

ОБРАБОТКА АКУСТИЧЕСКИХ СИГНАЛОВ.  
КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

УДК 534.8

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ УЛЬТРАЗВУКОВЫХ ИЗЛУЧАТЕЛЕЙ МЕТОДОМ  
ОБРАЩЕНИЯ СИГНАЛА ВО ВРЕМЕНИ В МОДЕЛИ  
ДИНАМИКИ ЧАСТИЦ

© 2023 г. Д. Я. Суханов<sup>a</sup>, \*, А. Е. Кузовова<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Томский государственный университет, пр. Ленина 36, Томск, 634050 Россия

\*e-mail: sdy@mail.tsu.ru

Поступила в редакцию 18.11.2020 г.

После доработки 13.05.2023 г.

Принята к публикации 22.06.2023 г.

Предлагается метод решения обратной задачи восстановления источников акустических волн по измерениям поля на некоторой поверхности на основе обращения волнового фронта в методе динамики частиц. В этом методе рассматриваемая среда представляется в виде совокупности взаимодействующих частиц (материальных точек или твердых тел), для которых записываются классические уравнения движения. В работе рассматривается представление среды в виде множества частиц в кубической объемно-центрированной кристаллической решетке. Рассматривается случай линейной зависимости силы притяжения частиц от расстояния. Преимуществом такого подхода является возможность учета распространения волн в произвольно неоднородных средах в рамках единой численной модели. Численно и экспериментально показана возможность визуализации двух сферических источников акустических волн в воде за преградой, несмотря на наличие поперечных волн в рассматриваемой модели твердого тела; их влияние пренебрежимо мало в рассматриваемом случае. Проведена экспериментальная проверка предложенного метода на звуконепроницаемом экране с отверстием, имитирующим звукоизлучающий объект сложной формы. Через отверстие проходит волна от точечного источника коротких импульсов. С помощью приемного акустического сенсора, установленного на двухкоординатном сканере, было измерено пространственно-временное распределение звуковых колебаний на поверхности воды. При обработке данных путем обращения волнового фронта в модели частиц, было восстановлено изображение отверстия в звуконепроницаемом экране.

**Ключевые слова:** обращение времени, множество частиц, кубическая объемно-центрированная кристаллическая решетка, звукоизлучающий объект, метод динамики частиц

**DOI:** 10.31857/S0320791923600762, **EDN:** APFQPU

ВВЕДЕНИЕ

Задача восстановления источников акустических волн возникает в дефектоскопии, исследовании океана [1–4], медицинской диагностике [5]. Исходными данными при решении подобных задач, как правило, являются акустические сигналы, измеренные во множестве точек пространства.

Подход на основе синтеза аппретуры для визуализации плоских источников в воздухе рассмотрен в работе [6]. Такой подход нетребователен к вычислительным ресурсам, но применим только для однородных сред. Широкое распространение для решения подобных обратных задач получил метод временного обращения волн (BOB) [7–14]. Чтобы осуществить временное обращение волн, необходимо в принятом сигнале изменить направление хода времени на обратное, а затем из-

лучить его в ту же среду из области измерений. Использование данного метода позволяет осуществлять фокусировку полей, применяемую, например, в активной локации.

Для решения задачи восстановления источника методом численного моделирования, вычисляются сигналы, распространяемые обратно в среду из тех точек, где они были приняты, с изменением направления хода времени на отрицательный. В результате происходит синфазное сложение волн обратного распространения именно в той точке, где находился источник, что позволяет его обнаружить по соответствующему максимуму поля. Если источник излучает произвольный широкополосный сигнал, то обработка может быть дополнена методом согласованной фильтрации.

Метод обращения времени для волновых процессов позволяет получать изображение источ-

ников с точностью до неизлучающих конфигураций [15, 16] в неоднородных средах с известными характеристиками среды, в которой находится источник. Данный метод позволяет учитывать только поля однородных волн. Задача восстановления источников является обратной задачей и, в общем случае, некорректной. Как правило, требуется априорная информация для однозначной интерпретации получаемых изображений, например, источники могут считаться точечными. Для повышения разрешения необходимо увеличивать апертуру измерительной системы, а в пределе поверхность измерения должна полностью охватывать поле излучения. Для минимизации уровня боковых лепестков или артефактов необходимы измерения поля с шагом менее половины длины волны. Благодаря учету неоднородностей и границ раздела сред при решении обратной задачи повышается эффективность фокусировки поля. В работе [10] была теоретически рассмотрена возможность применения метода обращения волнового фронта при нелинейном рассеянии плоской звуковой волны на пульсирующей сфере. В работах [9, 14] был применен метод временного обращения волн для задач распространения волн в мелком море. Метод временного обращения волн находит также применение и в задачах измерения коэффициента акустического поглощения в образцах биологических тканей [17]. В работе [3] метод временного обращения волн был применен для локализации неоднородностей в упругой пластине. Возможность обнаружения неоднородности в среде и определения ее размеров в настоящее время является актуальной задачей в неразрушающем ультразвуковом контроле. В работе [18] возможность обратимости волнового процесса во времени была применена для восстановления распределения нормальной скорости и акустического давления на поверхности излучателя.

В рассмотренных выше работах метод временного обращения волн применялся для рассмотрения среды как непрерывной. Однако в настоящее время все более актуальной становится концепция уменьшения размеров объектов. Развитие нанотехнологий привело к необходимости оценивать характеристики объектов, состоящих всего из нескольких слоев атомов. Таким образом, становится актуальной проблема рассмотрения объектов на микроуровне, основываясь на дискретных методах. Для аналитического и численного описания процессов, происходящих в телах с микроструктурой, удобно воспользоваться методом динамики частиц, состоящим в представлении тела как совокупности взаимодействующих материальных точек (или твердых тел), движущихся согласно классическим уравнениям динамики и заданным законам взаимодействия между частицами [19]. Одним из наиболее хорошо разработанных вариантов этого метода является ме-

тод молекулярной динамики [20]. В классической молекулярной динамике поведение отдельной частицы описывается уравнениями движения Ньютона [21, 22]. Преимущество такого подхода по сравнению с методами, основанными на концепции сплошной среды, заключается в том, что он требует значительно меньше априорных предположений о свойствах материала. Возможен учет таких сложных эффектов, как пластичность, образование трещин, разрушение, температурное изменение свойств материала, фазовые переходы [23]. Для описания каждого из этих эффектов в рамках сплошной среды требуется отдельная теория, в то время как при моделировании методом динамики частиц эти эффекты получаются автоматически, в результате интегрирования уравнений движения.

По сути, в рамках молекулярной динамики применяются одни и те же уравнения движения (уравнения движения Ньютона) для описания различных агрегатных состояний вещества. Различные свойства среды, включая агрегатные состояния и анизотропию, определяются зависимостью силы взаимодействия (притяжения или отталкивания) от расстояния между частицами (производная потенциала Леннарда–Джонса) и их взаимной ориентацией. Например, если сила притяжения стремится к нулю на больших расстояниях, а на малых расстояниях возникает сила отталкивания, то модель описывает газообразную среду. Для твердого тела характерно наличие равновесного расстояния между частицами, и если частицы отдаляются, возникает сила притяжения, а если сближаются, то возникает сила отталкивания, что, в итоге, позволяет стабилизировать кристаллические структуры. Для жидких сред рассматриваются слабые силы притяжения, позволяющие преодолевать потенциальную яму вблизи равновесного расстояния и менять порядок размещения частиц. В работе [24] рассматривалось применение метода молекулярной динамики для моделирования процесса диффузии жидкости в пористом твердом теле. Метод молекулярной динамики нашел применение при моделировании скорости образования кристаллов в переохлажденной жидкости [25]. Парринелло и Раман в [26, 27] показали возможность моделирования различных кристаллических решеток за счет изменения потенциала взаимодействия частиц.

Ранее уже предпринимались попытки моделировать акустические процессы на основе метода молекулярной динамики. Например, исследование рассеяния акустических фононов на неоднородных включениях, встроенных в анизотропную среду, было проведено в работе [28]. Представлено сравнение решения, полученного методом молекулярной динамики, и решения в рамках модели сплошной среды. С увеличением размера неодно-

родности различие между вариантами решений уменьшается. В работе [29] предложен метод моделирования акустических процессов на основе динамики частиц с продольным взаимодействием в объемно-центрированной кубической решетке. Показана возможность его применения для оценки спектра колебаний титанового акустического волновода и проведено сравнение с экспериментальными результатами.

Используемые при моделировании частицы не обязательно представляют собой атомы или молекулы, они могут рассматриваться как элементы более высокого масштабного уровня, описываемые как материальные точки. Несмотря на это, часто используется традиционное название метод «молекулярной динамики», однако в данном случае более правильно говорить о методе динамики частиц. В методе динамики частиц рассматриваемая среда представляется в виде совокупности взаимодействующих материальных точек, для которых записываются классические уравнения движения. Взаимодействие частиц описывается посредством силы взаимодействия, основным свойством которой является отталкивание при сближении и притяжение при удалении [19].

