

УДК 539.3

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ ГАМИЛЬТОНОВОЙ ДИНАМИКИ В ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТАХ ЗАДАЧ МЕХАНИКИ СПЛОШНОЙ СРЕДЫ

В. Н. Софронов, М. В. Ветчинников, М. А. Дёмина
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области)

Представлен метод численного решения задач механики сплошной среды, основанный на дискретной гамильтоновой динамике. Для численного решения гамильтоновых уравнений используются симплектические разностные схемы. Приведены примеры моделирования бездиссипативных процессов.

Ключевые слова: дискретная гамильтонова динамика, фазовый объем, симплектические разностные схемы, динамические задачи упругости, пакет программ MoDuS.

Введение

Применение классических методов механики сплошной среды (МСС) привело к достижению больших успехов в решении прикладных задач. К сожалению, аппарат континуальной механики плохо приспособлен для расчета эффектов, связанных с большими деформациями и нарушением сплошности материала (дробление, пыление, диспергирование). Кроме того, для континуального подхода достаточно острой является проблема, связанная с генерацией расчетных сеток и их корректировкой в результате сильных деформаций и изменения геометрии.

В бессеточных методах (SPH [1], перидинамика PD [2], кластерная динамика KD [3], подвижные клеточные автоматы MSA [4]) сплошная среда заменяется системой взаимодействующих мезочастиц. Для методов этого класса не всегда удается сконструировать микроскопические взаимодействия так, чтобы получить заданные макроскопические свойства. Уравнения движения мезочастиц обычно записаны в интегродифференциальной форме, и не всегда устанавливается их связь с уравнениями гамильтоновой динамики.

Для построения дискретной модели в данной статье, как и в работе [5], использовались идеи гамильтоновой динамики. В отличие от [5] в расчетах были применены разностные методы с высоким порядком аппроксимации и сохранением симплектической структуры исходных дифференциальных уравнений.

Гамильтоновы методы, основанные на приведении уравнений к гамильтоновой форме, используются в различных разделах теоретической физики. В задачах МСС почти всегда присутствуют диссипативные процессы, разрушающие многие свойства гамильтоновых систем (например, сохранение фазового объема).

Предлагаемый метод в исходном виде не предполагает наличия диссипативных процессов и может использоваться только для решения ограниченного круга задач (акустики, сеймики, динамики гипоупругих сред). Учет диссипации возможен в рамках диссипативной динамики частиц DPD [6]. При моделировании упругопластических течений система уравнений дискретной модели должна быть дополнена соотношениями для вычисления тензора пластической дисторсии.

Программная реализация дискретной модели в рамках пакета молекулярно-динамического (МД) моделирования MoDuS [7] сводится к замене процедуры вычисления сил. Основные счетные модули, программы пре- и постобработки остаются без изменения. Использование дискретного метода (как и любого разностного метода) в практически важных расчетах невозможно без распараллеливания вычислительных процессов.

В результате реализации дискретного метода в комплексе программ MoDyS появляется возможность проведения расчетов задач МСС на новых суперЭВМ с использованием интерфейсов MPI, OpenMP и технологии CUDA с высокой (более 80 %) эффективностью распараллеливания.

1. Построение дискретной модели

Предполагается, что каждая частица (например, с номером i) является макрообъектом и наделена параметрами: массой m_i , плотностью ρ_i , начальными координатами $\vec{r}_i^0 (x_i^0, y_i^0, z_i^0)$ и компонентами скорости $\vec{u}_i (u_i^x, u_i^y, u_i^z)$. Кроме того, для каждой частицы заданы какие-либо два модуля упругости, например K_i — модуль объемного сжатия, G_i — модуль сдвига. Движение деформируемой среды характеризуется дискретным вектором смещений $\vec{w}_i (w_i^x, w_i^y, w_i^z)$. Верхний нулевой индекс будет использоваться для обозначения начального состояния.

Пусть N_i — список *sosedei* частицы с номером i . В этот список входят частицы, координаты которых удовлетворяют условию $|\vec{r}_i^0 - \vec{r}_k^0| < \delta_r$ (δ_r — горизонт взаимодействия).

Тензор* дисторсии $[C^i] = \left(\frac{\partial \vec{w}}{\partial \vec{r}} \right)^i$ для частицы i на дискретном множестве частиц N_i может быть определен по методу наименьших квадратов. В этом случае он примет следующий вид [5]:

$$[C^i]^T = [A^i]^{-1} [B^i]. \quad (1)$$

Таким образом, для вычисления тензора дисторсии требуется определить элементы двух матриц (симметричной $[A^i]$ и несимметричной $[B^i]$):

$$[A^i] = \sum_{k \in N_i} (\vec{r}_i^0 - \vec{r}_k^0) \otimes (\vec{r}_i^0 - \vec{r}_k^0), \quad \text{т. е.}$$

$$A_{11}^i = \sum_{k \in N_i} (x_i^0 - x_k^0) (x_i^0 - x_k^0); \quad A_{12}^i = A_{21}^i = \sum_{k \in N_i} (x_i^0 - x_k^0) (y_i^0 - y_k^0);$$

$$A_{13}^i = A_{31}^i = \sum_{k \in N_i} (x_i^0 - x_k^0) (z_i^0 - z_k^0); \quad A_{23}^i = A_{32}^i = \sum_{k \in N_i} (y_i^0 - y_k^0) (z_i^0 - z_k^0);$$

$$A_{22}^i = \sum_{k \in N_i} (y_i^0 - y_k^0) (y_i^0 - y_k^0); \quad A_{33}^i = \sum_{k \in N_i} (z_i^0 - z_k^0) (z_i^0 - z_k^0);$$

$$[B^i] = \sum_{k \in N_i} (\vec{r}_i^0 - \vec{r}_k^0) \otimes (\vec{w}_i - \vec{w}_k), \quad \text{т. е.}$$

$$B_{11}^i = \sum_{k \in N_i} (x_i^0 - x_k^0) (w_i^x - w_k^x); \quad B_{12}^i = \sum_{k \in N_i} (x_i^0 - x_k^0) (w_i^y - w_k^y); \quad B_{13}^i = \sum_{k \in N_i} (x_i^0 - x_k^0) (w_i^z - w_k^z);$$

$$B_{21}^i = \sum_{k \in N_i} (y_i^0 - y_k^0) (w_i^x - w_k^x); \quad B_{22}^i = \sum_{k \in N_i} (y_i^0 - y_k^0) (w_i^y - w_k^y); \quad B_{23}^i = \sum_{k \in N_i} (y_i^0 - y_k^0) (w_i^z - w_k^z);$$

$$B_{31}^i = \sum_{k \in N_i} (z_i^0 - z_k^0) (w_i^x - w_k^x); \quad B_{32}^i = \sum_{k \in N_i} (z_i^0 - z_k^0) (w_i^y - w_k^y); \quad B_{33}^i = \sum_{k \in N_i} (z_i^0 - z_k^0) (w_i^z - w_k^z).$$

В (1) $[A^i]^{-1}$ — матрица, обратная к $[A^i]$:

$$[A^i]^{-1} = \frac{1}{|A^i|} \begin{pmatrix} A_{22}^i A_{33}^i - A_{23}^i A_{23}^i & A_{13}^i A_{23}^i - A_{12}^i A_{33}^i & A_{12}^i A_{23}^i - A_{13}^i A_{22}^i \\ A_{13}^i A_{23}^i - A_{12}^i A_{33}^i & A_{11}^i A_{33}^i - A_{13}^i A_{13}^i & A_{13}^i A_{12}^i - A_{11}^i A_{23}^i \\ A_{12}^i A_{23}^i - A_{13}^i A_{22}^i & A_{13}^i A_{12}^i - A_{11}^i A_{23}^i & A_{11}^i A_{22}^i - A_{12}^i A_{12}^i \end{pmatrix};$$

$$|A^i| = A_{11}^i A_{22}^i A_{33}^i + 2A_{12}^i A_{13}^i A_{23}^i - A_{11}^i A_{23}^i A_{23}^i - A_{22}^i A_{13}^i A_{13}^i - A_{33}^i A_{12}^i A_{12}^i.$$

* В данной статье в качестве тензоров всюду используются матрицы. Для облегчения восприятия обозначения матриц, в отличие от их элементов, будем заключать в квадратные скобки. Элементы же матриц, как обычно, снабжаются нижними индексами.

В условиях однородной деформации вектор смещения имеет вид

$$\vec{w} = [\check{C}] \vec{r}, \quad [\check{C}] = \frac{\partial \vec{w}}{\partial \vec{r}}. \quad (2)$$

Здесь матрица дисторсии $[\check{C}]$ не зависит от координат.

