

ФГОУ ВО УРАЛЬСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ ПЕРВОГО ПРЕЗИДЕНТА РОССИИ Б.Н.ЕЛЬЦИНА

ФИЗИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
КАФЕДРА ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ И ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ

ОТЧЁТ ПО ЛАБОРАТОРНОЙ РАБОТЕ №1

«Симуляция двумерной системы частиц взаимодействующих через потенциал Леннарда-Джонса с учетом периодических граничных условий»

Студент:

Вялова С.А.

группа: ФТМ-170403

Преподаватель:

д.ф.-м.н., профессор

Мазуренко Владимир Владимирович

Консультант:

н.с.

Сотников Олег Михайлович

14 апреля 2018 г.
Екатеринбург.

Содержание

1. Моделирование двумерной системы частиц, взаимодействующих через потенциал Леннарда-Джонса	2
1.1. Цель работы	2
1.2. Теоретическая часть	3
1.2.1. Потенциал Леннарда-Джонса	3
1.2.2. Описание вычислительного метода	3
1.3. Практическая часть	5
1.3.1. Описание функционала разработанной программы	5
1.3.2. Визуализация всей системы и траектории отдельной частицы .	6
1.3.3. Выводы	8

Глава 1

Моделирование двумерной системы частиц, взаимодействующих через потенциал Леннарда-Джонса

1.1. Цель работы

Разработка программы для симуляции молекулярной динамики двумерной системы частиц, взаимодействующих через потенциал Леннарда-Джонса с учётом периодических граничных условий, а также применение алгоритма Верле для решения уравнения движения. Начальные значения координат и скоростей частиц выбираются так, чтобы выполнялось условие нулевого импульса системы.

Реализуются следующие пункты:

- Возможность задания произвольного числа частиц;
- расчет кинетической, потенциальной и полной энергии;
- определение и контроль температуры системы;
- визуализация всей системы и траектории отдельной частицы;
- расчет среднеквадратичного смещения и автокорреляционной функции скорости.

