**Уравнения для дискретных моделей**

На слайде приведены общий вид ДУ и системы уравнений в частных производных.

Решение таких уравнений требует применения двух численных методов: конечно-разностного для разрешения по времени и конечно-элементного для разрешения по пространственной переменной. С учетом того, что правые части (которые в общем виде занесены в аргументы функционала) зачастую являются нелинейными, а поставленные задачи жесткими, многократно возрастает сложность применения численных методов в решении этих задач.

В задачах, где применяется дискретизация модели, она часто замещает использование МКЭ. В результате получается обыкновенные ДУ. Но проблемы решения жестких задач с высокой вычислительной сложностью при этом сохраняются

**Гравитационная задача N тел**

Для $N>3$ аналитическое решение не существует. При этом численное интегрирование сталкивается с проблемами

1. При сближении тел возникает необходимость в уменьшении шага интегрирования (очевидно, что достаточно сближения только двух тел);
2. При уменьшении шага интегрирования возможен рост ошибки;
3. Число «прямого» вычисления сил => моделирование систем из сотен тысяч тел становится «неподъемным» для компьютера.

В более сложном случае тела имеют внутреннюю структуру, при чем она влияет на структуру жидкости

Например, в объеме воды 100 нм^3 содержится порядка 30 млн частиц.

**Вода**

Слайд составлен на примере статьи Д.Ф. Марьин, В.Л. Малышев и др. «Ускорение молекулярно-динамических расчетов с помощью быстро метода мультиполей и графических процессоров» // Вычислительные методы и программирование 2013. Т. 14 стр 483.

Особенность этой модели(TIP4P) заключается в том, что расположение частицы, имеющей отрицательный заряд (чаще всего обозначается M), не совпадает с положением кислорода, а лежит на биссектрисе угла H–O–H.

**Ускорение**

Слайд составлен на примере статьи Д.Ф. Марьин, В.Л. Малышев и др. «Ускорение молекулярно-динамических расчетов с помощью быстро метода мультиполей и графических процессоров» // Вычислительные методы и программирование 2013. Т. 14 стр 483.

**Уравнения МСС**

Уравнения, описывающие сплошные среды тоже представимы в виде ДУ в частных производных. Но в отличие от дискретных сред «не решать» уравнение относительно пространственных переменных нельзя.

При этом, необходимо сказать о том, что решение динамических задач серьезно увеличивает время вычислений.

**Метод конечных элементов (FEM)**

В дополнение стоит сказать, что есть огромное число критериев и параметров, которым необходимо удовлетворить, чтобы МКЭ корректно работал. Например, условие совместности деформаций требует, чтобы вершины соседних элементов совпадали, иначе базисная функция будет разрывной. А это эквивалентно образованию трещины. Граничные условия, накладываемые на конструкцию должны исключать ее перемещение, как жесткого целого (например, в методе сосредоточенных параметров/динамики частиц это требование отсутствует). А некоторые задачи требуют осторожного выбора метода решения, т.к. ,например, метод Ритца требует потенциальности всех сил, входящих в систему.

**Преимущества и недостатки**

В работе Чернявского А. О. «Метод конечных элементов. Основы практического применения.» показано, что не только точность решения, но и само решение зависит от выбора сетки и базисных функций. Так же указано, что из трех видов ошибок: дискретизации, ошибками вызванными подбором базисной функции и ошибками округления, где только ошибка дискретизации может быть гарантированно уменьшена.

**Submodeling**

Помимо данного метода существуют численные методы, ускоряющие вычисления компонент матриц жесткости и нагрузок.

Наличие сингулярности в напряжениях ожидается, метод позволяет подтвердить ее наличие.

Начальный расчет производится для всей модели. Но уже на втором шаге можно «отделить» выбранные для подробного изучения области. При этом не исключено снижение суммарного числа степеней свободы

**Аппаратные средства**

Слайд составлен на примере статьи Д.Ф. Марьин, В.Л. Малышев и др. «Ускорение молекулярно-динамических расчетов с помощью быстро метода мультиполей и графических процессоров» // Вычислительные методы и программирование 2013. Т. 14 стр 483.