В данной работе мы предлагаем на основе метода динамики частиц реализовать моделирование волновых процессов и с применением метода обращения времени реализовать восстановление источников звука в неоднородных средах. Новизна предлагаемого подхода заключается в том, что метод динамики частиц применен для расчета обращенных во времени акустических процессов, что позволяет визуализировать источники акустических волн. Вместе с этим, предложен метод представления согласованной границы в рамках данной модели. В данной работе непосредственно задана сила продольного и поперечного взаимодействия между частицами в виде линейной функции. Такой подход справедлив при восстановлении источников в линейных средах.

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

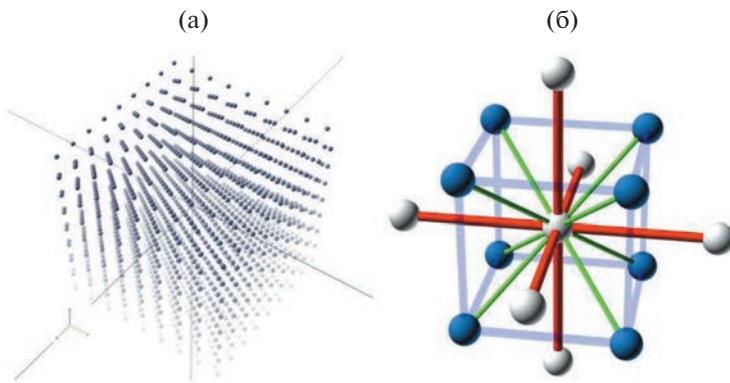
Представим твердое тело в виде множества частиц, упорядоченных в кубической объемно-центрированной кристаллической решетке [30]. Схематически рассматриваемая решетка изображена на рис. 1. Каждая частица описывает конечный объем среды, а взаимодействие между частицами описывается силой, обеспечивающей устойчивость кристаллической решетки. Если расстояние между частицами равно равновесному (периоду решетки), то сила притяжения между частицами равна нулю. Сила притяжения становится положительной, если частицы удаляются, и отрицательной, если частицы сближаются. Кроме того, для описания широкого класса изотропных и анизотропных сред дополнительно вводится по-

речная сила, возникающая при отклонении текущей частицы от прямой линии, соединяющей две противолежащие соседние частицы. В рассматриваемой объемно-центрированной кристаллической решетке частицы располагаются периодически в вершинах и в центрах элементарных кубических ячеек (рис. 1б). При рассмотрении частиц в вершинах куба элементарной ячейки расстояние между частицами равно  $d$ . На расстоянии  $d$  каждая частица имеет 6 ближайших соседей («осевые соседи»). Расстояние между частицами в центре куба и частицами на вершинах равно  $d\sqrt{3}/2$ ; на данном расстоянии каждая частица имеет 8 ближайших соседей («диагональные соседи»). Взаимодействуют только ближайшие частицы, и всего в данной решетке у каждой частицы может быть не больше 14 соседей (6 на расстоянии  $d$  и 8 на расстоянии  $d\sqrt{3}/2$ ). На рис. 1б широкими линиями показаны взаимодействия с 6 «осевыми соседями», а тонкими – с 8 «диагональными соседями». Для упрощения вычислений поперечную силу взаимодействия будем рассматривать только для «осевых соседей». Распространение волн в такой структуре происходит за счет последовательной передачи сдвиговых возмущений от частицы к частице. Аналогичные волновые возмущения характерны не только для сдвигов, но и для скоростей частиц.

Рассмотрим простейший одномерный случай с линейной зависимостью силы притяжения частиц от расстояния вида  $F = k(x - R)$ , где  $R$  – равновесное расстояние между частицами,  $k$  – коэффициент упругости. При этом считаем, что между собой взаимодействуют только ближайшие частицы. Линейная зависимость применяется для минимизации искажений спектра сигнала при решении обратной задачи восстановления источников. Поскольку мы рассматриваем волновые процессы, а распространение волн в средах, как правило, описывается линейным волновым уравнением, то применение линейной зависимости оправдано. Коэффициент  $k$  определяется скоростью звука  $c$ , массой частиц  $m$  и равновесным расстоянием между частицами  $R$ :  $k = c^2 m / R^2$ . Данное решение следует из сведения одномерной модели взаимодействующих частиц к волновому уравнению. Рассмотрим силы, действующие на одну частицу вдоль оси  $x$ , и запишем уравнение движения частицы:

$$m \frac{\partial^2 X(x, t)}{\partial t^2} = \\ = k(X(x - R, t) - 2X(x, t) + X(x + R, t)), \quad (1)$$

где  $X(x, t)$  – смещение частицы в момент времени  $t$  вдоль оси  $x$  ( $x$  – координата частицы в невозмущенном состоянии);  $X(x - R, t)$  – сдвиг соседней



**Рис. 1.** (а) – Пример размещения частиц в кубической объемно-центрированной решетке и (б) – визуализация связей с соседними частицами.

частицы, находящейся в позиции  $x - R$ ;  $X(x + R, t)$  – сдвиг соседней частицы, находящейся в позиции  $x + R$ . Приближенно можно записать:  $X(x - R, t) - 2X(x, t) + X(x + R, t) \approx R^2 \frac{\partial^2 X}{\partial x^2}$ .

Следовательно,  $m \frac{\partial^2 X(x, t)}{\partial t^2} = kR^2 \frac{\partial^2 X}{\partial x^2}$ , что является формой волнового уравнения где скорость звука определяется выражением  $1/c^2 = m/(kR^2)$ , следовательно,  $c = R\sqrt{k/m}$ , а  $k = \frac{c^2 m}{R^2}$ . С помощью последнего выражения можно задать ключевой параметр предлагаемой модели  $k$  через скорость звука  $c$  и плотность среды  $\rho$ . Плотность среды и масса частиц связаны соотношением:  $m = \rho d^3/2$ ; где  $d$  – шаг размещения частиц в сетке ( $d^3$  – объем куба, деление на 2 вызвано тем, что есть частицы в центре каждого куба, что удваивает общее количество частиц). Из представленного рассуждения видно, что предложенная модель эквивалентна решению волнового уравнения при устремлении расстояния между частицами к нулю.

Аналогичное рассуждение можно провести для трехмерной задачи и получить волновое уравнение для рассматриваемой кристаллической ре-

шетки. Представим пространственные сдвиги каждой частицы из равновесного состояния в виде векторной функции  $\mathbf{U}(x, y, z)$ , где  $(x, y, z)$  – невозмущенные координаты рассматриваемой частицы. Получим волновое уравнение для рассматриваемой модели взаимодействия частиц в приближении малых отклонений от равновесного состояния. Запишем суммарный вектор силы, действующей на рассматриваемую частицу со стороны соседних частиц, включая продольные и поперечные силы, в виде:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_1 + \mathbf{F}_2 + \mathbf{F}_3, \quad (2)$$

где  $\mathbf{F}_1$  – сила, действующая со стороны “осевых соседей”,  $\mathbf{F}_2$  – сила, действующая со стороны “диагональных соседей”,  $\mathbf{F}_3$  – поперечная сила, действующая со стороны двух противолежащих “осевых соседей”:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_1 = & k_1((\mathbf{U}(x+d, y, z) - 2\mathbf{U}(x, y, z) + \\ & + \mathbf{U}(x-d, y, z))\mathbf{e}_x)\mathbf{e}_x + k_1((\mathbf{U}(x, y+d, z) - \\ & - 2\mathbf{U}(x, y, z) + \mathbf{U}(x, y-d, z))\mathbf{e}_y)\mathbf{e}_y + \\ & + k_1((\mathbf{U}(x, y, z+d) - 2\mathbf{U}(x, y, z) + \\ & + \mathbf{U}(x, y, z-d))\mathbf{e}_z)\mathbf{e}_z, \end{aligned} \quad (3)$$

где  $\mathbf{e}_x = (1, 0, 0)$ ;  $\mathbf{e}_y = (0, 1, 0)$ ;  $\mathbf{e}_z = (0, 0, 1)$ ;  $k_1$  – коэффициент упругости для “осевых частиц”;