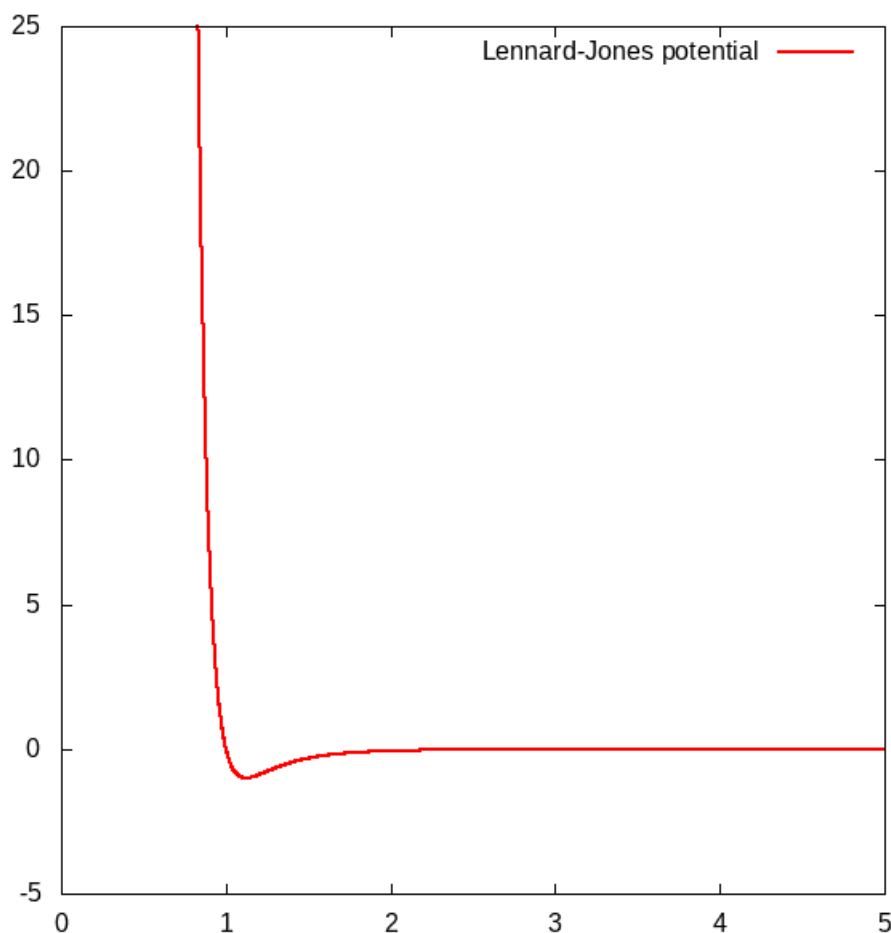
1.2. Теоретическая часть

1.2.1. Потенциал Леннарда-Джонса

Потенциал Леннарда-Джонса представляет собой простую модель парного взаимодействия неполярных молекул, описывающая зависимость энергии взаимодействия двух частиц от расстояния между ними. Потенциал был предложен Леннардом-Джонсом первоначально для исследования термодинамических свойств инертных газов. Наиболее часто используется так называемый (6-12)-потенциал Леннарда-Джонса, записанный в форме

$$U = 4 \cdot \varepsilon \cdot [(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6], \quad (1.1)$$

где ε - глубина потенциальной ямы, σ - значение расстояния между частицами, при котором потенциал равен нулю. Шестая степень убывания отвечает электростатическому диполь-дипольному и дисперсионному притяжению; двенадцатая степень убывания потенциала моделирует достаточно жесткое отталкивание и выбрана из соображений математического удобства.



1.2.2. Описание вычислительного метода

Для моделирования системы взаимодействующих частиц необходимо численно решить классические уравнения движения системы

$$m_i \dot{\vec{v}}_i = F_i(t, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N, \vec{v}_1, \dots, \vec{v}_N) \quad (1.2)$$

$$\dot{\vec{x}}_i = \vec{v}_i. \quad (1.3)$$

Чтобы начать моделировать двумерную систему взаимодействующих частиц, необходимо задать все координаты частиц, равномерно расположив их относительно друг друга, а также их скорости. Каждая пара частиц взаимодействует через потенциал Леннарда-Джонса.

$$\vec{r}_{n+1} = \vec{r}_n + \vec{v}_n \cdot dt \quad (1.4)$$

$$\vec{v}_{n+1} = \vec{v}_n + \frac{1}{2} \cdot (\vec{a}_n + \vec{a}_{n+1}) \quad (1.5)$$

Ускорения определяем из потенциала Леннарда-Джонса:

$$\vec{F}_i = -\vec{\nabla}U(\vec{r}) = m_i \vec{a}_i \quad (1.6)$$

Подставляя выражение для потенциала Леннарда-Джонса (1.1) в выражение для силы, действующей на каждую частицу со стороны системы, получаем ускорение i частицы:

$$\vec{a}_i = 4\epsilon \cdot \sum_{j=1}^N \sum_{j \neq i}^N \frac{\vec{r}_{ij}}{m_i |\vec{r}_{ij}|^2} [2(\sigma/\vec{r}_{ij})^{12} - (\sigma/\vec{r}_{ij})^6] \quad (1.7)$$

Из полученных данных возможно вычислить кинетическую (1.8) и потенциальную (1.9) энергии системы:

$$E_{kinetic} = \sum_{i=1}^N \frac{m_i \vec{v}_i^2}{2} \quad (1.8)$$

$$E_{potential} = 4\epsilon \sum_{i=1}^N \sum_{s=i+1}^N [(\sigma/\vec{r}_{is})^{12} - (\sigma/\vec{r}_{is})^6] \quad (1.9)$$

Полная энергия системы (1.10) вычисляется как сумма кинетических и потенциальных энергий всех частиц в системе.

$$E_{total} = E_{kinetic} + E_{potential} \quad (1.10)$$

Важным критерием является неизменность полной энергии системы на каждом шаге. Используемый для решение поставленной задачи вычислительный алгоритм требует нулевого суммарного импульса системы частиц. Требование нулевого суммарного импульса системы удовлетворяется за счёт перенормировки заданных начальных скоростей следующим образом:

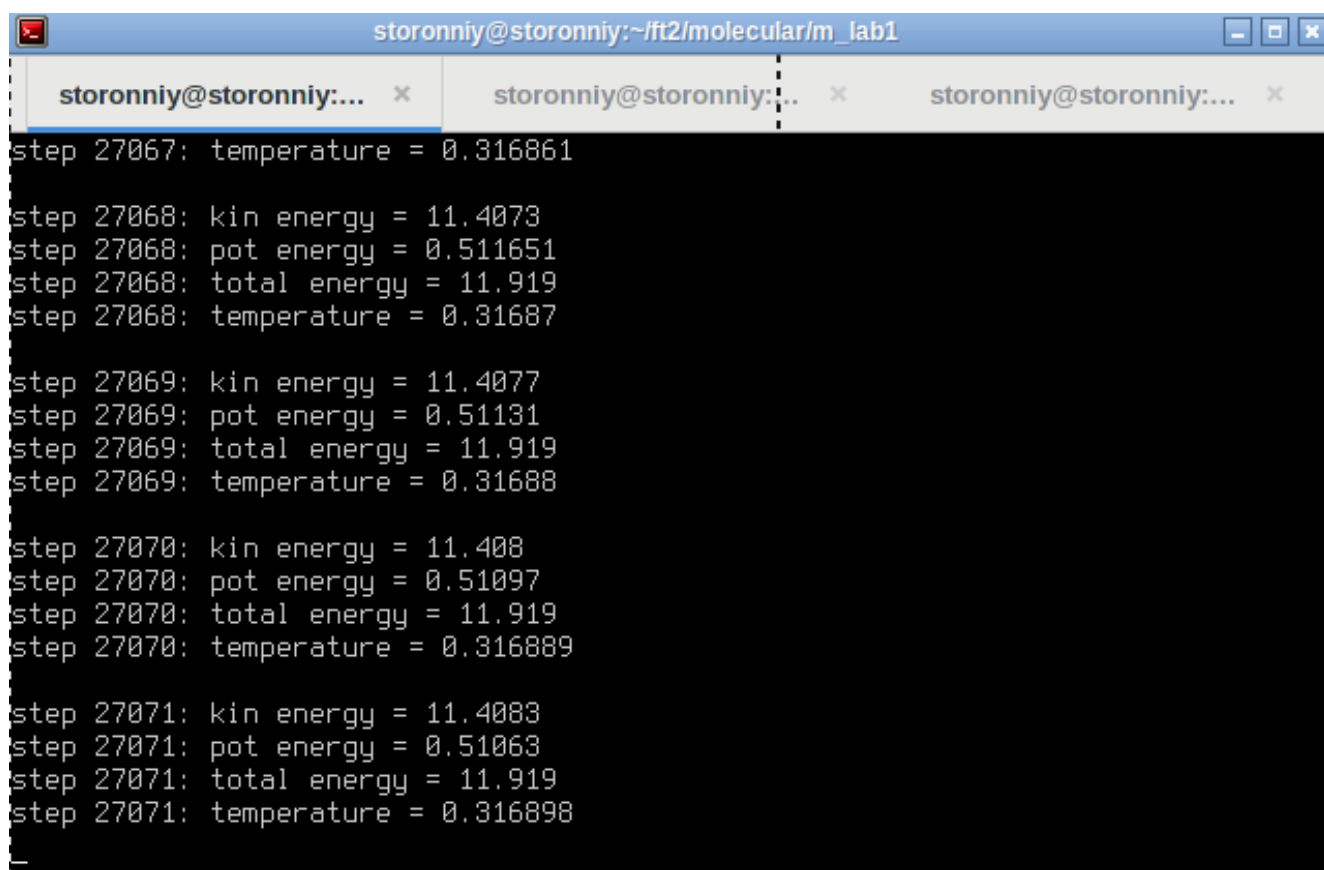
$$\vec{v}_{i \text{ new}} = \vec{v}_i - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \vec{v}_i \quad (1.11)$$

1.3. Практическая часть

1.3.1. Описание функционала разработанной программы

Для выполнения поставленной задачи выбран язык программирования C++. Входные данные задаются пользователем с клавиатуры. Программе необходимо передать значение общего числа частиц в системе, значение постоянной решётки, шаг по времени, а также число шагов по времени, значения параметров модели σ и ε .

Далее программа генерирует произвольные значения исходных координат частиц в системе, произвольные значения начальных скоростей частиц в указанных линейных диапазонах, впоследствии пересчитывая скорости в соответствии с требованием нулевого суммарного импульса системы. Вычисляются ускорения и скорости для следующего шага по времени, координаты частиц в системе с учётом периодических граничных условий, и далее, в цикле по шагу по времени, программа вычисляет ускорения для новых положений частиц, скорости, кинетическую, потенциальную энергии системы.



```
storonniy@storonniy:~/ft2/molecular/m_lab1
storonniy@storonniy:... x storonniy@storonniy:.. x storonniy@storonniy:... x
step 27067: temperature = 0.316861
step 27068: kin energy = 11.4073
step 27068: pot energy = 0.511651
step 27068: total energy = 11.919
step 27068: temperature = 0.31687
step 27069: kin energy = 11.4077
step 27069: pot energy = 0.51131
step 27069: total energy = 11.919
step 27069: temperature = 0.31688
step 27070: kin energy = 11.408
step 27070: pot energy = 0.51097
step 27070: total energy = 11.919
step 27070: temperature = 0.316889
step 27071: kin energy = 11.4083
step 27071: pot energy = 0.51063
step 27071: total energy = 11.919
step 27071: temperature = 0.316898
```

