычном персональном компьютере можно считать разумным, не превышает 10...20 тысяч. Это значительно меньше, чем при использовании модели твердых сфер ( $10^5 \dots 10^6$ ), что связано с более сложной структурой модельных частиц. Для иллюстрации приведены примеры расчетов, в которых количество частиц имеет порядок нескольких сотен.

Пусть всем  $n$  модельным частицам приписывают одинаковые параметры  $R_0$ ,  $R_1$ ,  $U$ ,  $m$ , причем  $U = -1$ ,  $m = 1$ . Каждый вариант численного эксперимента характеризуется начальной величиной суммарной кинетической энергии  $Q_0$ , зависящей от тепловой скорости  $v_{\text{тепл}}$ :

$$Q_0 = 0.5 \cdot \sum_{k=1}^n (\bar{v}_k(0))^2 = 0.5 \cdot n \cdot v_{\text{тепл}}^2. \quad (6)$$

Использование рассматриваемой математической модели вещества допускает проведение как адиабатических, так и изотермических процессов. Поддержание постоянной температуры осуществляется регулярным исправлением скоростей модельных частиц так, чтобы суммарная кинетическая энергия

$Q(t) = 0.5 \cdot \sum_{k=1}^n (\bar{v}_k(t))^2$  оставалась постоянной:

$$\bar{v}'_k(t) = \sqrt{\frac{Q_0}{Q(t)}} \cdot \bar{v}_k(t), \quad k=1 \dots n. \quad (7)$$

Если тепловая скорость  $v_{\text{тепл}}$  гораздо больше единицы, то влияние потенциальных ям незначительно, модельные частицы ведут себя как совокупность твердых сфер и давление обратно пропорционально объему рабочей области. При понижении тепловой скорости возникают и испаряются очаги конденсации, причем давление остается приблизительно постоянным вне зависимости от объема рабочей области. Таким образом, воспроизводится поведение газа Ван-дер-Ваальса (рис.1). Наконец, при тепловой скорости, имеющей порядок единицы, очаги конденсации с течением времени сливаются в компактную совокупность модельных частиц. Для каждой из них в любой текущий момент времени можно подсчитать количество соседних частиц, удаленных от нее на расстояние, не превышающее  $2R_1$ . Общую совокупность модельных частиц можно разбить на классы, собрав в класс 0 те из них, которые не имеют соседей, в класс 1 – имеющих двух соседей и т.д. Характеристикой фазового состояния моделируемого вещества является набор величин  $n_0, n_1, \dots$ , каждая из которых равна отношению количества частиц, входящих в соответствующий класс, к общему их количеству  $n$ . Одним из методов оценки адекватности рассматриваемой модели является проверка равенства среднеквадратических скоростей частиц, входящих в каждый класс, и скорости

$v_{\text{тепл}}$ . Кроме того, такое представление вещества в целом позволяет достаточно просто оценить внутреннюю энергию в каждом из классов, а значит, и во всем объеме.

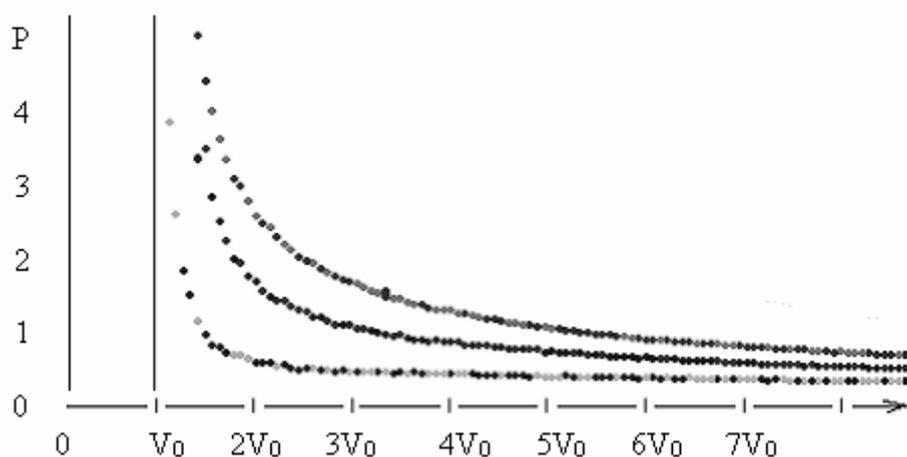


Рис. 1. Изотермы при  $V_{\text{тепл}} = 0.8, 0.9$  и  $1$ ;  
 $V_0$  – объем полностью сконденсированного вещества