Покажем, что элементы тензора дисторсии для поля $[C^i]$ смещений (2), вычисленные с помощью процедуры численного дифференцирования (1), совпадают с элементами матрицы $[\check{C}]$:

$$\begin{aligned} [B^i] &= \sum_{k \in N_i} (\vec{r}_i^0 - \vec{r}_k^0) \otimes (\vec{w}_i - \vec{w}_k) = \sum_{k \in N_i} (\vec{r}_i^0 - \vec{r}_k^0) \otimes [\check{C}] (\vec{r}_i^0 - \vec{r}_k^0) = \\ &= \left(\sum_{k \in N_i} (\vec{r}_i^0 - \vec{r}_k^0) \otimes (\vec{r}_i^0 - \vec{r}_k^0) \right) [\check{C}]^T = [A^i] [\check{C}]^T. \end{aligned}$$

Таким образом, $[C^i]^T = [A^i]^{-1} [B^i] = [\check{C}]^T$.

Тензор деформаций $[E^i]$ является симметричной частью тензора дисторсии $[C^i]$:

$$[E^i] = 0,5 \left([C^i]^T + [C^i] \right).$$

Как обычно, тензор деформаций может быть представлен в виде суммы шарового тензора и дивагтора:

$$[E^i] = [E_V^i] + [E_S^i], \quad [E_V^i] = \frac{1}{3} (\delta_{kl} [E^i]), \quad E_{jj}^i = \frac{\rho_i^0}{\rho_i} - 1,$$

где δ_{kl} — символ Кронеккера.

Энергия, приходящаяся на одну частицу i , с точностью до членов второго порядка имеет вид [8]

$$U_i = \frac{\lambda_i}{2} \sum_j E_{jj}^i E_{jj}^i + G_i \sum_{k,l} E_{kl}^i E_{kl}^i = \frac{K_i}{2} \text{Sp}^2 [E_V^i] + G_i [E_S^i] : [E_S^i]. \quad (3)$$

Здесь G_i и $\lambda_i = K_i - \frac{2}{3}G_i$ — коэффициенты Ламэ. Тензор напряжений Пиолы—Кирхгофа $[\sigma^i]$ определяется дифференцированием потенциала U_i , заданного формулой (3):

$$\begin{aligned} [\sigma^i] &= \left[\frac{\partial U_i}{\partial E_{kl}^i} \right] = K_i \delta_{kl} \sum_j E_{jj}^i + 2G_i \left(E_{kl}^i - \frac{1}{3} \delta_{kl} \sum_j E_{jj}^i \right), \quad \text{т. е.} \\ \sigma_{11}^i &= \left(K_i - \frac{2G_i}{3} \right) (E_{11}^i + E_{22}^i + E_{33}^i) + 2G_i E_{11}^i; \quad \sigma_{12}^i = \sigma_{21}^i = 2G_i E_{12}^i; \\ \sigma_{22}^i &= \left(K_i - \frac{2G_i}{3} \right) (E_{11}^i + E_{22}^i + E_{33}^i) + 2G_i E_{22}^i; \quad \sigma_{13}^i = \sigma_{31}^i = 2G_i E_{13}^i; \\ \sigma_{33}^i &= \left(K_i - \frac{2G_i}{3} \right) (E_{11}^i + E_{22}^i + E_{33}^i) + 2G_i E_{33}^i; \quad \sigma_{23}^i = \sigma_{32}^i = 2G_i E_{23}^i. \end{aligned}$$

Тензор напряжений Пиолы—Кирхгофа $[\sigma^i]$ отнесен к системе координат начального (до деформации) состояния. Переход к тензору напряжений Коши $[\Sigma^i]$, отнесенному к актуальному (текущему) состоянию, осуществляется по формулам $[\Sigma^i] = \frac{\rho_i}{\rho_i^0} [\sigma^i] ([I] + [C^i])$ [9—11].

С учетом (3) гамильтониан системы представим в виде

$$H = \sum_i \left(\frac{|\vec{p}_i|^2}{2m_i} + V_i^0 U_i \right) = \sum_i \left(\frac{|\vec{p}_i|^2}{2m_i} + \frac{m_i}{\rho_i^0} U_i \right), \quad (4)$$

где V_i^0, \vec{p}_i — начальный объем и импульс i -й частицы.

Динамические переменные \vec{r}_i, \vec{p}_i изменяются во времени согласно уравнениям Гамильтона:

$$\frac{d\vec{r}_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} = \vec{u}_i, \quad \frac{d\vec{p}_i}{dt} = m_i \frac{d\vec{u}_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} = \vec{F}_i. \quad (5)$$

Сила, действующая на частицу, определяется дифференцированием гамильтониана:

$$\vec{F}_i = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} = -V_i^0 \left[\frac{\partial U_i}{\partial \vec{E}^i} \right] \frac{\partial E^i}{\partial \vec{r}_i} = -\sum_{k \in N_i} V_i^0 [\sigma^i] [A^i]^{-1} (\vec{r}_i^0 - \vec{r}_k^0) = \sum_{k \in N_i} \vec{F}_{ik}. \quad (6)$$

В молекулярной (и кластерной) динамике тензор напряжений $[S^i]$ при заданной силе взаимодействия частиц i, k вычисляется по формуле

$$[S^i] V_i = \sum_{k \in N_i} \vec{F}_{ik} \otimes (\vec{r}_i - \vec{r}_k).$$

В результате преобразования с учетом (6) получаем, что так определенный тензор напряжений $[S^i]$ будет совпадать с тензором Коши:

$$\begin{aligned} [S^i] V_i &= \sum_{k \in N_i} V_i^0 [\sigma^i] [A^i]^{-1} (\vec{r}_i^0 - \vec{r}_k^0) \otimes (\vec{r}_i - \vec{r}_k) = V_i^0 [\sigma^i] [A^i]^{-1} ([A^i] + [B^i]) = \\ &= V_i^0 [\sigma^i] ([I] + [C^i]) = V_i^0 [\Sigma^i] \frac{\rho_i^0}{\rho_i} = \frac{m_i [\Sigma^i]}{\rho_i} = [\Sigma^i] V_i. \end{aligned}$$

Классическими следствиями уравнений (5) являются законы сохранения энергии, импульса и момента импульса. Гамильтоновы системы, кроме этих стандартных интегралов движения, имеют целую иерархию интегральных инвариантов [12]. Не вдаваясь в детали этой иерархической структуры, отметим лишь, что для гамильтоновых систем инвариантом движения является фазовый объем.

Пусть начальные данные принадлежат некоторой $6N$ -мерной области фазового пространства: $(\vec{r}^0, \vec{p}^0) \in \Omega_0$. В соответствии с теоремой Лиувилля [12] фазовый поток $\tilde{G} : R^{6N}(\vec{r}^0, \vec{p}^0) \rightarrow R^{6N}(\vec{r}, \vec{p})$ сохраняет фазовый объем: $\int d\vec{r}^0 d\vec{p}^0 = \int d\vec{r} d\vec{p}$.

Критерий симплектичности фазового потока \tilde{G} с матрицей перехода $[D] = \frac{\partial(\vec{r}, \vec{p})}{\partial(\vec{r}^0, \vec{p}^0)}$, которая является матрицей Якоби и выражается матричным соотношением [12]

$$[D]^T [J] [D] = [J], \quad [J] = \begin{pmatrix} 0 & [-E_{3N}] \\ [E_{3N}] & 0 \end{pmatrix}, \quad (7)$$

где $[E_{3N}]$ — единичная матрица порядка $3N$.

2. Симплектические разностные схемы численного решения натуральных гамильтоновых систем

Требования, предъявляемые к разностным схемам МСС, общеизвестны. Они заключаются в выполнении законов сохранения на дискретном уровне [13]. Так как гамильтоновы системы, кроме стандартных интегралов движения, имеют дополнительные интегральные инварианты, то и разностные методы решения таких систем должны наследовать все свойства соответствующих дифференциальных уравнений [14].

В соответствии с (7) одношаговый разностный метод называется симплектическим, если оператор перехода $[D^{n+1}] = \frac{\partial(\vec{r}^{n+1}, \vec{p}^{n+1})}{\partial(\vec{r}^n, \vec{p}^n)}$ осуществляет симплектическое преобразование динамических переменных на каждом временном шаге [14, 15]:

$$[D^{n+1}]^T [J] [D^{n+1}] = [J]. \quad (8)$$

Разностные схемы с выполнением условия (8) построены в работах Ю. Б. Суриса и Сан-Серны [14, 15]. Для систем с гамильтонианами общего вида не существует явных симплектических схем [16]. Такие схемы могут быть построены только для натуральных гамильтоновых систем (систем с распадающимися гамильтонианами):

$$H(\vec{r}, \vec{p}) = K(\vec{p}) + U(\vec{r}).$$

Дискретная модель, построенная в разд. 1, принадлежит именно к этому классу натуральных гамильтоновых систем. Для численного решения уравнений (4), (5) будем использовать разностные схемы с выполнением условия симплектичности (8). Можно надеяться, что подобные схемы будут лучше воспроизводить структуру решения в фазовом пространстве.

