

Молекулярная динамика

Этап №2

Гафиров Абдималик НФИбд-01-18; Логинов Сергей НФИбд-01-18;
Мулихин Павел НФИбд-01-18; Наливайко Сергей НФИбд-01-18;
Смирнова Мария НФИбд-01-18; Сорокин Андрей НФИбд-03-18

Метод молекулярной динамики (МД) рассматривает поведение вещества на микроуровне - мы наблюдаем за движением отдельных молекул. При этом мы хотим понять поведение сложной многочастичной системы. Применение метода МД даже к небольшим системам, состоящим из нескольких сотен или тысяч частиц, дает много для понимания наблюдаемых свойств газов, жидкостей и твердых тел.

Мы вывели $2N$ уравнений первого порядка (N — число частиц):

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} &= \mathbf{v}_i, \\ \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} &= \mathbf{a}_i.\end{aligned}$$

Здесь мы ввели скорости частиц \mathbf{v}_i и их ускорения $\mathbf{a}_i = \mathbf{F}_i/m_i$.

Алгоритм Верле в скоростной форме выглядит следующим образом:

$$\mathbf{r}_i^{n+1} = \mathbf{r}_i^n + \mathbf{v}_i^n \cdot \Delta t + \mathbf{a}_i^n \cdot \frac{\Delta t^2}{2},$$
$$\mathbf{v}_i^{n+1} = \mathbf{v}_i^n + \frac{1}{2}(\mathbf{a}_i^n + \mathbf{a}_i^{n+1})\Delta t.$$

Нам придется использовать два массива для хранения ускорений, но мы можем переписать схему, чтобы этого избежать:

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_i^{n+1/2} &= \mathbf{v}_i^n + \mathbf{a}_i^n \cdot \frac{\Delta t}{2}, \\ \mathbf{r}_i^{n+1} &= \mathbf{r}_i^n + \mathbf{v}_i^{n+1/2} \cdot \Delta t, \\ \mathbf{v}_i^{n+1} &= \mathbf{v}_i^{n+1/2} + \mathbf{a}_i^{n+1} \cdot \frac{\Delta t}{2}.\end{aligned}$$

1. Начальные условия

Необходимо ввести начальные условия:

$$\mathbf{r}_i(t = 0) = \mathbf{r}_{i0}, \quad \mathbf{v}_i(t = 0) = \mathbf{v}_{i0}$$

При этом суммарный импульс частиц должен быть равен 0.

2. Граничные условия

Граничные условия зададим периодическими:

$$\text{если } |\Delta x| > L/2, \quad \Delta x = \Delta x - \text{sgn}(\Delta x) \cdot L.$$

3. Вычисление ускорений

Так как мы переписали уравнения движения, необходимо перед интегрированием вычислить значения ускорений, в соответствии с третьим законом Ньютона:

$$\mathbf{F}_{ij} = -\mathbf{F}_{ji}.$$

4. Выбор шага по времени

Критерием для выбора шага по времени будет служить условие сохранения полной энергии системы:

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

Приемлемым можно считать сохранение E с точностью 0,5%

5. Потенциал Леннард-Джонса

Потенциал – описывает парное взаимодействие молекул. Мы будем использовать Потенциал Леннард-Джонса, который выглядит следующим образом:

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

6. Интегрирование уравнений движения

Последний шаг нашего алгоритма - интегрирование уравнений движения в цикле по времени.

Выводы: На втором этапе проекта мы
построили алгоритм для программы
двумерной молекулярной динамики