Рис. 1.1. Демонстрация выполняющейся программы.

Запуск программы осуществляется из командной оболочки bash (рисунок 1.1). В ходе выполнения программа для каждого шага по времени выводит в терминал значения кинетической, потенциальной и полной энергии системы,

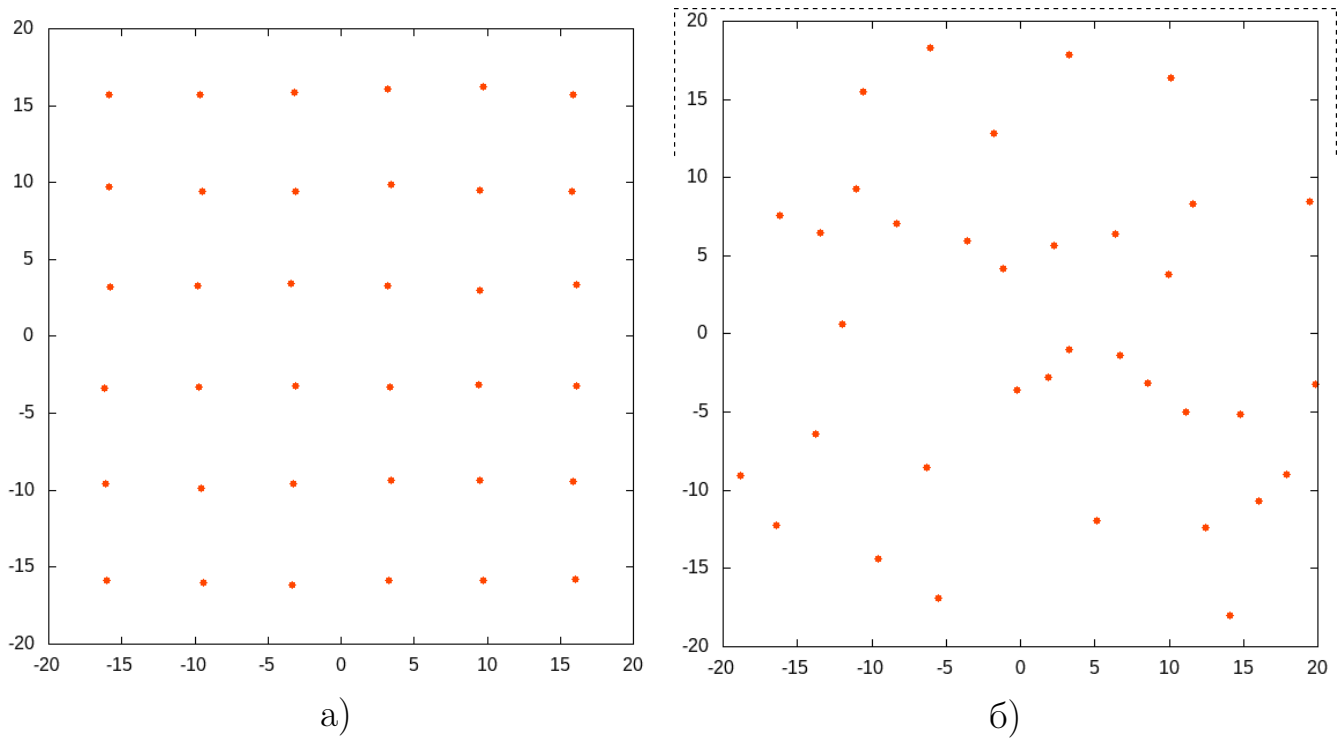


Рис. 1.2. Положение частиц в системе а) в исходном состоянии; б) в ходе моделирования.