При дальнейшем понижении тепловой скорости наблюдаются фазовые переходы, заключающиеся в изменении степени близости порядка. Состояние, близкое к жидкому, наблюдается при соблюдении ближнего порядка и нарушении дальнего. При некотором значении тепловой скорости, зависящем от отношения ширины потенциальной ямы к ширине центральной части, т.е. от величины  $\delta = \frac{R_1 - R_0}{R_0}$ , начинается процесс кристаллизации, характеризующийся возникновением дальнего порядка.

Рассматриваемая модель двумерной кристаллизации очень проста, и поэтому разнообразие форм ячеек кристаллов невелико. В том случае, если  $\delta < 0.5$  или  $\delta > 1$ , основная ячейка возникающих плоских кристаллов является правильным треугольником, что соответствует плотной упаковке кругов. Числа  $n_m$  при выполнении условия  $\delta < 0.5$  отличны от нуля, только если  $m \leq 6$ . Довольно неожиданным является эффект возникновения ячеек квадратной формы для интервала  $0.5 < \delta < 1$ . При этом числа  $n_8$  (а также  $n_7$ ) оказываются ненулевыми. Это значит, что количество соседних частиц равно восьми. С понижением тепловой скорости объем класса 8 растет, а количество частиц в остальных классах резко уменьшаются.

Процесс модельной кристаллизации сопровождается появлением неправильностей структуры, которые можно определить как плоские дислокации. В случае треугольной формы ячеек основным видом дислокаций являются «дырки» или их линейные последовательности. Если ячейки – квадраты, то дислокации более разнообразны. На рис.2 показаны примеры кристаллизации в рассмотренных двух случаях; тепловая скорость доведена до величины 0,3. «Правильность» кристалла зависит от скорости снижения температуры: чем быстрее охлаждается модельный образец, тем больше вероятность возникновения неправильностей.

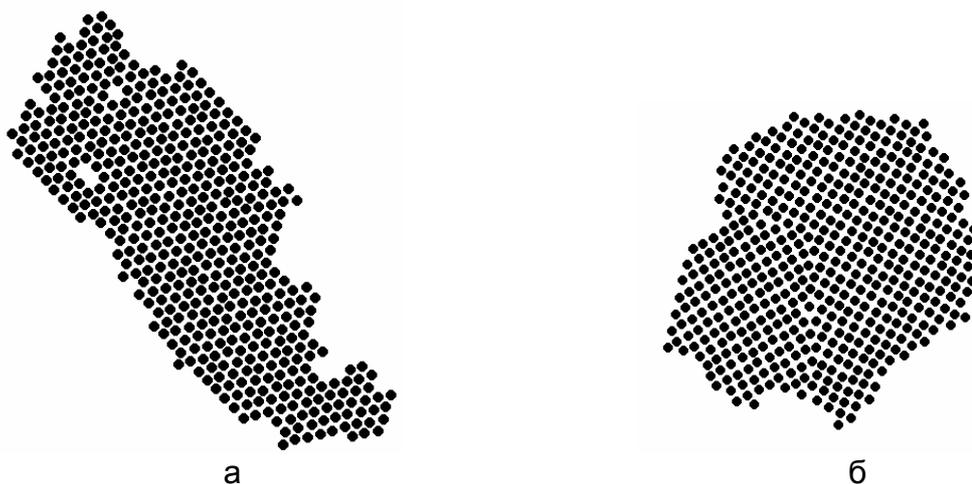


Рис. 2. 2D-кристаллизация простого вещества: а –  $\delta = 0,17$ ; б –  $\delta = 0,67$ .