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_2 = & k_2 \left[ \left( \left( \mathbf{U}\left(x + \frac{d}{2}, y + \frac{d}{2}, z + \frac{d}{2}\right) - 2\mathbf{U}(x, y, z) + \mathbf{U}\left(x - \frac{d}{2}, y - \frac{d}{2}, z - \frac{d}{2}\right) \right) \mathbf{n}_1 \right) \mathbf{n}_1 \right] + \\ & + k_2 \left[ \left( \left( \mathbf{U}\left(x - \frac{d}{2}, y + \frac{d}{2}, z + \frac{d}{2}\right) - 2\mathbf{U}(x, y, z) + \mathbf{U}\left(x + \frac{d}{2}, y - \frac{d}{2}, z - \frac{d}{2}\right) \right) \mathbf{n}_2 \right) \mathbf{n}_2 \right] + \\ & + k_2 \left[ \left( \left( \mathbf{U}\left(x + \frac{d}{2}, y - \frac{d}{2}, z + \frac{d}{2}\right) - 2\mathbf{U}(x, y, z) + \mathbf{U}\left(x - \frac{d}{2}, y + \frac{d}{2}, z - \frac{d}{2}\right) \right) \mathbf{n}_3 \right) \mathbf{n}_3 \right] + \\ & + k_2 \left[ \left( \left( \mathbf{U}\left(x + \frac{d}{2}, y + \frac{d}{2}, z - \frac{d}{2}\right) - 2\mathbf{U}(x, y, z) + \mathbf{U}\left(x - \frac{d}{2}, y - \frac{d}{2}, z + \frac{d}{2}\right) \right) \mathbf{n}_4 \right) \mathbf{n}_4 \right], \end{aligned} \quad (4)$$

где

$$\mathbf{n}_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}(1,1,1), \quad \mathbf{n}_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}(-1,1,1), \\ \mathbf{n}_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}(1,-1,1), \quad \mathbf{n}_4 = \frac{1}{\sqrt{3}}(1,1,-1);$$

$k_2$  – коэффициент упругости для “диагональных соседей”;

$$\mathbf{F}_3 = \begin{bmatrix} k_3(U_x(x,y,z+d) - 2U_x(x,y,z) + U_x(x,y,z-d)) \\ k_3(U_y(x,y,z+d) - 2U_y(x,y,z) + U_y(x,y,z-d)) \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} k_3(U_x(x,y+d,z) - 2U_x(x,y,z) + U_x(x,y-d,z)) \\ 0 \\ k_3(U_z(x,y+d,z) - 2U_z(x,y,z) + U_z(x,y-d,z)) \end{bmatrix} + \\ + \begin{bmatrix} 0 \\ k_3(U_y(x+d,y,z) - 2U_y(x,y,z) + U_y(x-d,y,z)) \\ k_3(U_z(x+d,y,z) - 2U_z(x,y,z) + U_z(x-d,y,z)) \end{bmatrix}, \quad (5)$$

где  $k_3$  – коэффициент поперечного взаимодействия для “осевых соседей”.

В общем случае поперечная сила  $\mathbf{F}_3$  вычисляется по координатам двух противолежащих частиц и рассматриваемой частицы:

$$\mathbf{F}_3 = (k_3 \mathbf{a} \mathbf{e}_1 + k_3 \mathbf{b} \mathbf{e}_1) \mathbf{e}_1,$$

где

$$\mathbf{e}_1 = [\mathbf{e}_3, \mathbf{e}_2]; \quad \mathbf{e}_2 = \frac{\mathbf{V}_2 - \mathbf{V}_1}{|\mathbf{V}_2 - \mathbf{V}_1|}; \\ \mathbf{e}_3 = \frac{[\mathbf{V}_2, \mathbf{V}_1]}{[\mathbf{V}_2, \mathbf{V}_1]}; \quad \mathbf{a} = (\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_0), \\ \mathbf{b} = (\mathbf{V}_2 - \mathbf{V}_0);$$

$\mathbf{V}_0$  – координаты рассматриваемой частицы;  $\mathbf{V}_1$  – координаты соседней осевой частицы;  $\mathbf{V}_2$  – координаты противолежащей к  $\mathbf{V}_1$  соседней частицы.

Заметим, что в формулы (3)–(5) входят комбинации вида

$$\mathbf{U}(x + n_x R, y + n_y R, z + n_z R) - 2\mathbf{U}(x, y, z) + \\ + \mathbf{U}(x - n_x R, y - n_y R, z - n_z R),$$

где  $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$  – единичный вектор, описывающий направление на соседнюю частицу;  $R$  – расстояние от текущей частицы до соседней. При устремлении расстояния между частицами к нулю ( $R \rightarrow 0$ ) данная комбинация может быть приближенно выражена через вторую производную по направлению:

$$\mathbf{U}(x + n_x R, y + n_y R, z + n_z R) - 2\mathbf{U}(x, y, z) + \\ + \mathbf{U}(x - n_x R, y - n_y R, z - n_z R) \approx R^2 \frac{\partial^2 \mathbf{U}}{\partial n^2},$$

следовательно, в приближении  $R \rightarrow 0$  силу, действующую на частицу можно записать в виде:

$$\mathbf{F} = (F_x, F_y, F_z), \quad (6)$$

где

$$F_x = \frac{\partial^2 U_x}{\partial x^2} \left( k_1 + \frac{k_2}{3} \right) d^2 + \left( \frac{\partial^2 U_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 U_x}{\partial z^2} \right) \times \\ \times \left( k_3 + \frac{k_2}{3} \right) d^2 + \left( \frac{\partial^2 U_y}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 U_z}{\partial x \partial z} \right) \frac{2}{3} k_2 d^2, \quad (7a)$$

$$F_y = \frac{\partial^2 U_y}{\partial y^2} \left( k_1 + \frac{k_2}{3} \right) d^2 + \left( \frac{\partial^2 U_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U_y}{\partial z^2} \right) \times \\ \times \left( k_3 + \frac{k_2}{3} \right) d^2 + \left( \frac{\partial^2 U_x}{\partial y \partial x} + \frac{\partial^2 U_z}{\partial y \partial z} \right) \frac{2}{3} k_2 d^2, \quad (7b)$$

$$F_z = \frac{\partial^2 U_z}{\partial z^2} \left( k_1 + \frac{k_2}{3} \right) d^2 + \left( \frac{\partial^2 U_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 U_z}{\partial x^2} \right) \times \\ \times \left( k_3 + \frac{k_2}{3} \right) d^2 + \left( \frac{\partial^2 U_x}{\partial z \partial x} + \frac{\partial^2 U_y}{\partial z \partial y} \right) \frac{2}{3} k_2 d^2. \quad (7b)$$

Далее рассмотрим второй закон Ньютона, например для  $x$  компоненты силы:

$$F_x = m \frac{\partial^2 U_x}{\partial t^2},$$

где  $m = \rho d^3 / 2$  – масса частицы.

С учетом второго закона Ньютона, выражение (7a) принимает вид канонического волнового уравнения для твердого тела [30]:

$$\rho \frac{\partial^2 U_x}{\partial t^2} = \left( k_1 + \frac{k_2}{3} \right) d \frac{2}{3} \frac{\partial^2 U_x}{\partial x^2} + \\ + \left( k_3 + \frac{k_2}{3} \right) d \left( \frac{\partial^2 U_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 U_x}{\partial z^2} \right) + \frac{4k_2}{3d} \left( \frac{\partial^2 U_y}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 U_z}{\partial x \partial z} \right). \quad (8)$$

Из уравнения (8) можно записать модули упругости:

$$\begin{aligned} C_{11} &= \left( k_1 + \frac{k_2}{3} \right) \frac{2}{d}; \quad C_{44} = \left( k_3 + \frac{k_2}{3} \right) \frac{2}{d}; \\ C_{12} + C_{44} &= \frac{4k_2}{3d}. \end{aligned} \quad (9)$$

Из полученных модулей упругости в выражении (9) вычисляются коэффициенты модели  $k_1$ ,  $k_2$ ,  $k_3$ :

$$\begin{aligned} k_1 &= \frac{d}{4} (2C_{11} - C_{12} - C_{44}); \\ k_2 &= \frac{3}{4} d (C_{12} + C_{44}); \quad k_3 = \frac{d}{4} (C_{44} - C_{12}). \end{aligned} \quad (10)$$

Отсюда можно заключить, что предложенная модель распространения волн сводится к каноническому волновому уравнению для сплошной среды в приближении малых отклонений и при устремлении шага решетки к нулю.

Выражение (8) может быть преобразовано к волновому уравнению для изотропной жидкости. Для этого достаточно положить  $k_2 = 0$ ,  $k_1 = k_3$ , тогда получим:

$$\frac{\partial^2 U_x}{\partial t^2} = \frac{2k_1}{\rho d} \left( \frac{\partial^2 U_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 U_x}{\partial z^2} \right). \quad (11)$$

В данном случае скорость звука в жидкости определяется выражением:  $c = \sqrt{\frac{2k_1}{\rho d}}$ .