Для m -стадийных разностных схем Рунге—Кутты—Нистрема (RKN)

$$\begin{aligned} \vec{r}^{n+1} &= \vec{r}^n + \Delta t \vec{u}^n + \Delta t^2 \sum_{l=1}^m \beta_l \vec{F}(\vec{q}^l); \\ \vec{u}^{n+1} &= \vec{u}^n + \Delta t \sum_{l=1}^m \gamma_l \vec{F}(\vec{q}^l), \quad \vec{q}^l = \vec{r}^n + \Delta t \alpha_l \vec{u}^n + \Delta t^2 \sum_{k=1}^m a_{lk} \vec{F}(\vec{q}^k) \end{aligned}$$

условие симплектичности (8) будет выполнено при следующих ограничениях на коэффициенты разностной схемы [14, 15]:

$$\begin{aligned} \beta_l &= \gamma_l (1 - \alpha_l), \quad l = 1, 2, \dots, m; \\ \gamma_l a_{lk} - \gamma_k a_{kl} + \gamma_l \gamma_k (\alpha_k - \alpha_l) &= 0, \quad l, k = 1, 2, \dots, m. \end{aligned}$$

Для явных схем матрица коэффициентов $[a_{lk}]$, $l, k = 1, 2, \dots, m$, является нижней треугольной. В таком случае связь элементов этой матрицы с параметрами α_l , γ_l определяется однозначно:

$$a_{lk} = \begin{cases} 0, & 1 \leq l \leq k \leq m; \\ \gamma_k (\alpha_l - \alpha_k), & 1 \leq k < l \leq m. \end{cases}$$

Таким образом, m -стадийные симплектические схемы RKN полностью определяются заданием двух векторов: $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_m)$ и $\gamma = (\gamma_1, \dots, \gamma_m)$.

Следующим шагом в процессе построения схемы является выполнение условий порядка аппроксимации для коэффициентов схемы. Эти условия получаются приравнованием соответствующих коэффициентов в степенных разложениях точного и численного решений, что и обеспечивает нужный порядок аппроксимации.

Описание классов одно- и двухстадийных симплектических схем RKN не представляет трудностей. В классе одностадийных схем ($m = 1$) существует единственная симплектическая схема второго порядка — схема Верле [17] с параметрами $\alpha_1 = 0,5$, $\gamma_1 = 1$. Данная схема получила наибольшее распространение в МД-моделировании.

Порядок аппроксимации выше второго может быть получен только в том случае, если число стадий увеличивается до трех ($m \geq 3$). Проблема описания многообразия явных трехстадийных симплектических схем решена в [18–20]. Доказано, что в этом классе отсутствуют схемы пятого порядка, существует семь схем четвертого порядка [18–20], три из которых — с действительными коэффициентами:

– схема SIA4 [21]:

$$\alpha_1 = \frac{2^{1/3}}{6} + \frac{2^{2/3}}{12} + \frac{1}{3}; \quad \alpha_2 = \frac{1}{2}; \quad \alpha_3 = \frac{2}{3} - \frac{2^{1/3}}{6} - \frac{2^{2/3}}{12};$$

$$\gamma_1 = \frac{2^{1/3}}{3} + \frac{2^{2/3}}{6} + \frac{2}{3}; \quad \gamma_2 = -\frac{1}{3} - \frac{2 \cdot 2^{1/3}}{3} - \frac{2^{2/3}}{3}; \quad \gamma_3 = \frac{2^{1/3}}{3} + \frac{2^{2/3}}{6} + \frac{2}{3};$$

– два варианта схемы RKN4 [22] в исходном и сопряженном (в алгебраическом смысле – с изменением знаков при радикалах) виде:

$$\alpha_1 = \frac{3 \mp \sqrt{3}}{6}; \quad \alpha_2 = \frac{3 \pm \sqrt{3}}{6}; \quad \alpha_3 = \frac{3 \mp \sqrt{3}}{6}; \quad \gamma_1 = \frac{3 \pm 2\sqrt{3}}{12}; \quad \gamma_2 = \frac{1}{2}; \quad \gamma_3 = \frac{3 \mp 2\sqrt{3}}{12}.$$

Большая часть последующих тестовых расчетов проведена с использованием схемы Верле.

3. Программная реализация дискретной модели в рамках пакета программ MoDyS

Представленная дискретная модель отличается от МД-метода процедурой вычисления сил, и было естественным желание реализовать эту модель в рамках пакета программ MoDyS [7]. В этом МД-пакете для быстрого поиска взаимодействующих частиц используется сеточный подход, основанный на построении и обновлении на каждом счетном шаге списка Верле. Для дискретной модели связанный список строится один раз (после задания начальной геометрии) и остается неизменным на всем протяжении расчета.

Все программы пре- и постобработки пакета MoDyS остались практически без каких-либо изменений. Для параллельных вычислений потребовалась небольшая модификация программ, выполняющих обмены данными между MPI-процессами.

Блок-схема дискретной модели показана на рис. 1.

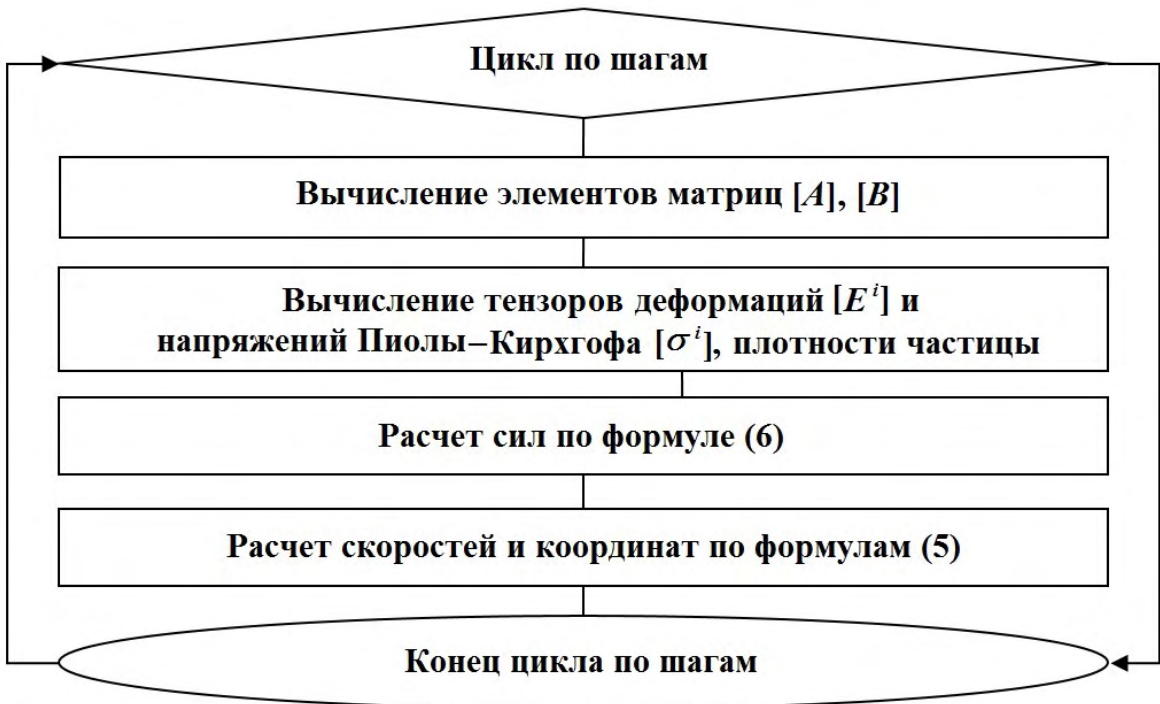


Рис. 1. Блок-схема дискретной модели

4. Особенности дискретной модели

Дискретная модель описывается нелокальной теорией, содержащей масштаб длины — горизонт взаимодействия (δ_r). Ответ на вопрос, что происходит с уравнениями дискретной модели при уменьшении масштаба длины, переходят ли эти уравнения в классические уравнения динамической теории упругости, получен в [23]. Было показано, что если деформации, определяющие модель, и какие-либо неоднородности достаточно гладкие, то тензор напряжений дискретной модели в предельном случае $\delta_r \rightarrow 0$ переходит в тензор Пиолы—Кирхгофа, а уравнения гамильтоновой механики превращаются в уравнения теории упругости. Соответственно предельные численные решения этих уравнений (при измельчении сетки для МСС и соответственно увеличении числа частиц для дискретной модели) также будут совпадать. Однако результаты расчетов при конечных размерах сетки и при конечном числе частиц могут различаться, так как для уравнений МСС и уравнений гамильтоновой механики используются совершенно разные численные методы. Хорошим качеством симплектических разностных схем является отсутствие диссипации — все характеристические числа матрицы перехода лежат на единичной окружности комплексной плоскости [12].