Одним из достоинств рассматриваемого метода имитационного моделирования является то, что эволюция системы в целом прослеживается в реальном масштабе времени. На каждом шаге алгоритма время совпадает с глобальным ведущим параметром, который наращивается дискретно от события к событию с интервалами, равными интервалам времени между последовательными событиями. Это, в частности, позволяет достаточно просто подсчитывать давление внутри подсистемы как суммарный импульс, отнесенный к произведению интервала времени и площади границы (в двумерном случае – длины границы).

Если в начальный момент времени скорости частиц близки к нулю, а сами они свободны (т.е. ни в одной паре центры модельных частиц не находятся на расстоянии, меньшем  $D_{\text{внешн}}$ ), то при адиабатической кристаллизации тепловая скорость возрастает и достигает некоторого предельного значения. Это позволяет численно определить температуру, удельную теплоемкость и удельную теплоту для каждого из фазовых переходов.

В том случае, когда моделируется процесс кристаллизации совокупности веществ, предварительно следует задать законы взаимодействия модельных частиц. Это сводится к заполнению таблицы, отображающей такие параметры, как внешний и внутренний диаметры взаимодействий для каждой пары взаимодействующих модельных частиц, а также значения потенциалов парных взаимодействий. Пример заполнения на форме для четырех типов веществ приведен в таблице. При заполнении данных в таблице достаточно ограничиться ячейками, находящимися по одну сторону главной диагонали; предусматривается автоматическая симметризация каждой из трех матриц  $U$ ,  $D_0$ ,  $D_1$ , а также автоматическое исправление величин  $D_0$  и  $D_1$  для соблюдения условия  $D_0 < D_1$ . Моделируют две пары веществ; взаимодействие существенно внутри каждой из пар. Вещества из разных пар взаимодействуют слабо. Вещество типа 1 взаимодействует с веществом как типа 1, так и типа 2. Таким образом, возникают две изолированные системы кристаллов различных типов.

При введении модельной гравитации образуется дисперсная структура чередующихся кристаллов. Если температура достаточно высока, то вместо кристаллов возникают «капли» веществ различных типов (рис.3).

При установлении теплового равновесия средние кинетические энергии модельных частиц каждого из типов веществ выравниваются.

## Параметры парного взаимодействия модельных частиц четырех типов

Потенциаль	1	2	3	4
1	-1.00000	-1.00000	-0.01000	-0.01000
2	-1.00000	-0.01000	-0.01000	-0.01000
3	-0.01000	-0.01000	-0.01000	-1.50000
4	-0.01000	-0.01000	-1.50000	-0.01000

Внутр. D0	1	2	3	4
1	0.50000	0.40000	0.90000	0.90000
2	0.40000	0.50000	0.90000	0.90000
3	0.90000	0.90000	0.40000	0.40000
4	0.90000	0.90000	0.40000	0.40000

Внешн. D1	1	2	3	4
1	0.65000	0.75000	0.91000	0.95000
2	0.75000	0.55000	0.91000	0.95000
3	0.91000	0.91000	0.60000	0.60000
4	0.95000	0.95000	0.60000	0.60000