Полученные формулы (8) и (9) показывают, что предложенная модель частиц является достаточно универсальной и может описывать волновые процессы как в твердых изотропных и анизотропных средах, так и в жидких средах. Свойства среды определяются значениями коэффициентов  $k_1$ ,  $k_2$  и  $k_3$ , на основе их связи с упругими модулями (9)–(10).

Известно, что при численном решении волнового уравнения или уравнения Гельмгольца [23] требуется выбирать шаг пространственной сетки много меньше длины волны  $\lambda$ , как правило, выбирается шаг менее  $\lambda/6$ . Предположим, что для модели динамики частиц справедливо аналогичное требование и целесообразно выбрать  $d < \lambda/6$ . Шаг по времени  $\Delta t$  предлагается выбирать исходя из условия Куранта  $c\Delta t < d$  [31].

Траектории частиц рассчитываются согласно уравнениям движения с шагом по времени  $\Delta t$  на основе выражения:

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(t)\Delta t + \frac{\mathbf{a}\Delta t^2}{2}, \quad (12)$$

где  $\mathbf{v}(t + \Delta t) = \mathbf{v}(t) + \mathbf{a}\Delta t$ ,  $\mathbf{r}(t)$  – радиус вектор координат частиц в момент времени  $t$ ,  $\mathbf{a} = \mathbf{F}/m$  – ускорение частицы;  $\mathbf{F}$  – сила, действующая на

рассматриваемую частицу со стороны соседних частиц (2);  $\mathbf{r}_n$  – радиус вектор координаты соседних частиц.

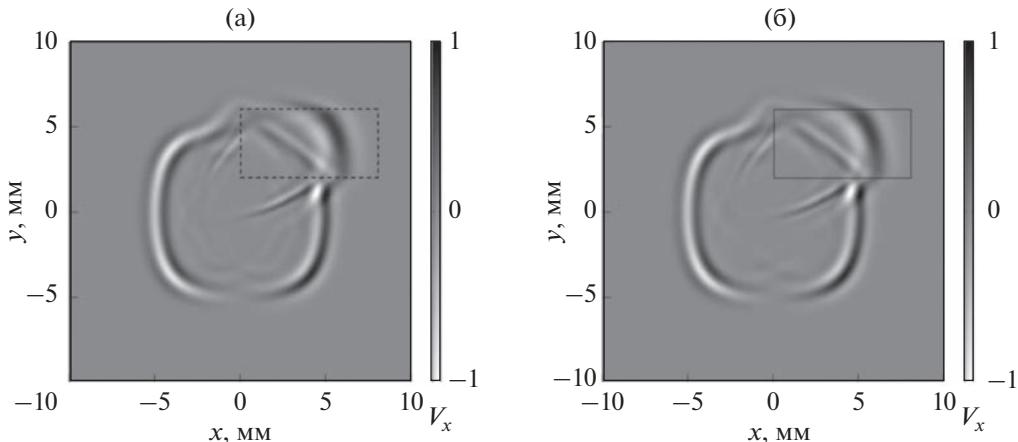
В данной модели частицы являются материальными точками без вращательных степеней свободы. Каждая частица описывает некий конечный объем среды определенной массы. Несмотря на то, что рассматриваемая модель исходит из представления вещества в виде кристаллической решетки, замена атомов укрупненными частицами считается справедливой для длин волн много больше шага решетки. Частица описывается тремя координатами  $(x, y, z)$  в пространстве и тремя компонентами скорости  $(v_x, v_y, v_z)$ . Для каждой частицы хранятся в памяти номера 14-и соседних с ней частиц для ускорения вычисления силы взаимодействия.

Предложенный метод численного моделирования движения частиц в кристаллической решетке реализован на основе технологии параллельных вычислений Open MP. Распараллеливание алгоритма возможно благодаря независимому вычислению положения каждой частицы в следующий момент времени.

Для численного моделирования среда распространения волн была задана в виде параллелепипеда высотой 20 мм, шириной 20 мм и толщиной 6.4 мм. Шаг решетки  $d$  задан равным 50 мкм, шаг по времени  $\Delta t = 2.5$  нс. В качестве моделируемой среды рассматривался кристалл германия ( $C_{11} = 128.4$  ГПа,  $C_{12} = 48.3$  ГПа,  $C_{44} = 66.7$  ГПа, плотность 5327 кг/м<sup>3</sup>) с вставкой в виде прямоугольного объекта размерами 8 × 4 мм из кремния плотностью 2329 кг/м<sup>3</sup> с соответствующими коэффициентами модели  $C_{11} = 165.7$  ГПа,  $C_{12} = 63.9$  ГПа,  $C_{44} = 79.6$  ГПа. Коэффициенты модели вычислялись по формуле (10). В качестве источника задавалось начальное возмущение в виде изотропного цилиндрического расширения материала в центре с огибающей в виде функции Гаусса с шириной 200 мкм. На рис. 2а представлен результат моделирования распространения волн на основе динамики частиц (горизонтальная компонента скорости частиц). Для проверки достоверности результатов моделирования аналогичные расчеты проведены в программе COMSOL Multiphysics 5.3a: Solid Mechanics, Linear Elastic Material, Solid model – Anisotropic с прямоугольной сеткой с шагом 20 мкм. Наблюдается распространение волны, рассеяние на неоднородности, эффект преломления в неоднородном включении из кремния.

Можно видеть, что результаты моделирования на рис. 2а и рис. 2б качественно совпадают, что подтверждает возможность применения предложенного подхода для моделирования распространения волн.

В рамках модели частиц возможна реализация согласованной границы. Например, допускается



**Рис. 2.** Распределение горизонтальной компоненты скорости частиц для короткого импульса в пластине германия с неоднородным прямоугольным включением из кремния. (а) – Метод динамики частиц, (б) – COMSOL Multiphysics 5.3a: Solid Mechanics, Linear Elastic Material, Solid model – Anisotropic.

адаптация известного подхода на основе идеально-согласованного слоя (Perfect Matching Layer PML). Необходимо выделить около границы определенный слой среды, в котором реализовано плавное нарастание коэффициента поглощения  $\mu$  при приближении к внешней границе среды. Методы PML хорошо изучены для волнового уравнения [32–36]. Учет затухания колебаний в рамках модели частиц целесообразно ввести как силу “трения” и переписать силу, действующую на частицу (2) в виде  $\mathbf{F} = \mathbf{F}_1 + \mathbf{F}_2 + \mathbf{F}_3 - \mu\mathbf{v}$ , где  $\mu\mathbf{v}$  – сила “трения”;  $\mu$  – коэффициент поглощения, описывающий затухание движения;  $\mathbf{v}$  – скорость частицы относительно центра масс. Однако такой подход требует выделения дополнительного множества частиц и приведет к увеличению объема вычислений.

Предлагается другой подход для реализации согласованной границы, не требующий увеличения объема среды. Рассмотрим нормальное падение плоской волны, распространяющейся противоположно оси  $x$  на плоскую границу  $YOZ$  при  $x = 0$ . Сдвиги частиц опишем векторной функцией

$$\mathbf{U}(x, y, z, t) = \mathbf{g}\left(t + \frac{x}{c}\right), \quad (13)$$

где  $\mathbf{g}(t)$  – функция, описывающая сигнал источника плоской волны,  $c$  – скорость распространения волны.

По сути, в ходе численного моделирования, в линейном приближении, проводится вычисление силы, действующей на частицу, по значениям координат частиц  $\mathbf{U}(x, t)$  на дискретной сетке (8) в виде:

$$\mathbf{F} = k([\mathbf{U}(x + d, t) - \mathbf{U}(x, t)] - [\mathbf{U}(x, t) - \mathbf{U}(x - d, t)]). \quad (14)$$

Однако на границе  $x = 0$  второе слагаемое не может быть вычислено, поскольку величина  $\mathbf{U}(x - d, t)$  не определена. Предлагается в (14) отдельно рассмотреть слагаемое  $[\mathbf{U}(x, t) - \mathbf{U}(x - d, t)]$  при  $x = 0$ , которое приближенно выражается через первую пространственную производную в точке  $x = -d/2$ :

$$(\mathbf{U}(0, t) - \mathbf{U}(-d, t)) \approx d \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \Big|_{x=-d/2}.$$

С учетом (13) можно записать:

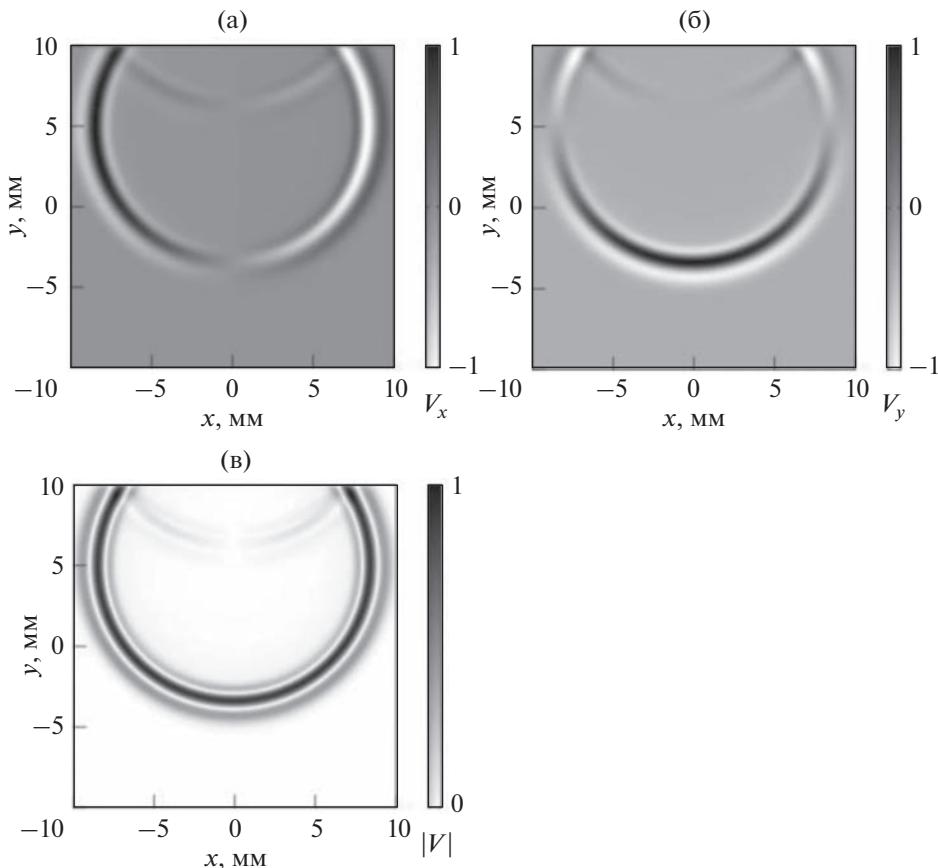
$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \Big|_{x=-d/2} &= \frac{\partial \mathbf{g}(t + x/c)}{\partial x} \Big|_{x=-d/2} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{g}(t')}{\partial t'} \Big|_{t'=t-d/2c} = \\ &= \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{U}(0, t')}{\partial t'} \Big|_{t'=t-d/2c} = \frac{1}{c} \mathbf{v} \left( t - \frac{d}{2c} \right), \end{aligned} \quad (15)$$

где  $\mathbf{v}\left(t - \frac{d}{2c}\right)$  – скорость пограничной частицы, находящейся в точке  $x = 0$ , в момент времени  $t' = t - \frac{d}{2c}$ . Из (15) следует, что на границе  $x = 0$ :

$$\mathbf{F} \approx k \left[ (\mathbf{U}(x + d, t) - \mathbf{U}(x, t)) - \frac{d}{c} \mathbf{v} \left( t - \frac{d}{2c} \right) \right]. \quad (16)$$

В рассматриваемой модели на пограничную частицу будет действовать только сила со стороны соседней частицы, находящейся в положении  $x > 0$ , что описывается первым слагаемым в (16). Второе слагаемое необходимо внести дополнительно в виде силы трения пропорциональной скорости пограничной частицы, действующей с запаздыванием по времени  $\frac{d}{2c}$ :

$$\mathbf{F}_e = -\frac{kd}{c} \mathbf{v} \left( t - \frac{d}{2c} \right). \quad (17)$$



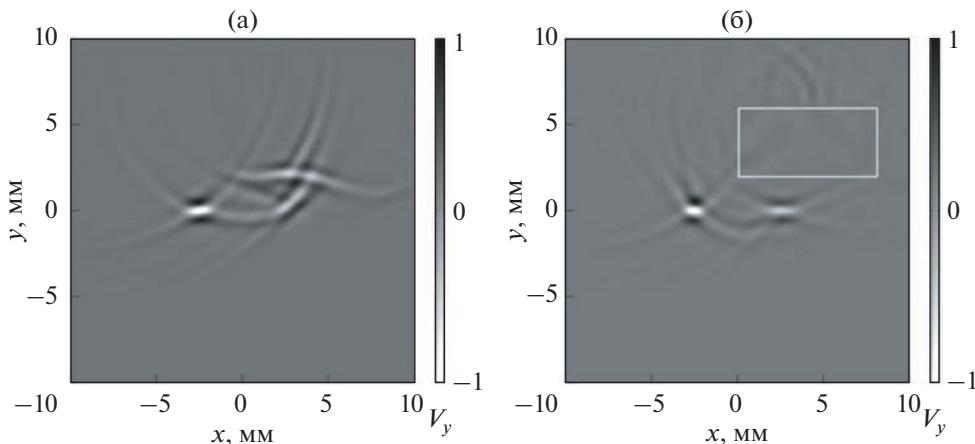
**Рис. 3.** Моделирование согласованной границы. Показано поле скоростей цилиндрической волны в жидкости. (а) – Компонента скорости по оси  $x$ , (б) – компонента скорости по оси  $y$ , (в) – модуль вектора скорости. При нормальном падении волна не отражается.

В итоге, для моделирования согласованной границы необходимо хранить в памяти скорости пограничных частиц в интервале времени  $\frac{d}{2c}$ . Предложенный подход почти не увеличивает количество вычислений, а только требует выделения дополнительной памяти. Данный метод применим для волн, падающих по нормали; для волн, падающих под углом, будут возникать отраженные волны малой амплитуды.

Проверка предлагаемой реализации согласованной границы была проведена путем моделирования распространения цилиндрической волны в жидкости со скоростью звука 1400 м/с для источника с сигналом в виде биполярного импульса длительностью 0.5 мкс. Источник располагался в точке ( $x = 0, y = 5$  мм), шаг решетки  $d = 0.1$  мм. На рис. 3 представлено поле скоростей цилиндрической волны после падения на верхнюю согласованную границу. Можно видеть, что часть волнового фронта с нормальным падением на границу не отразилась, но при увеличении угла падения возникает отраженное поле. Тем не менее, амплитуда отраженной волны значительно меньше амплитуды падающей.

## ВОССТАНОВЛЕНИЕ ИСТОЧНИКОВ

Предлагается решение обратной задачи, основанное на обращении времени, что должно обеспечить восстановление исходного состояния системы частиц к моменту внесения источников. Если задать координаты и скорости всех частиц, то возможно восстановить их исходное состояние во все предыдущие моменты времени и обнаружить место возникновения источника возмущения. На практике невозможно измерить координаты и скорости всех частиц в объеме, но возможно проводить измерения продолжительное время для некоторых участков на поверхности исследуемого объекта. Рассмотрим измерение одной из компонент скоростей частиц, распределенных на плоской поверхности, в течение продолжительного времени. Для восстановления скоростей и координат частиц в прошлые моменты времени предлагается рассмотреть изначально невозмущенную среду и внести в нее возмущения координат частиц, находящихся на плоскости измерений, согласно интегралу по времени от измеренной скорости частиц (с учетом того, что время отсчитывается в обратную сторону). Таким образом, реализуется обратное распространение волн



**Рис. 4.** Восстановленное изображение двух изотропных источников в неоднородной среде (а) – без учета неоднородности и (б) – с учетом неоднородности (белым прямоугольником показана неоднородность), визуализирована вертикальная компонента скорости частиц.

тем же способом численного моделирования, что и прямая задача, но здесь шаг по времени принимается отрицательным.

В нашем случае, точки приема располагаются на верхней границе объема моделирования, поэтому волна обратного распространения будет проходить сверху вниз. В точках, где находятся моделируемые излучатели в объеме среды, волны обратного распространения сходятся.

Было проведено численное моделирование двух изотропных источников в неоднородной среде. Среда распространения волн была задана в виде параллелепипеда размерами  $20 \times 20 \times 1$  мм с шагом размещения частиц 0,1 мм и шагом по времени  $\Delta t = 10$  нс. В качестве моделируемой среды рассматривалась вода (скорость звука 1440 м/с, плотность 1000 кг/м<sup>3</sup>). Неоднородность представляла собой параллелепипед размерами  $4 \times 2 \times 1$  мм и затеняла один из источников цилиндрических волн. Скорость звука в материале неоднородного включения была задана равной 2880 м/с, а плотность 500 кг/м<sup>3</sup>, для согласования с водой. В центре области моделирования располагались два источника цилиндрических волн, находящихся на расстоянии 5 мм друг от друга. Источники в начальный момент времени синхронно излучали короткий биполярный импульс длительностью 250 нс. В ходе решения прямой задачи записывалось пространственное распределение вертикальной компоненты скорости колебаний частиц на верхней границе (область измерений) в течение 15 мкс. За это время акустические импульсы продольных волн успевали дойти до области измерений.