Для оценки точности численных методов будем использовать достаточно простые задачи, имеющие эталонные решения.

5. Эталонные решения тестовых задач

5.1. Прохождение упругих волн вдоль тонкого стержня. Рассмотрим прохождение упругих волн по цепочке частиц и соответственно прохождение волн по тонкому стержню [20]. Для плоских одномерных течений тензоры деформаций и напряжений имеют вид

$$[E] = \begin{pmatrix} \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad [\sigma] = \begin{pmatrix} (K + 4G/3)\varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & (K - 2G/3)\varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & (K - 2G/3)\varepsilon \end{pmatrix}.$$

Пусть $K = 2G/3$, тогда коэффициент Пуассона $\nu = 0$, модуль Юнга $E = 3K$, $\varepsilon = 0,001$. В этом случае в тонком стержне распространяются волны одного направления (вдоль оси X), так как поперечные напряжения отсутствуют: $\sigma_{22} = \sigma_{33} = 0$. Волны будут распространяться вдоль стержня со скоростью $C_E = \sqrt{E/\rho} = \sqrt{3K/\rho}$.

Постановка задачи для разрывных начальных данных взята из монографии по перидинамике [24]. Начальные условия (w — смещение; σ — нормальное напряжение; u — скорость; $2L$ — длина стержня):

$$w(x, t = 0) = \varepsilon \cdot \begin{cases} x, & 0 < x < L; \\ 2L - x, & L < x < 2L; \end{cases}$$

$$\sigma(x, t = 0) = E \frac{\partial w(x, t = 0)}{\partial t} = \begin{cases} E\varepsilon, & 0 < x < L; \\ -E\varepsilon, & L < x < 2L. \end{cases}$$

Граничные условия:

$$u(x = 0, t) = 0; \quad u(x = 2L, t) = 0. \tag{9}$$

Эталонное решение задачи в данной постановке имеет вид [24]

$$w(x, t) = \frac{8\varepsilon L}{\pi^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)^2} \sin \frac{(2n+1)\pi x}{2L} \cos \sqrt{\frac{E}{\rho}} \frac{(2n+1)\pi t}{2};$$

$$u(x, t) = \frac{\partial w(x, t)}{\partial t}; \quad \sigma(x, t) = E \frac{\partial w(x, t)}{\partial x}.$$

В этой задаче представляет интерес исследование амплитудной и фазовой ошибок разностных схем на достаточно большом временном интервале.

Для гладких начальных данных

$$w(x, t = 0) = \varepsilon L \sin \frac{\pi x}{2L}; \quad \sigma(x, t = 0) = E \frac{\varepsilon \pi}{2} \cos \frac{\pi x}{2L}; \quad u(x, t = 0) = 0$$

при сохранении граничных условий (9) эталонное решение данной задачи имеет вид

$$w(x, t) = \varepsilon L \sin \frac{\pi x}{2L} \cos \sqrt{\frac{E}{\rho}} \frac{\pi t}{2L}; \quad u(x, t) = \frac{\partial w(x, t)}{\partial t}; \quad \sigma(x, t) = E \frac{\partial w(x, t)}{\partial x}.$$

5.2. Взаимодействие упругой волны с контактной границей. Важным качеством разностных схем является сохранение точности расчетов вблизи разрывов в решении или значениях параметров веществ [25]. В связи с этим рассмотрим задачу о взаимодействии гармонической волны с контактной границей, разделяющей счетную область $0 < x < 2L$ на две половины. В разд. 6.2 представлены результаты расчетов для веществ с сильно различающимися значениями акустической жесткости: $\frac{\rho_1 c_1}{\rho_2 c_2} \approx 3$ (Fe и Be с модулем Юнга E_1 и E_2 соответственно).

Начальные условия:

$$w(x, t = 0) = \varepsilon \cdot \begin{cases} \sin \frac{8\pi x}{L}, & 0 < x < L; \\ 0, & L < x < 2L; \end{cases} \quad \rho = \begin{cases} \rho_1, & 0 < x < L; \\ \rho_2, & L < x < 2L; \end{cases} \quad \varepsilon = 0,001;$$

$$\sigma(x, t = 0) = E \frac{\partial w(x, t = 0)}{\partial t} = \begin{cases} 8\pi E_1 \varepsilon \cos \frac{8\pi x}{L}, & 0 < x < L; \\ 0, & L < x < 2L; \end{cases} \quad E = \begin{cases} E_1, & 0 < x < L; \\ E_2, & L < x < 2L; \end{cases}$$

$$u(x, t = 0) = 0.$$

Граничные условия:

$$u(x = 0, t) = 0, \quad u(x = 2L, t) = 0.$$

Эталонное решение получено суперпозицией падающей, отраженной и преломленной волн [25]:

1) $x' = x - L < -c_1 t :$

$$\sigma(x, t) = 0,5 w_0 \rho_1 c_1 \omega \left[\cos \frac{\omega(x' + c_1 t)}{c_1} + \cos \frac{\omega(x' - c_1 t)}{c_1} \right];$$

$$u(x, t) = 0,5 w_0 \omega \left[\cos \frac{\omega(x' + c_1 t)}{c_1} - \cos \frac{\omega(x' - c_1 t)}{c_1} \right];$$

2) $-c_1 t < x' < 0 :$

$$\sigma(x, t) = 0,5 w_0 \rho_1 c_1 \omega \left[\cos \frac{\omega(x' + c_1 t)}{c_1} + \cos \frac{\omega(x' - c_1 t)}{c_1} \right] + w_0 \frac{(\rho_1 c_1)^2}{\rho_1 c_1 + \rho_2 c_2} \cos \frac{\omega(x' + c_1 t)}{c_1};$$

$$u(x, t) = 0,5 w_0 \omega \left[\cos \frac{\omega(x' + c_1 t)}{c_1} - \cos \frac{\omega(x' - c_1 t)}{c_1} \right] - w_0 \frac{\rho_1 c_1}{\rho_1 c_1 + \rho_2 c_2} \cos \frac{\omega(x' + c_1 t)}{c_1};$$

3) $0 < x' < c_2 t :$

$$\sigma(x, t) = -w_0 \frac{\rho_1 c_1 \rho_2 c_2}{\rho_1 c_1 + \rho_2 c_2} \cos \frac{\omega(x' - c_2 t)}{c_2};$$

$$u(x, t) = -w_0 \frac{\rho_1 c_1}{\rho_1 c_1 + \rho_2 c_2} \cos \frac{\omega(x' - c_2 t)}{c_2}; \quad c_2 = \sqrt{\frac{E_2}{\rho_2}};$$

4) $c_2 t < x' :$

$$\sigma(x, t) = 0; \quad u(x, t) = 0.$$

Здесь всюду $\omega = \frac{8\pi c_1}{L}$, $c_1 = \sqrt{\frac{E_1}{\rho_1}}$.

5.3. Сферически-симметричная расходящаяся упругая волна. В однородной упругой среде с параметрами Ламэ λ , μ на сфере радиусом r^0 задан источник $w|_{r=r^0} = f(t)$. Рассматривается распространение расходящейся упругой волны [20].

Запишем уравнения динамической теории упругости при выполнении условий сферической симметрии:

$$\rho^0 \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} = -\frac{\partial P_r}{\partial r} - 2\frac{P_r - P_\theta}{r}, \quad P_r = -\lambda \left(\frac{\partial w}{\partial r} + 2\frac{w}{r} \right) - 2\mu \frac{\partial w}{\partial r}, \quad P_\theta = -\lambda \left(\frac{\partial w}{\partial r} + 2\frac{w}{r} \right) - 2\mu \frac{w}{r}.$$

Исключив напряжения, получим волновое уравнение для потенциала

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} = \frac{1}{C_l} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2},$$

где C_l — скорость продольной волны.

