

# Молекулярная динамика

## Этап 2

---

Асеинова Е.В.; Бармина О.К.; Горбунова Я.М.; Евсеева Д.О.; Исаханян Э.Т.

2022 March 4th

RUDN University, Moscow, Russian Federation

На предыдущем этапе мы описали задачу проекта и определили основные формулы для ее решения. Рассмотрим более подробно алгоритм, который будем использовать для решения задачи и дальнейшего написания программы.

# Уравнения молекулярной динамики

---

## Потенциал взаимодействия

Влияние молекул друг на друга описывается потенциалом взаимодействия  $U$ .

Мы будем рассматривать простейший случай - парное взаимодействие:

$$U_{ij} = U(r_{ij}),$$

где

$$r_{ij} = |r_i - r_j|$$

Суммарная потенциальная энергия равна:

$$E_p = \sum_{i < j} U_{ij}$$

Сила, действующая на данную молекулу:

$$F_i = -\frac{\partial E_p}{\partial r_i}$$

Движение частиц описывается вторым законом Ньютона:

$$m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = F_i$$

Получим систему  $N$  обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка и перепишем ее в виде  $2N$  уравнений первого порядка:

$$\begin{aligned}\frac{dr_i}{dt} &= v_i, \\ \frac{dv_i}{dt} &= a_i.\end{aligned}$$

где  $v_i$  - скорость частиц,  $a_i = \frac{F_i}{m_i}$  - ускорение частиц.

## Определение условий

---

Дополним полученную систему начальными условиями:

$$r_i(t = 0) = r_{i0}, v_i(t = 0) = v_{i0}$$

Необходимо оптимизировать расчет сил взаимодействия. Вдвое увеличить скорость можно, учитывая третий закон Ньютона:

$$F_{ij} = -F_{ji}$$



Граничные условия зададим периодически:

$$\text{если } |\Delta x| > \frac{L}{2}, \Delta x = \Delta x - \operatorname{sgn}(\Delta x) \cdot L$$

## Алгоритм Верле

---

Будем использовать алгоритм Верле в скоростной форме:

$$r_i^{n+1} = r_i^n + v_i^n \cdot \Delta t + a_i^n \cdot \frac{\Delta t^2}{2},$$

$$v_i^{n+1} = v_i^n + \frac{1}{2}(a_i^n + a_i^{n+1})\Delta t.$$

Перепишем схему алгоритма для удобства использования:

$$v_i^{n+1/2} = v_i^n + a_i^n \cdot \frac{\Delta t}{2},$$

$$r_i^{n+1} = r_i^n + v_i^{n+1/2} \cdot \Delta t,$$

$$v_i^{n+1} = v_i^{n+1/2} + a_i^{n+1} \cdot \frac{\Delta t}{2}.$$

В качестве критерия выбора шага по времени будем использовать условие сохранения полной энергии системы:

$$E = \sum_1 \frac{m_i v_i^2}{2} + \sum_{i < j} U_{ij}$$

## Потенциал Леннард-Джонса

---

Потенциал описывает парное взаимодействие молекул. Для удобства запишем его в следующем виде:

$$U_{LJ} = \varepsilon \left( \left( \frac{b}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{b}{r} \right)^6 \right)$$

# Интегрирование уравнений движения

---



Для завершения алгоритма проведем интегрирование уравнений движения в цикле по времени.

## Выводы

---

Мы описали алгоритм для решения задачи.

Основные шаги алгоритма:

- Определение начальных условий
- Определение граничных условий
- Расчет значений ускорений частиц
- Выбор шага по времени
- Решение системы