В результате решения обратной задачи методом обращения времени без учета влияния неоднородности было получено изображение (рис. 4а),

на котором визуализируется только один источник, не перекрытый неоднородностью. После учета влияния неоднородности были визуализированы оба источника (рис. 4б). Видно, что без учета неоднородности изображение источника искажается. Изображения частиц сглажены для улучшения визуализации. Полученные изображения точечных источников имеют искажения, поскольку апертура области измерений ограничена и не охватывает все поле излучения. При этом примененный метод не позволяет восстанавливать поле неоднородных волн.

В рассматриваемом случае граница раздела среды и неоднородности имеет низкий коэффициент отражения, поэтому интенсивность восстановленного изображения затененного неоднородностью источника сравнима с интенсивностью незатененного. В целом результаты численного моделирования показывают возможность восстановления источников в неоднородной среде предложенным методом.

## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

Была проведена экспериментальная проверка возможности восстановления ультразвуковых излучателей в воде методом обратного распространения волн в модели динамики частиц. Для визуализации ультразвуковых излучателей в воде, в качестве экспериментальной установки использовался двухкоординатный сканер, на котором закреплялся приемник (рис. 5).

Ультразвуковые излучатели диаметром 10 мм с центральной частотой 200 кГц погружались в воду на глубину 55 мм. Ультразвуковой приемник крепился на двухкоординатном сканере в соответствии со схемой измерений, представленной на рис. 5. Измерение пространственного распре-

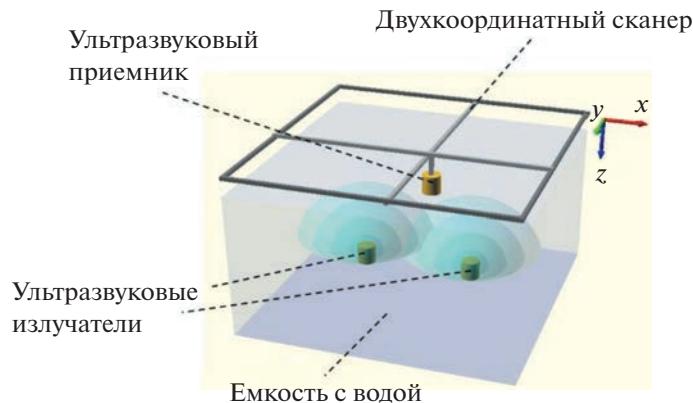


Рис. 5. Схема измерения поля ультразвуковых излучателей через воду.

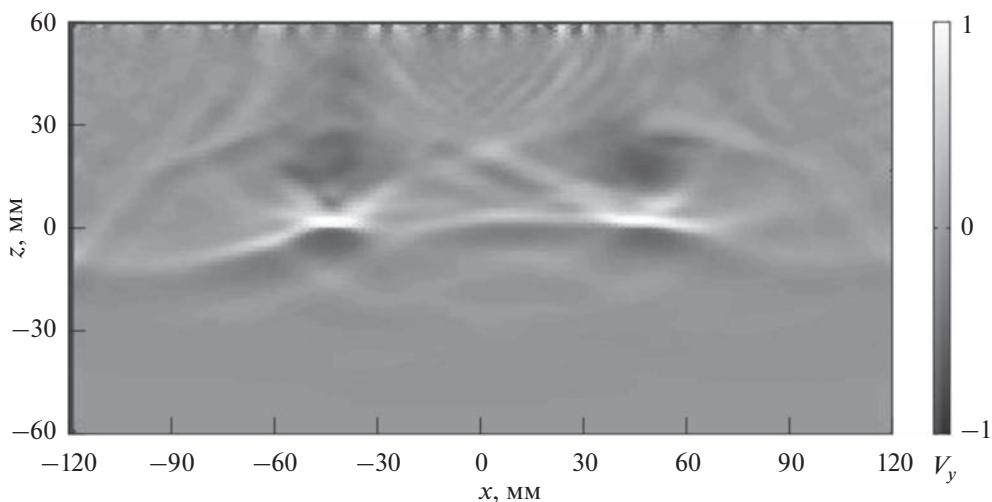


Рис. 6. Восстановленное изображение двух ультразвуковых излучателей в воде методом обращения времени в модели частиц.

деления поля проводилось на области  $240 \times 240$  мм. В качестве зондирующего сигнала применялся сверхширокополосный сигнал в диапазоне частот 60–340 кГц (по уровню 0.1 от максимальной амплитуды в спектре). Сигнал, полученный по результатам измерений, представляет собой трехмерный массив данных – сигнал в зависимости от времени и двух координат датчика на плоскости. Для решения обратной задачи измеренный в ходе эксперимента сигнал вносился в численную модель в виде возмущения координат частиц, расположенных на верхней границе расчетной области (излучателей), а направление хода времени было изменено на обратное. В области нахождения ультразвуковых излучателей волны обратного распространения сходятся, что позволяет визуализировать ультразвуковые излучатели. На рис. 6 представлен результат восстановления изображения ультразвуковых излучателей в воде методом обращения времени в модели частиц. Изображения источников искажены из-за ограниченности апертуры области измерений.

Была проведена также экспериментальная проверка возможности визуализации отверстия в звуконепроницаемом экране, имитирующем звукоизлучающий объект сложной формы в воде (рис. 7). Звуконепроницаемый экран погружался в емкость с водой (рис. 8), а под отверстием в экране на расстоянии 24.3 см от него размещался ультразвуковой излучатель. Измерение поля, рассеянного от отверстия в звуконепроницаемом экране, проводилось на области  $188 \times 188$  мм. На рис. 9 представлен результат пространственного измерения поля, дифрагированного на отверстии в звуконепроницаемом экране.

После обработки данных измерений предложенным методом было получено трехмерное поле волн обратного распространения. В момент времени 175 мкс и на глубине размещения экрана визуализируется изображение отверстия. Результат восстановления изображения отверстия в звуконепроницаемом экране представлен на рис. 10. Для более контрастного выделения изображения отверстия было проведено интегрирование квад-

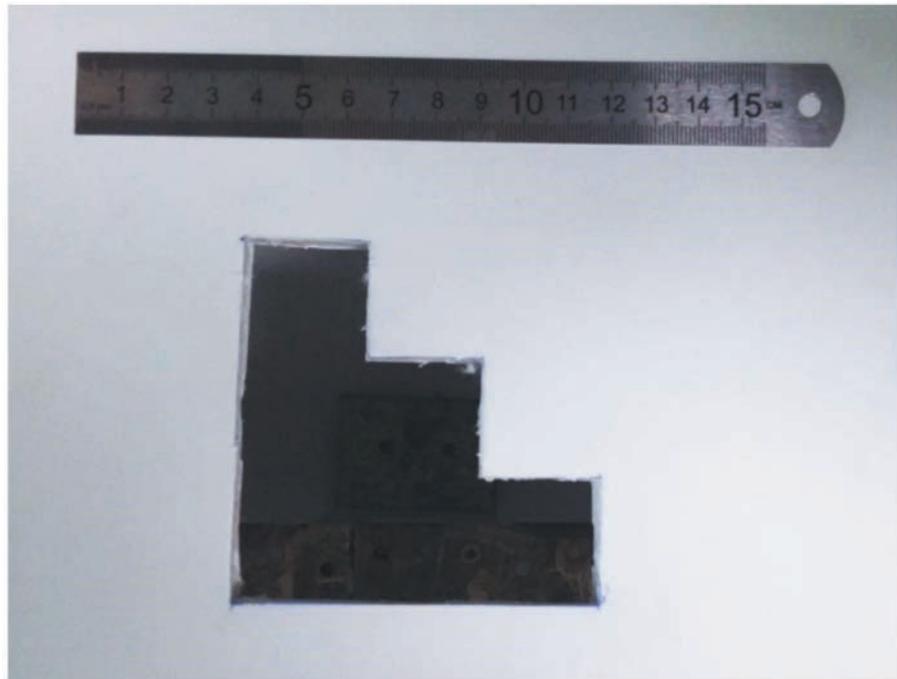


Рис. 7. Фотография отверстия в звуконепроницаемом экране, имитирующем звукоизлучающий объект сложной формы.