Общее решение для волны, распространяющейся от центра, запишем в виде

$$\Phi(r, t) = \Phi \left(t - \frac{r - r^0}{C_l} \right); \quad w = \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \Phi \left(t - \frac{r - r^0}{C_l} \right) \right); \quad C_l = \sqrt{\frac{\lambda + 2\mu}{\rho_0}}.$$

Пусть $\tau = t - (r - r^0)/C_l$. С учетом граничного условия решение для потенциала принимает вид

$$\Phi(\tau) = -r^0 C_l \int_0^\tau \exp \left(-\frac{C_l(\tau - \xi)}{r^0} \right) f(\xi) d\xi. \quad (10)$$

Пусть на сфере радиусом r^0 задан гармонический источник (w_0 , T — амплитуда и период колебаний)

$$f(t) = w_0 (1 - \cos \omega t), \quad \omega = \frac{2\pi}{T}.$$

Интегрирование (10) при выбранном источнике дает следующую формулу для вычисления потенциала:

$$\Phi(\tau) = \begin{cases} -\frac{r^{02} w_0}{1 + \alpha^2} \left(1 + \alpha^2 - \alpha^2 \exp \left(-\frac{C_l \tau}{r^0} \right) - \cos \omega \tau - \alpha \sin \omega \tau \right), & \tau \geq 0; \\ 0, & \tau < 0; \end{cases} \quad \alpha = \frac{\omega r^0}{C_l}.$$

Выпишем также значения производных:

$$\begin{aligned} \frac{d\Phi(\tau)}{d\tau} &= \begin{cases} -\frac{r^0 w_0 C_l}{1 + \alpha^2} \left(\alpha^2 \exp \left(-\frac{C_l \tau}{r^0} \right) + \alpha \sin \omega \tau - \alpha^2 \cos \omega \tau \right), & \tau \geq 0; \\ 0, & \tau < 0; \end{cases} \\ \frac{d^2\Phi(\tau)}{d\tau^2} &= \begin{cases} -\frac{w_0 C_l^2}{1 + \alpha^2} \left(-\alpha^2 \exp \left(-\frac{C_l \tau}{r^0} \right) + \alpha^2 \cos \omega \tau + \alpha^3 \sin \omega \tau \right), & \tau \geq 0; \\ 0, & \tau < 0; \end{cases} \\ \frac{d^3\Phi(\tau)}{d\tau^3} &= \begin{cases} -\frac{w_0 C_l^3}{(1 + \alpha^2) r^0} \left(\alpha^2 \exp \left(-\frac{C_l \tau}{r^0} \right) - \alpha^3 \sin \omega \tau + \alpha^4 \cos \omega \tau \right), & \tau \geq 0; \\ 0, & \tau < 0. \end{cases} \end{aligned}$$

Решение поставленной задачи имеет вид

$$w(r, t) = -\frac{1}{r^2} \left(\Phi(\tau) + \frac{r}{C_l} \frac{d\Phi}{d\tau} \right); \quad \frac{\partial w(r, t)}{\partial r} = \frac{1}{r^3} \left(2\Phi(\tau) + \frac{2r}{C_l} \frac{d\Phi}{d\tau} + \frac{r^2}{C_l^2} \frac{d^2\Phi}{d\tau^2} \right);$$

$$u(r, t) = \frac{\partial w(r, t)}{\partial t} = -\frac{1}{r^2} \left(\frac{d\Phi}{d\tau} + \frac{r}{C_l} \frac{d^2\Phi}{d\tau^2} \right); \quad \frac{\partial u(r, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 w(r, t)}{\partial t^2} = -\frac{1}{r^2} \left(\frac{d^2\Phi}{d\tau^2} + \frac{r}{C_l} \frac{d^3\Phi}{d\tau^3} \right);$$

$$\sigma_{rr}(r, t) = -\rho^0 C_l^2 \left(\frac{\partial w(r, t)}{\partial r} + \frac{w(r, t)}{r} \frac{2\nu}{1-\nu} \right); \quad \sigma_{\theta\theta}(r, t) = \sigma_{\varphi\varphi} = -\frac{\rho^0 C_l^2}{1-\nu} \left(\nu \frac{\partial w(r, t)}{\partial r} + \frac{w(r, t)}{r} \right).$$

Тестовые расчеты этой задачи проведены в декартовой системе координат, поэтому рассчитанные параметры для сравнения с эталоном были переведены в сферическую систему координат.

6. Расчеты тестовых задач

Расчеты тестовых задач из разд. 5 проведены с использованием консервативного варианта разностной схемы *крест* [26] и метода, основанного на дискретной гамильтоновой механике.

Малыми параметрами в этих расчетах являются размер счетной ячейки $\sim L/N$, а также объем, приходящийся на одну частицу, и соответствующий этому объему размер частицы $\sim L/N$. Здесь N — число ячеек либо число частиц вдоль одного из направлений.

Во всех расчетах выбрана следующая система единиц измерения: г, см, 10^{-5} с.

6.1. Прохождение гармонических волн вдоль тонкого стержня. Геометрия задачи:

$$0 < x < 2L; \quad -h < y < h; \quad -h < z < h; \quad L = 1\text{см}; \quad h = L/N; \quad N = 100.$$

Свойства материала: модуль Юнга $E = 200$, коэффициент Пуассона $\nu = 0$, плотность $\rho = 7,85$. Постановка расчетов для разрывных и гладких начальных данных приведена в разд. 5.1. В этой задаче представляет интерес исследование амплитудной и фазовой ошибок разностных схем на достаточно большом временном интервале. Конечное время счета $t_k = 250 t_0$, $t_0 = L/C_E$, соответствует $t_k C_E / (4L) \approx 60$ волновым периодам.

Результаты в интервале времени $240 < t/t_0 < 250$ вблизи конечного момента представлены на рис. 2 для двух вариантов расчетов: с использованием разностной схемы *крест* (МСС-расчетов) и дискретного метода (ДМ). Результаты соответствуют задаче с разрывными начальными данными.

Точность первого варианта расчетов определяется аппроксимационной и искусственной вязкостью. Во втором варианте счетная диссипация отсутствует. Волновой профиль в этих расчетах не

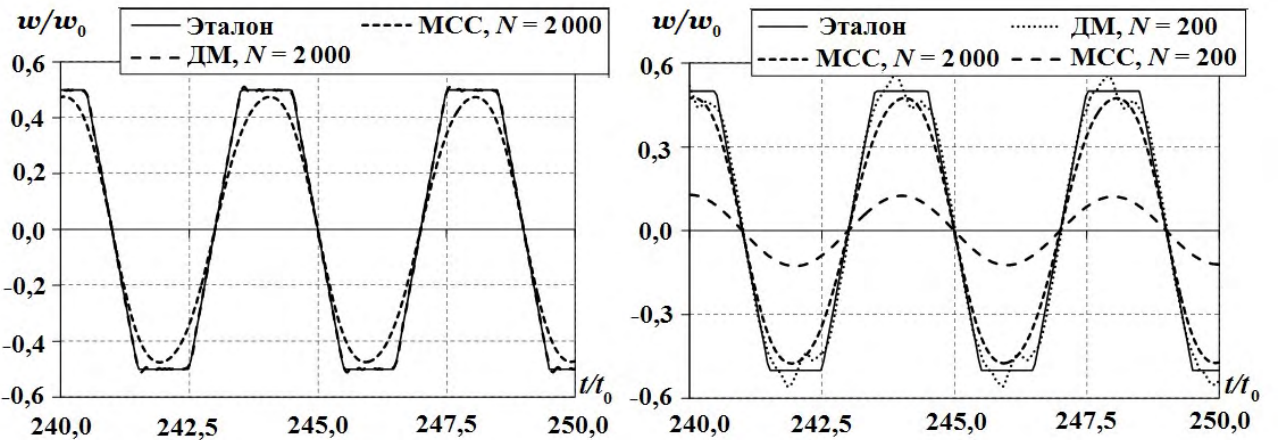


Рис. 2. Зависимости смещения от времени в сечении $x = L/2$, полученные в МСС-расчетах и расчетах с использованием ДМ с числом ячеек $N = 2000$ и 200

искажается в течение времени, равного 60 волновым периодам. Диаграмма смещения совпадает с эталоном с точностью до графического изображения.

Расхождение по точности между двумя вариантами расчетов еще более усиливается при уменьшении числа счетных ячеек и соответственно числа частиц до $N = 200$ (см. рис. 2, справа). В расчетах с ДМ приемлемая точность сохраняется и при таком уменьшении числа частиц, в то время как в МСС-расчетах амплитуда волны на конечный момент времени уменьшилась по сравнению с эталоном в 5 раз. Сравнительный анализ показывает, что результаты одинаковой точности на момент $t_k = 250t_0$ могут быть получены при использовании $N = 2000$ ячеек сетки в МСС-расчетах либо при использовании $N = 200$ частиц в ДМ. При этом следует учесть, что объем вычислительной работы в обоих случаях пропорционален N^2 .

В задачах с гладкими начальными данными преимущества методов гамильтоновой механики становятся еще более очевидными. В таких расчетах звуковые возмущения сохраняются без искажения на сколь угодно больших пространственных (либо временных) интервалах, если на длину волны приходится достаточное ($\gtrsim 20$) число частиц. В расчетах с использованием разностных схем МСС звуковые возмущения (как гладкие, так и негладкие) быстро затухают, и это обстоятельство не позволяет проводить расчеты на больших пространственных (либо временных) интервалах. Для устранения этого недостатка при построении разностных схем требуется учитывать характеристические свойства дифференциальных уравнений.