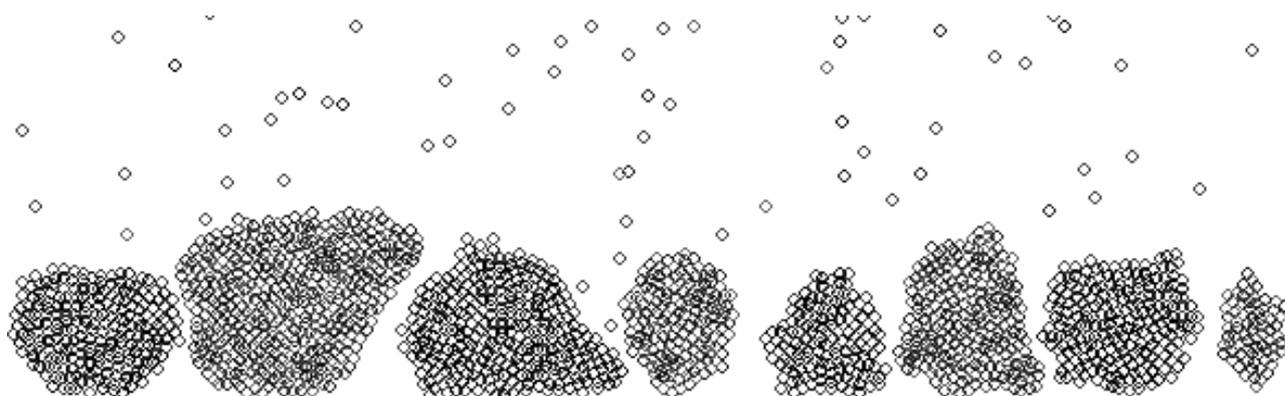


Рис. 3. Дисперсная система кристаллов для четырех типов веществ.

### Выводы и заключение

При большом количестве объектов для обеспечения эффективности мультиагентного подхода следует применять дискретно-событийные алгоритмы, так как использование дискретно-временных алгоритмов приводит к резкому возрастанию времени расчетов.

Предложенный метод моделирования вещества может получить развитие по следующим направлениям.

- Формулы пересчета скоростей (3) – (5) применимы как в двумерном, так и в трехмерном случае. В данной работе рассматривался процесс 2D-кристаллизации в основном по той причине, что в двумерном случае проще воспроизводится графическая интерпретация процесса.
- Процесс конденсации отличается от процесса химического взаимодействия тем, что при конденсации не происходит существенной перестройки структуры электронной оболочки взаимодействующих частиц. Учесть химические преобразования в рамках рассматриваемого метода математического моделирования можно путем присвоения нового типа (с новыми параметрами парных взаимодействий) частице, которая вступает в химическое соединение.
- В данной работе рассмотрена простейшая потенциальная яма; для описания более сложной структуры потенциала с целью сохранения основного алгоритма следует применить кусочно-постоянную аппроксимацию. Однако это приводит к появлению новых событий, связанных с переходами из областей с различными значениями потенциала. Время расчетов в среднем линейно зависит от количества новых типов событий.

### Список литературы

1. Уэрт Ч., Томсон Р. Физика твердого тела. – М.: Мир, 1969. – 560 с.
2. Берд Г. Молекулярная газовая динамика. – М.: Мир, 1981. – 320 с.
3. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. – М.: Мир, 1990. – 360 с.
4. Поттер Д. Вычислительные методы в физике. – М.: Мир, 1975. – 392 с.
5. Alder, B. J., Wainwright, T. 1958 Molecular dynamics by electronic computers. // Proceedings of the International Symposium on Transport Processes in Statistical Mechanics (ed. I. Prigogine). – P. 97-131.
6. Kerr W., Spears D., Spears W., Thayer D. Multi-agent Sweeping and Obstacle Avoidance / Springer-Verlag. Lecture Notes in Computer Science. Vol. 3228, [2004](#) // [wkerr@cs.uwyo.edu](mailto:wkerr@cs.uwyo.edu)
7. Чернышев Ю.К. Прямое моделирование течения газа в каналах сложной формы при малых числах Кнудсена //Труды Междунар. научн.-техн. конф. «Совершенствование турбоустановок методами математического и физического моделирования». – Х.: Ин-т проблем машиностроения НАН Украины. – 1997. –С. 238 – 240.
8. Чернышев Ю.К. Применение теории систем для алгоритмизации прямого математического моделирования течения газа // Двигатели внутреннего сгорания. – 2004. – № 2. – С. 44–47.
9. Чернышев Ю.К. Решение задач имитационного моделирования поведения большого количества модельных частиц. – Х.: ХАИ, 2006. – 58 с.
10. Левин С.С., Лоян А.В., Чернышев Ю.К. Трехмерное имитационное моделирование газодинамических процессов в стационарном плазменном двигателе в предпусковом состоянии // Открытые информационные и компьютерные технологии. – 2006. – Вып. 31. – С. 82 – 94.
11. Кормен Т., Лейзерсон Ч., Ривест Р. Алгоритмы. Построение и анализ. – М.: МЦНМО, 2000. – 956 с.