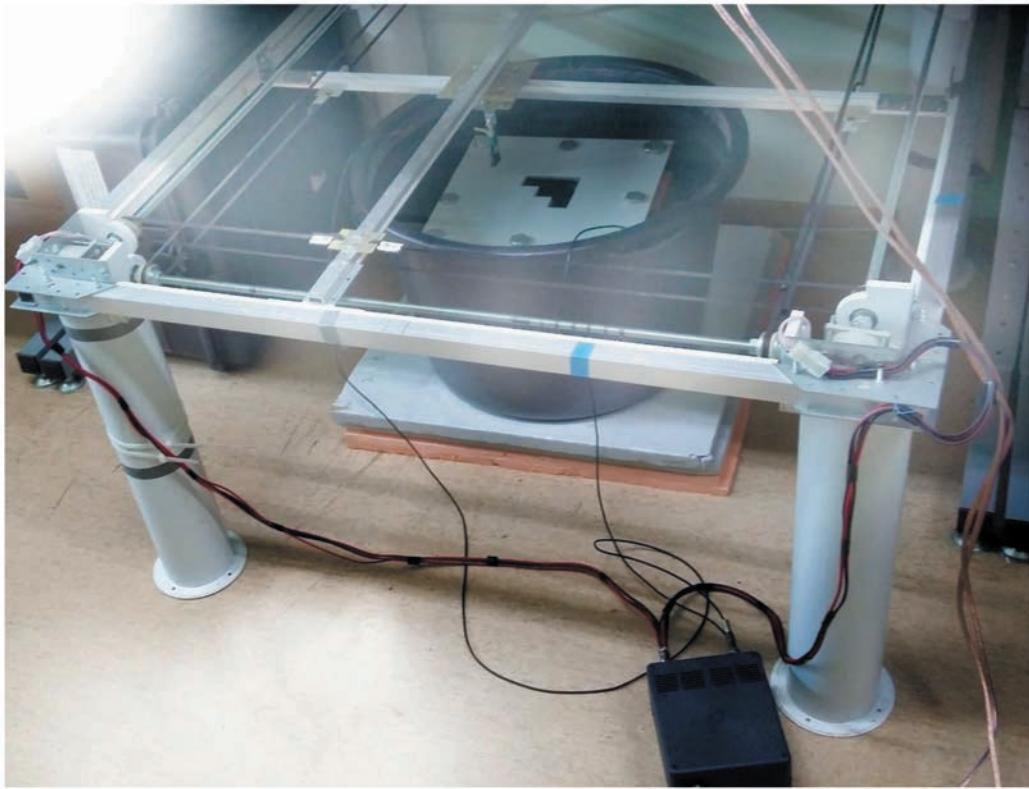


Рис. 8. Фотография эксперимента по двухкоординатному сканированию акустического поля звуконепроницаемого экрана, погруженного в воду.

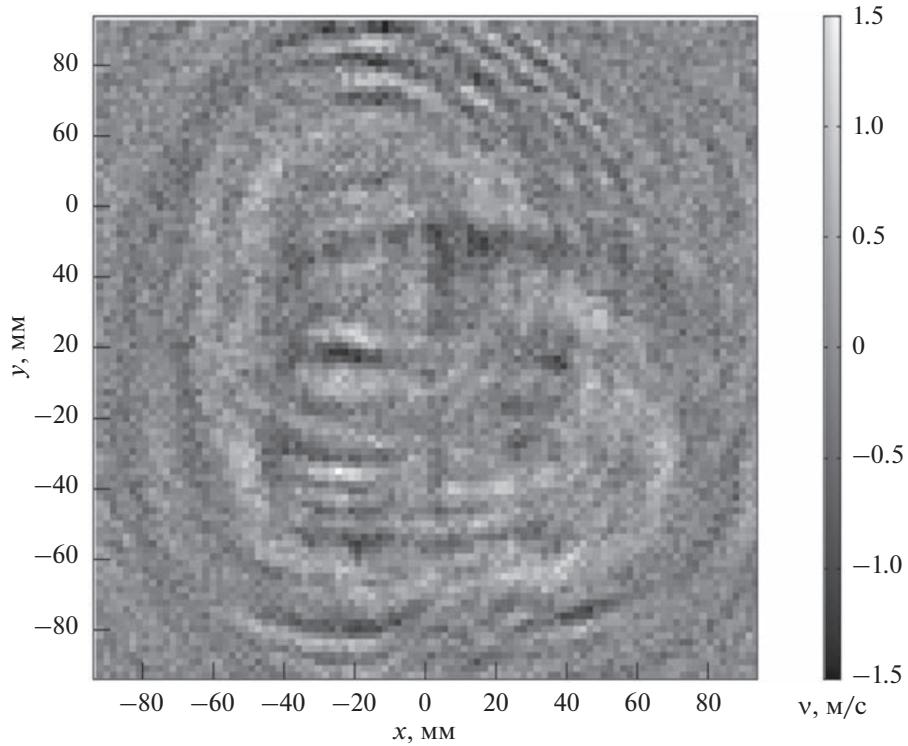


Рис. 9. Результат измерения поля, рассеянного от отверстия в звуконепроницаемом экране, в момент времени 275 мкс после начала излучения.

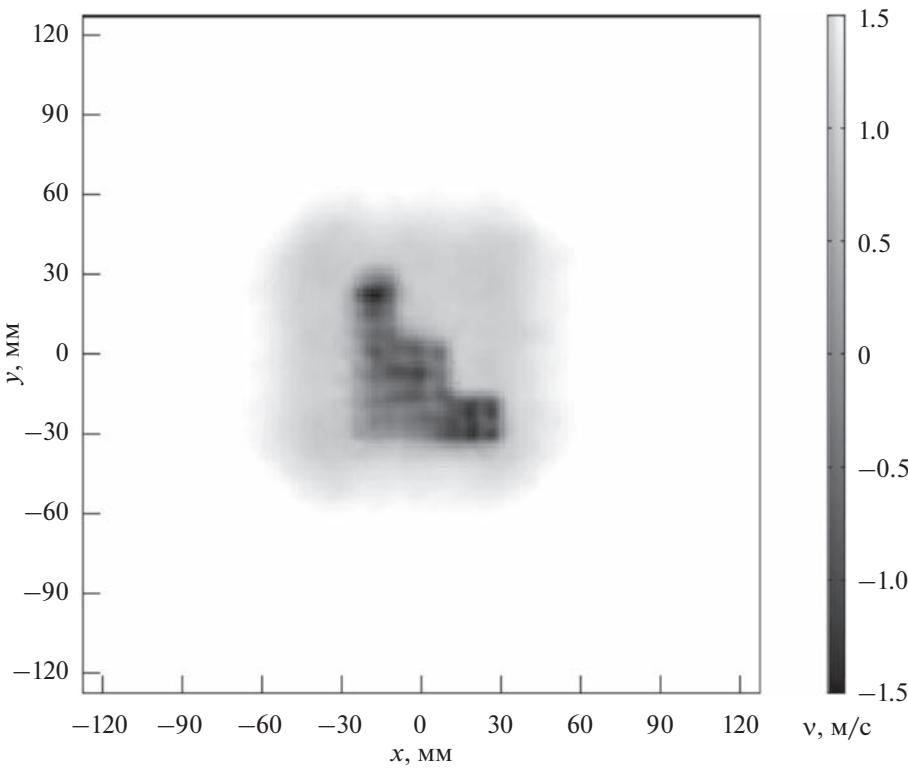
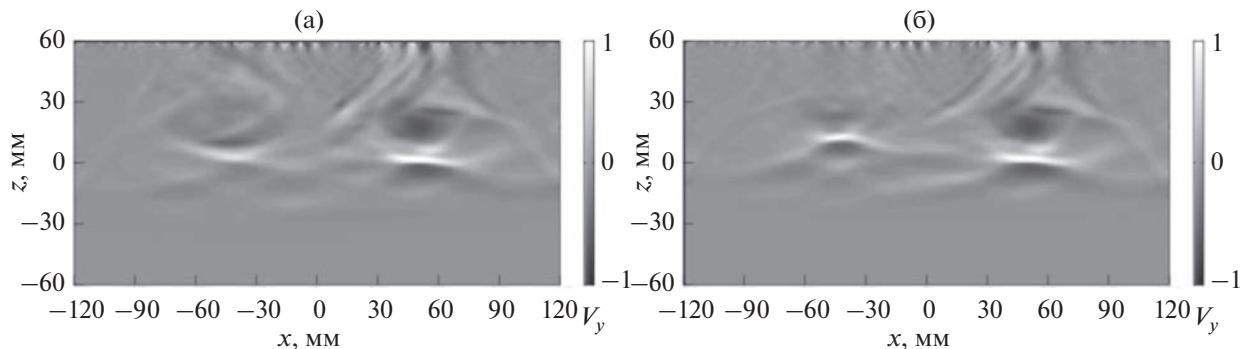


Рис. 10. Результат восстановления изображения отверстия в звуконепроницаемом экране методом обращения времени в модели частиц.



**Рис. 11.** Результат восстановления источников за звукопроводящей неоднородностью. (а) – С учетом влияния неоднородности, (б) – без учета влияния неоднородности.

рата амплитуды восстанавливаемых полей на глубине отверстия по времени от 154 до 175 мкс.