6.2. Взаимодействие гармонической волны с контактной границей. Геометрия задачи:

$$0 < x < 2L; \quad -h < y < h; \quad -h < z < h; \quad L = 1; \quad h = L/N; \quad N = 100.$$

Счетная область $0 < x < 2L$ разделена контактной границей на две половины. Выбраны вещества (Fe и Be) общей массой M с сильно различающимися значениями акустической жесткости: $\frac{\rho_1 c_1}{\rho_2 c_2} \approx 3$ (таблица).

Параметры веществ в задаче о взаимодействии гармонической волны с контактной границей

Fe	$0 < x < L$	$\rho_1 = 7,85$	$\nu_1 = 0$	$E_1 = 200$	$c_1 = \sqrt{E_1/\rho_1} = 5,0475$
Be	$L < x < 2L$	$\rho_2 = 1,85$	$\nu_2 = 0$	$E_2 = 106,13$	$c_2 = \sqrt{E_2/\rho_2} = 7,5741$

Начальные условия:

$$w(x, t = 0) = \varepsilon \cdot \begin{cases} \sin \frac{8\pi x}{L}, & 0 < x < L; \\ 0, & L < x < 2L; \end{cases} \quad \varepsilon = 0,001;$$

$$\rho = \begin{cases} \rho_1, & 0 < x < L; \\ \rho_2, & L < x < 2L; \end{cases} \quad u(x, t = 0) = 0.$$

Граничные условия:

$$u(x = 0, t) = 0; \quad u(x = 2L, t) = 0.$$

Профиль нормального напряжения в момент времени $t = 0,1$ представлен на рис. 3. Расчет с хорошей точностью воспроизводит амплитуды и длины отраженной и преломленной волн. Вместе с тем в ДМ отсутствует счетная диссипация, что приводит к появлению слабой немонотонности вблизи разрывов.

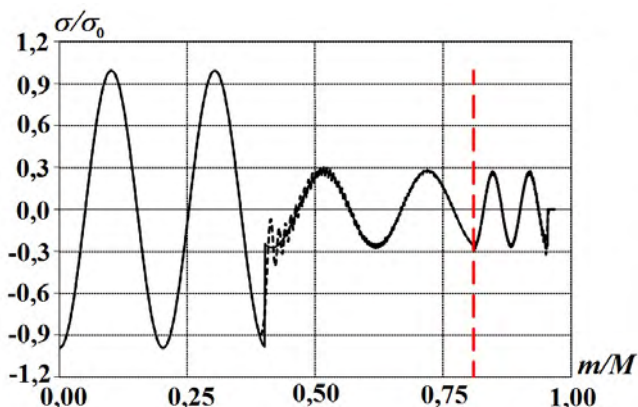


Рис. 3. Профили нормального напряжения в задаче о взаимодействии гармонической волны с контактной границей Fe–Be, $N = 2000$: - - - расчет ДМ; — эталонное решение; - - - положение контактной границы

6.3. Сферически-симметричная расходящаяся упругая волна. Счетная область: $r^0 < |x| < r_1$, $r^0 < |y| < r_1$, $r^0 < |z| < r_1$, $r^0 = 1$, $r_1 = 40$. Граничные условия задаются на гранях внутреннего куба: $(|x| = r^0; |y| = r^0; |z| = r^0)$:

$$w_x(x, y, z, t) = \frac{x}{r}w(r, t); \quad w_y(x, y, z, t) = \frac{y}{r}w(r, t); \quad w_z(x, y, z, t) = \frac{z}{r}w(r, t).$$

Параметры источника: $T = 1$; $\omega = 2\pi$; $w_0 = 0,01$. Конечное время счета $t = 4$.

Профили радиальных компонент смещения и скорости приведены на рис. 4. В качестве амплитуды скорости выбрана величина, связанная с параметрами источника: $u_0 = w_0\omega$. В силу сферической симметрии все параметры течения зависят от одной пространственной координаты $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, поэтому на приведенных графиках нанесены значения сеточных функций для всех частиц.

Растровые картины в нелинейной шкале (шпирен-визуализация) изображены на рис. 5, 6. Оттенки серого цвета в шпирен-визуализации соответствуют величине $S = 0,8 \exp(-5|\vec{u}|/|\vec{u}|_{\max})$.

Отметим хорошее сохранение сферической симметрии в представленном расчете.

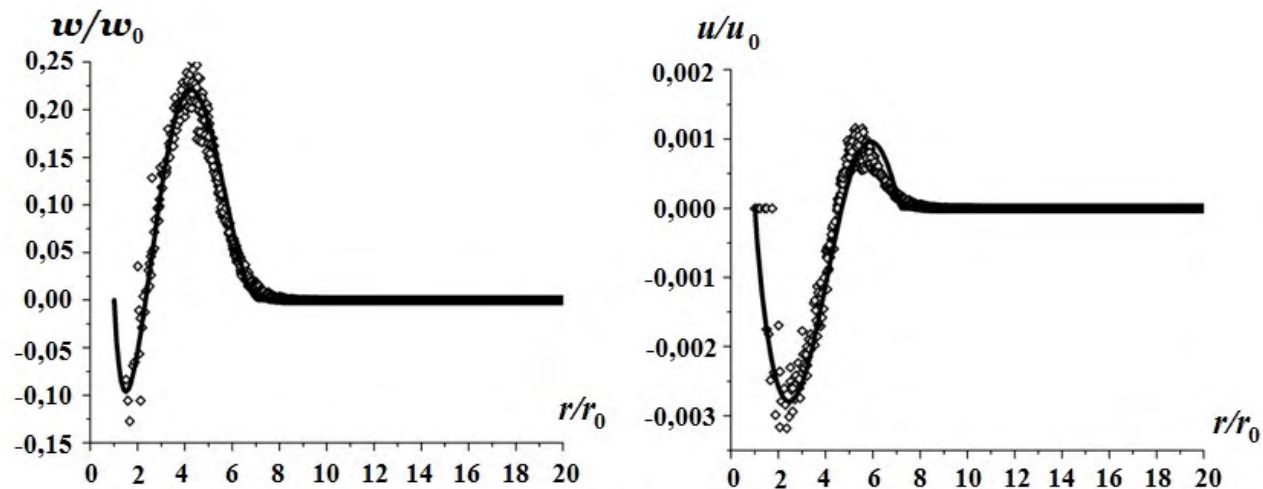
Заключение

Достоинствами метода, основанного на дискретной гамильтоновой динамике, являются:

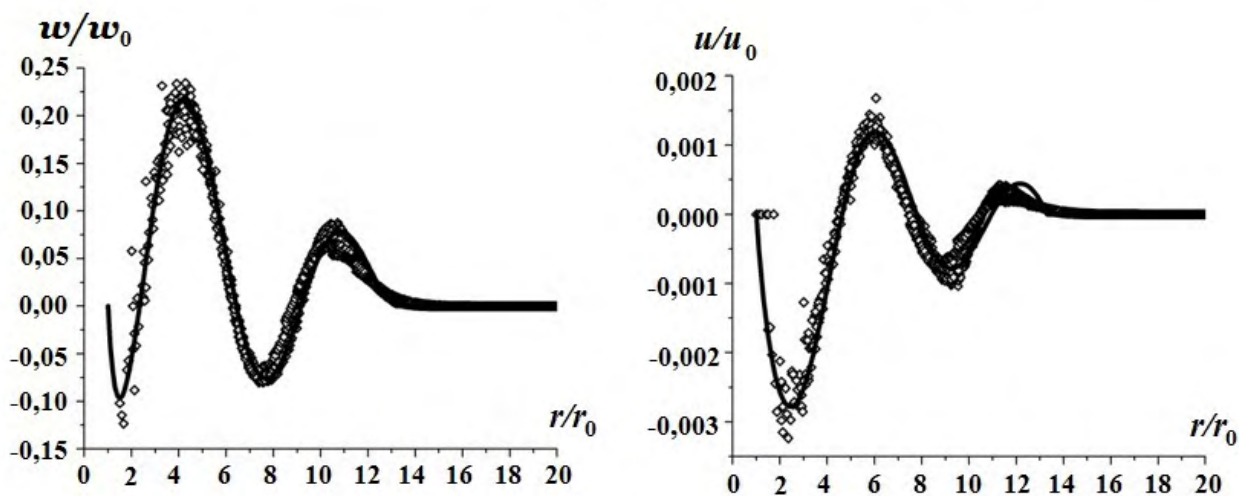
- отсутствие неопределенностей, возникающих при решении задач, содержащих разрывы и нарушение сплошности;
- отсутствие проблем, связанных с генерацией высококачественных расчетных сеток, так как метод является бессеточным;
- отсутствие этапов, связанных с корректировкой и перестроением расчетных сеток в результате сильных деформаций и изменения геометрии;
- наличие независимых арифметических вычислений, позволяющих рассчитывать на высокую эффективность использования GPU.