На восстановленном изображении можно различить изображение объекта, что свидетельствует о соответствии выбранной математической модели физическим процессам распространения акустических волн.

Для исследования возможности восстановления источников, скрытых за неоднородными препятствиями, был проведен эксперимент с двумя излучателями, погруженными в воду, один из которых был закрыт пластиною из поликарбоната (скорость звука 2800 м/с, плотность 586 кг/м<sup>3</sup>) толщиной 23 мм. Можно видеть, что если звукопроводящая неоднородность, затеняющая один из ультразвуковых излучателей, не учитывается, то изображение излучателя восстанавливается выше своего истинного положения, а при учете звукопроводящей неоднородности изображение излучателя восстанавливается в соответствии с его истинным положением. При этом интенсивность восстановленного изображения излучателя, перекрытого пластиною, меньше, поскольку при прохождении через препятствие амплитуда волны уменьшается.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложен метод численного восстановления источников акустических волн по измерениям поля на некоторой поверхности на основе представления среды в виде множества частиц и обращения распространения акустических волн во времени. Представлены результаты численного моделирования восстановления источников акустических волн в однородной среде, а также показана возможность восстановления излучателей в неоднородной среде с учетом неоднородности скорости и плотности.

Проведены экспериментальные исследования в воде по восстановлению ультразвуковых излучателей и визуализации отверстия в звуконепро-

ниаемом экране. Результаты экспериментов и численного моделирования показывают возможность визуализации ультразвуковых излучателей и затеняющих объектов в воде предложенным методом, что свидетельствует о соответствии предложенной математической модели акустическим процессам в рассмотренной системе.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-32-90074.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Свет В.Д. Экспериментальное восстановление звукового поля точечного источника в волноводе // Акуст. журн. 1990. Т. 36. № 4. С. 733–739.
- Tappert F.D., Nghiem-Phu L., Daubin S.C. Source localization using the PE method // J. Acoust. Soc. Am. 1985. V. 78. P. 68–75.
- Еремин А.А., Глушков Е.В., Глушкова Н.В., Ламмеринг Р. Локализация неоднородностей в упругой пластине методом обращения волн // Акуст. журн. 2017. Т. 63. № 5. С. 523–531.
- Беседина Т.Н., Кузнецов Г.Н., Кузькин В.М., Переселков С.А. Локализация источника звука в океанических волноводах // Акуст. журн. 2015. Т. 61. № 2. С. 207–215.
- Sarvazyan A.P., Urban M.W., Greenleaf J.F. Acoustic waves in medical imaging and diagnostics // Ultrasound Med. Biol. 2013. V. 39. № 7. P. 1133–1146.
- Суханов Д.Я., Калашникова М.А. Дистанционная ультразвуковая дефектоскопия звукоизлучающих объектов через воздух // Акуст. журн. 2014. Т. 60. № 3. С. 279.
- Зверев В.А. Принцип акустического обращения волн и голограмма // Акуст. журн. 2004. Т. 50. № 6. С. 792–801.
- Зверев В.А., Коротин П.И., Стромков А.А. Пространственная протяженность области акустического обращения волн // Акуст. журн. 2008. Т. 54. № 5. С. 823–830.
- Синельников Е.Д., Сутин А.М., Сарвазян А.П. Обращение времени в фокусирующих излучателях и

- приемниках ультразвука // Акуст. журн. 2010. Т. 56. № 2. С. 206–217.
10. Ляминев Л.М., Саков П.В. Обращение волнового фронта при нелинейном рассеянии звука на пульсирующей сфере // Акуст. журн. 1988. Т. 34. № 1. С. 127–134.
  11. Denison M.H., Anderson B.E. The effects of source placement on time reversal focusing in rooms // Applied Acoustics. 2019. V. 156. № 15. P. 279–288. <https://doi.org/10.1016/j.apacoust.2019.07.026>
  12. Alder B.J., Wainwright T.E. Studies in Molecular Dynamics. I. General Method // J. Chem. Phys. 1959. V. 31. № 2. P. 459–466.
  13. Xu C., Wu G., Du F., Zhu W., Mahdavi S.H. A Modified Time Reversal Method for Guided Wave Based Bolt Loosening Monitoring in a Lap Joint // J. Nondestructive Evaluation. 2019. V. 38. № 4. P. 1–13. <https://doi.org/10.1007/s10921-019-0626-1>
  14. Годин О.А., Кацельсон Б.Г., Qin Jixing, Brown M.G., Заботин Н.А., Zang Xiaoqin. Использование обращения волнового фронта для пассивного акустического зондирования океана // Акуст. журн. 2017. Т. 63. № 3. С. 283–295.
  15. Буров В.А., Румянцева О.Д. Обратные волновые задачи акустической томографии. Ч. 1: Обратные задачи излучения в акустике. М.: Ленанд, 2017. 384 с.
  16. Горюнов А.А., Сасковец А.В. Обратные задачи рассеяния в акустике. М.: Изд-во МГУ, 1989. 152 с.
  17. Смагин Н.В., Крутянский Л.М., Зеленова З.В., Брысев А.П. Измерение коэффициента акустического поглощения в образцах биологических тканей с помощью обращенных ультразвуковых волн // Акуст. журн. 2014. Т. 60. № 2. С. 199–203.
  18. Сапожников О.А., Пищальников Ю.А., Морозов А.В. Восстановление распределения нормальной скорости на поверхности ультразвукового излучателя на основе измерения акустического давления вдоль контрольной поверхности // Акуст. журн. 2003. Т. 49. № 3. С. 416–424.
  19. Кривцов А.М. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. 304 с.
  20. Nosé S. A molecular dynamics method for simulations in the canonical ensemble // Molecular Physics: An International Journal at the Interface between Chemistry and Physics. 1984. V. 52. № 2. P. 255–268.
  21. Gould H., Tobochnik J., Christian W. An Introduction to Computer Simulation Methods. Chapter 8. Third edition. 2005. P. 267–268.
  22. Шайтан К.В., Сарайкин С.С. Молекулярная динамика. 1999. [Электронный ресурс]. URL: <http://www.library.biophys.msu.ru/MolDyn/>
  23. Лагунов В.А., Синани А.Б. Компьютерное моделирование деформирования и разрушения кристаллов // Физика твердого тела. 2001. Т. 43. № 4. С. 644–650.
  24. Hoang H., Galliero G. Grand canonical-like molecular dynamics simulations: Application to anisotropic mass diffusion in a nanoporous medium // J. Chem. Phys. 2012. V. 136. P. 184702-1–184702-11. <https://doi.org/10.1063/1.4712139>
  25. Baidakov V.G., Tipeev A.O., Bobrov K.S., Ionov G.V. Crystal nucleation rate isotherms in Lennard-Jones liquids // J. Chem. Phys. 2010. V. 132. № 23. <https://doi.org/10.1063/1.3439585>
  26. Parrinello M., Rahman A. Crystal Structure and Pair Potentials: A Molecular-Dynamics Study // Phys. Rev. Lett. 1980. V. 45. P. 1196–1199.
  27. Parrinello M., Rahman A. Polymorphic Transitions in Single Crystals: A New Molecular Dynamics Method // J. Appl. Phys. 1981. V. 52. P. 7182–7190. <https://doi.org/10.1063/1.328693>
  28. Zuckerman N., Lukes J.R. Acoustic phonon scattering from particles embedded in an anisotropic medium: A molecular dynamics study // Phys. Rev. B. 2008. V. 77. № 9. P. 094302-1–094302-20.
  29. Суханов Д.Я., Кузовова А.Е. Моделирование волновых процессов методом динамики частиц // Математическое моделирование. 2020. Т. 32. № 10. С. 119–134.
  30. Павлов П.В., Хохлов А.Ф. Физика твердого тела. М.: Высшая школа, 2000. С. 179–180.
  31. Marburg S. Six boundary elements per wavelength: Is that enough? // J. Comp. Acoust. 2002. V. 10. № 1. P. 25–51. <https://doi.org/10.1142/S0218396X02001401>
  32. Liu Q.H., Jianping T.J. The perfectly matched layer for acoustic waves in absorptive media // J. Acoust. Soc. Am. 1997. V. 102. № 4. P. 2072–2082.
  33. Diaz J., Joly P. A time domain analysis of PML models in acoustics // Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 2006. V. 195. P. 3820–3853.
  34. Hastings F.D., Schneider J.B., Broschat S.L. Application of the perfectly matched layer (PML) absorbing boundary condition to elastic wave propagation // J. Acoust. Soc. Am. 1996. V. 100. № 5. P. 3061–3069.
  35. Kim D. A Modified PML Acoustic Wave Equation // Symmetry. 2019. V. 177. № 11. P. 1–15.
  36. Chern A. A reflectionless discrete perfectly matched layer // J. Comp. Phys. 2019. V. 381. P. 91–109.