Список литературы

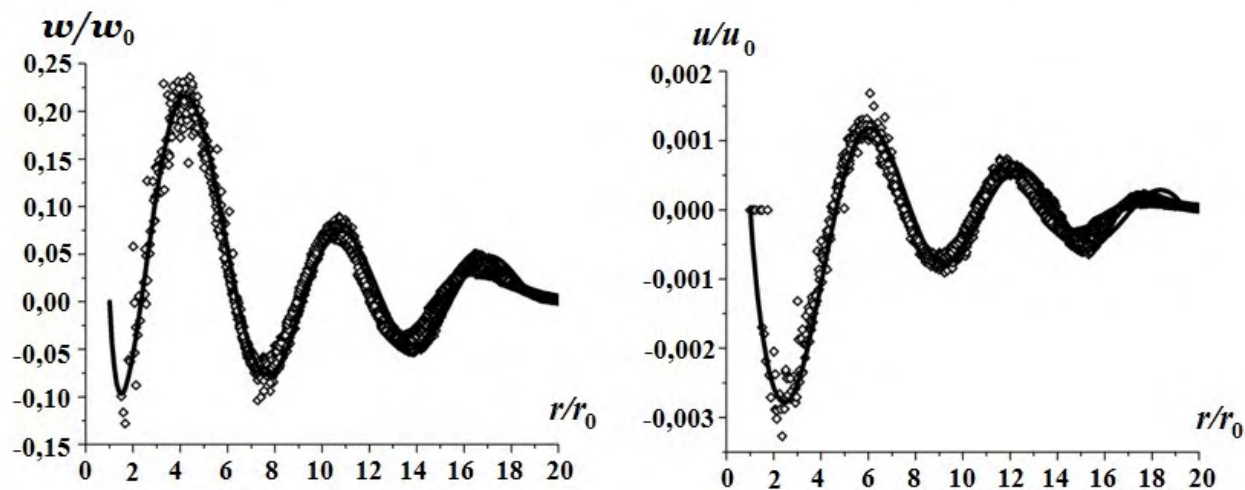
1. *Gingold R. A., Monaghan J. J.* Kernel estimates as a basis for general particle methods in hydrodynamics // J. Comp. Phys. 1982. Vol. 82. P. 1–15.
2. *Silling S. A., Epton M., Weckner O., Xu J., Ascory E.* Peridynamic states and constitutive modeling // J. Elasticity. 2007. Vol. 88. P. 151–184.
3. *Пискунов В. Н., Давыдов И. А.* Метод кластерной динамики и его применение в задачах импульсного нагружения твердых тел // Деформация и разрушение материалов. 2008. № 1. С. 3–9.
Piskunov V. N., Davydov I. A. Metod klasternoy dinamiki i ego primenenie v zadachakh impulsnogo nagruzheniya tverdykh tel // Deformatsiya i razrushenie materialov. 2008. № 1. S. 3–9.
4. *Псахье С. Г., Остермайер Г. П., Дмитриев А. И., Шилько Е. В., Смолин А. Ю., Коростелёв С. Ю.* Метод подвижных клеточных автоматов как новое направление дискретной вычислительной механики. I. Теоретическое описание // Физическая мезомеханика. 2000. Т. 3, № 2. С. 5–13.
Psakhye S. G., Ostermayer G. P., Dmitriev A. I., Shilko E. V., Smolin A. Yu., Korostelyev S. Yu. Metod podvizhnykh kletochnykh avtomatov kak novoe napravlenie diskretnoy vychislitel'noy mekhaniki. I. Teoreticheskoe opisanie // Fizicheskaya mezomekhanika. 2000. T. 3, № 2. S. 5–13.
5. *Надарейшвили А. И., Петушков В. А.* Моделирование нелинейной динамики гамильтоновых систем в биомеханике с использованием образов компьютерной томографии // Математическое моделирование. 2014. Т. 26, № 1. С. 109–121.
Nadareyshvili A. I., Petushkov V. A. Modelirovanie nelineynoy dinamiki gamiltonovykh sistem v biomekhanike s ispolzovaniem obrazov kompyuternoy tomografii // Matematicheskoe modelirovanie. 2014. T. 26, № 1. S. 109–121.



a



б



в

Рис. 4. Профили смещения (слева) и скорости (справа): а — $t = 1$; б — $t = 2$; в — $t = 3$; \diamond — расчет ДМ; — — эталонное решение

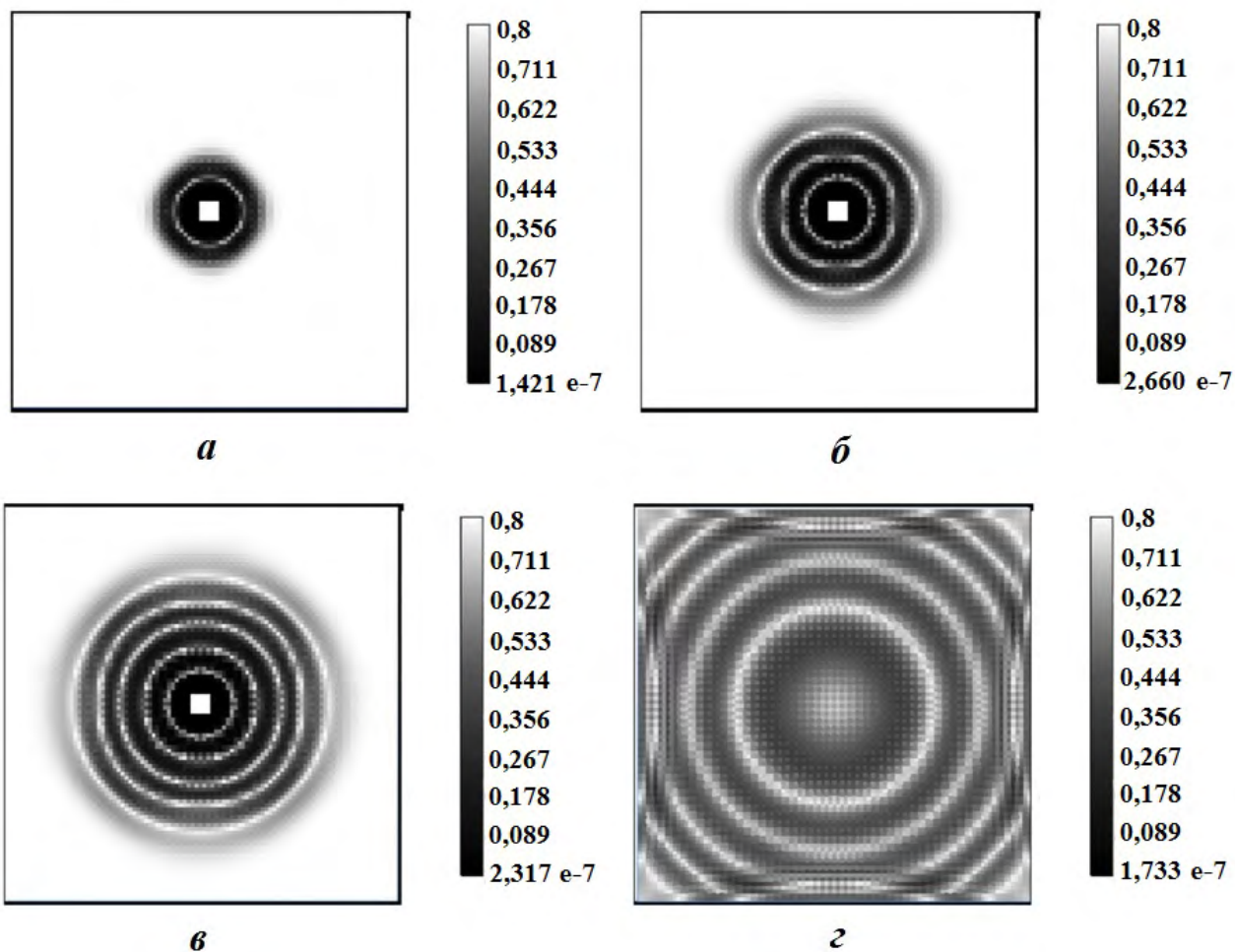


Рис. 5. Растровая картина модуля скорости (шпирен-визуализация в плоскости $z = 0$) в задаче со сферически-симметричной расходящейся упругой волной, $N = 1030274$: $a - t = 1$; $б - t = 2$; $в - t = 3$; $г - t = 4$

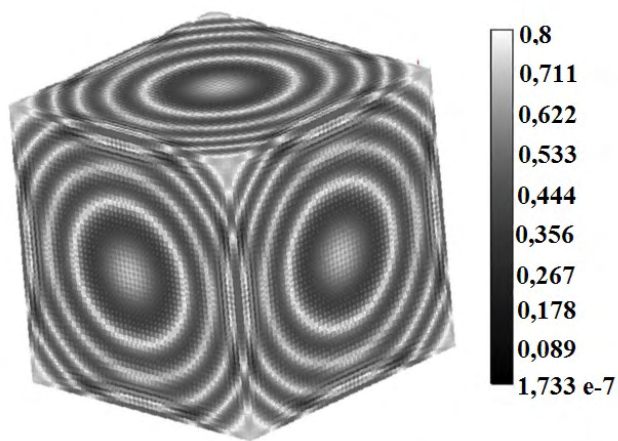


Рис. 6. Растровая картина модуля скорости (шпирен-визуализация на внешней поверхности куба) в задаче со сферически-симметричной расходящейся упругой волной, $t = 4$

6. Франкель Д., Смит Б. Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем. М.: Научный мир, 2013.
Frankel D., Smit B. Printsipy kompyuternogo modelirovaniya molekulyarnykh sistem. M.: Nauchny mir, 2013.
7. Анисимов А. Н., Грушин С. А., Воронин Б. Л., Копкин С. В., Ерофеев А. М., Дёмин Д. А., Дёмина М. А., Здорова М. В., Ветчинников М. В., Еричева Н. С., Коваленко Н. О., Крючков И. А., Кечин А. Г., Дегтярёв В. А., Урм В. Я. Комплекс программ молекулярно-динамического моделирования (MoDyS). Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2010614974 // Электронный бюллетень. 2010. http://www.fips.ru/wps/wcm/connect/content_ru/ru.
Anisimov A. N., Grushin S. A., Voronin B. L., Kopkin S. V., Erofeev A. M., Dyemin D. A., Dyemina M. A., Zdorova M. V., Vetchinnikov M. V., Elicheva N. S., Kovalenko N. O., Kryuchkov I. A., Kechin A. G., Degtyaryev V. A., Urm V. Ya. Kompleks programm molekulyarno-dinamicheskogo modelirovaniya (MoDyS). Svidetelstvo o gosudarstvennoy registratsii programmy dlya EVM № 2010614974 // Elektronny byulleten. 2010. http://www.fips.ru/wps/wcm/connect/content_ru/ru.
8. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория упругости. Теоретическая физика. Т. VII. М.: Наука, 1987.
Landau L. D., Lifshits E. M. Teoriya uprugosti. Teoreticheskaya fizika. T. VII. M.: Nauka, 1987.
9. Куликовский А. Г., Свешникова Е. И. Нелинейные волны в упругих средах. М.: Московский лицей, 1998.
Kulikovskiy A. G., Sveshnikova E. I. Nelineynye volny v uprugikh sredakh. M.: Moskovskiy litsey, 1998.
10. Блэнд Д. Р. Нелинейная динамическая теория упругости. М.: Мир, 1972.
Blend D. R. Nelineynaya dinamicheskaya teoriya uprugosti. M.: Mir, 1972.
11. Седов Л. И. Механика сплошной среды. М.: Наука, 1994.
Sedov L. I. Mekhanika sploshnoy sredy. M.: Nauka, 1994.
12. Арнольд В. И. Математические методы классической механики. М.: Наука, 1979.
Arnold V. I. Matematicheskie metody klassicheskoy mekhaniki. M.: Nauka, 1979.
13. Самарский А. А., Попов Ю. А. Разностные методы решения задач газовой динамики. М.: Наука, 1992.
Samarskiy A. A., Popov Yu. A. Raznostnye metody resheniya zadach gazovoy dinamiki. M.: Nauka, 1992.
14. Сурис Ю. Б. О сохранении симплектической структуры при численном решении гамильтоновых систем // Численное решение обыкновенных дифференциальных уравнений. М.: ИПМ АН СССР, 1988. С. 148—160.
Suris Yu. B. O sokhranenii simplekticheskoy struktury pri chislennom reshenii gamiltonovykh sistem // Chislennoe reshenie obyknovennykh differentsialnykh uravneniy. M.: IPM AN SSSR, 1988. S. 148—160.
15. Sanz-Serna J. M. Runge—Kutta schemes for Hamiltonian system // BIT. 1988. Vol. 22, No 4. P. 877—883.
16. Еленин Г. Г., Шляхов П. И. Геометрическая структура пространства параметров трехстадийных симплектических методов Рунге—Кутты // Математическое моделирование. 2011. Т. 23, № 5. С. 16—34.
Elenin G. G., Shlyakhov P. I. Geometricheskaya struktura prostranstva parametrov trekhstadiynykh simplekticheskikh metodov Runge—Kutty // Matematicheskoe modelirovanie. 2011. T. 23, № 5. S. 16—34.
17. Verlet L. Computer "experiments" on classical fluids. Thermodynamical properties of Lennard—Jones molecules // Phys. Rev. 1967. Vol. 159, No 1. P. 98—103.

18. Софронов В. Н., Шемарулин В. Е. Классификация явных трехстадийных симплектических разностных схем численного решения натуральных гамильтоновых систем. Сравнительное исследование схем высокого порядка на задачах молекулярной динамики // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 2016. Т. 56, № 45. С. 551–571.
Sofronov V. N., Shemarulin V. E. Klassifikatsiya yavnykh trekhstadiynykh simplekticheskikh raznostnykh skhem chislennoy resheniya naturalnykh gamiltonovykh sistem. Sravnitelnoye issledovanie skhem vysokogo poryadka na zadachakh molekulyarnoy dinamiki // Zhurnal vychisl. mat. i mat. fiz. 2016. T. 56, № 45. S. 551–571.
19. Shemarulin V. E., Sofronov V. N. Three — stage symplectic difference schemes for molecular dynamics. Description, classification, analytical and numerical investigation // Proc. of the 10th Seminar on New Models and Hydro-codes for Shock Wave Processes on Condensed Matter. Pardubice, Czech Republic. July 27 — August 1, 2014. P. 125–137.
20. Sofronov V. N., Shemarulin V. E., Vetchinnikov M. V. High-order symplectic difference schemes for numerical solution of natural Hamiltonian system. Applications to molecular dynamics and continuum mechanics problems // Horizons in World Physics. 2019. Vol. 301. P. 1–79.
21. Candy J., Rozmus W. A symplectic integration algorithm for separable Hamiltonian function // J. Comp. Phys. 1991. Vol. 92. P. 230–256.
22. Софронов В. Н., Мокина К. С., Шемарулин В. Е. Разностные схемы молекулярной динамики. 1. Сравнительный анализ точности, устойчивости и экономичности // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2011. Вып. 2. С. 18–32.
Sofronov V. N., Mokina K. S., Shemarulin V. E. Raznostnye skhemy molekulyarnoy gazovoy dinamiki. 1. Sravnitelny analiz tochnosti, ustoychivosti i ekonomichnosti // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoye modelirovaniye fizicheskikh protsessov. 2011. Vyp. 2. S. 18–32.
23. Silling S. A., Lehoucq R. B. Convergence of Peridynamics to Classical Elasticity Theory. Report SAND 2007-7242. Sandia National Laboratories, 2007.
24. Madenci E., Oterkus E. Peridynamics. Theory and its Applications. New York: Springer, 2014.
25. Бондаренко Ю. А., Софронов В. Н. Взаимодействие звука с границей разных веществ в разностных схемах одномерной лагранжевой газовой динамики. Зависимость точности счета от способов согласования сетки // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2015. Вып. 2. С. 12–27.
Bondarenko Yu. A., Sofronov V. N. Vzaimodeystvie zvuka s granitseyy raznykh veshchestv v raznostnykh skhemakh odnomernoy lagranzhevoy gazovoy dinamiki. Zavisimost tochnosti scheta ot sposobov soglasovaniya setki // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoye modelirovaniye fizicheskikh protsessov. 2015. Vyp. 2. S. 12–27.
26. Бондаренко Ю. А. Консервативное расщепление уравнения энергии в разностных схемах типа "крест" для лагранжевой газодинамики // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1997. Т. 37, № 8. С. 1020–1023.
Bondarenko Yu. A. Konservativnoye rasshchepleniye uravneniya energii v raznostnykh skhemakh tipa "krest" dlya lagranzhevoy gazodinamiki // Zhurnal vychisl. mat. i mat. fiz. 1997. T. 37, № 8. S. 1020–1023.

Статья поступила в редакцию 13.05.20.

USE OF HAMILTONIAN DYNAMICS METHODS IN COMPUTATIONAL CONTINUUM MECHANICS / V. N. Sofronov, M. V. Vetchinnikov, M. A. Dyemina (FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, Nizhniy Novgorod region).

The paper presents a computational continuum mechanics method based on discrete Hamiltonian dynamics. Hamilton's equations are numerically solved using symplectic difference schemes. Examples of dissipation-free process simulations are provided.

Keywords: discrete Hamiltonian dynamics, phase volume, symplectic difference schemes, dynamic elasticity problems, MoDyS software package.