температуру системы, а также значение суммарного импульса для контроля, а также в выходные файлы на каждом шаге записываются координаты частиц, кинетическая, потенциальная и полная энергии системы, температура системы, значение функции среднеквадратического смещения частиц и автокорреляционной функции скорости. По записанным данным могут быть построены графики зависимостей данных величин от шага по времени.

1.3.2. Визуализация всей системы и траектории отдельной частицы

Заданное число частиц системы располагается в виде равномерной квадратной сетки внутри ячейки со стороной, равной постоянной решетки. Функционал разработанной программы для моделирования данной системы частиц предполагает файл, содержащий набор всех координат частиц на каждом шаге моделирования, поэтому эволюция положения частиц системы была визуализирована с использованием пакета Gnuplot в виде gif-изображения. Положения всех частиц системы, находящейся в исходном состоянии и на некотором шаге в ходе моделирования, представлены на рисунке 1.2(а) и рисунке 1.2(б) соответственно.

В ходе моделирования были получены графики зависимости кинетической, потенциальной и полной энергии системы от шага по времени (рисунок 1.3), а также температуры системы и средней температуры системы от шага по времени (рисунок 1.4).

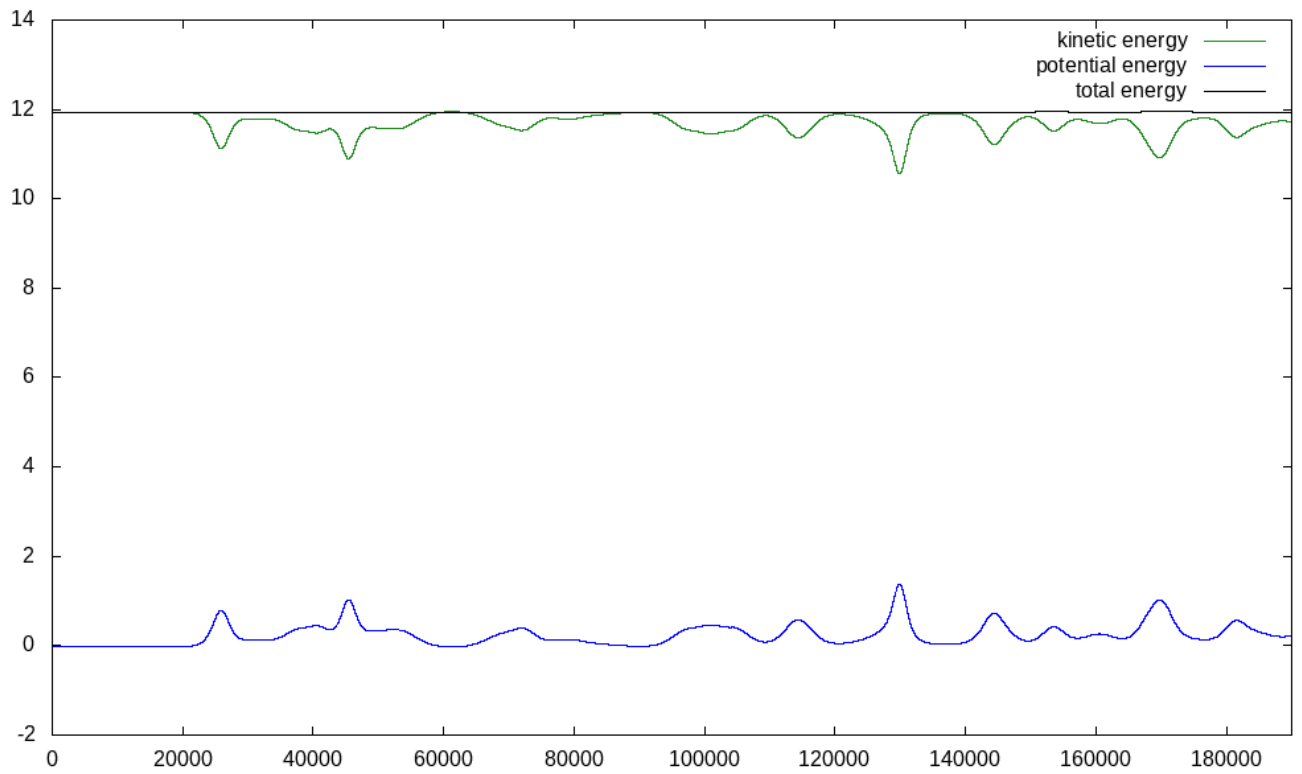


Рис. 1.3. Зависимость энергии системы от шага по времени.

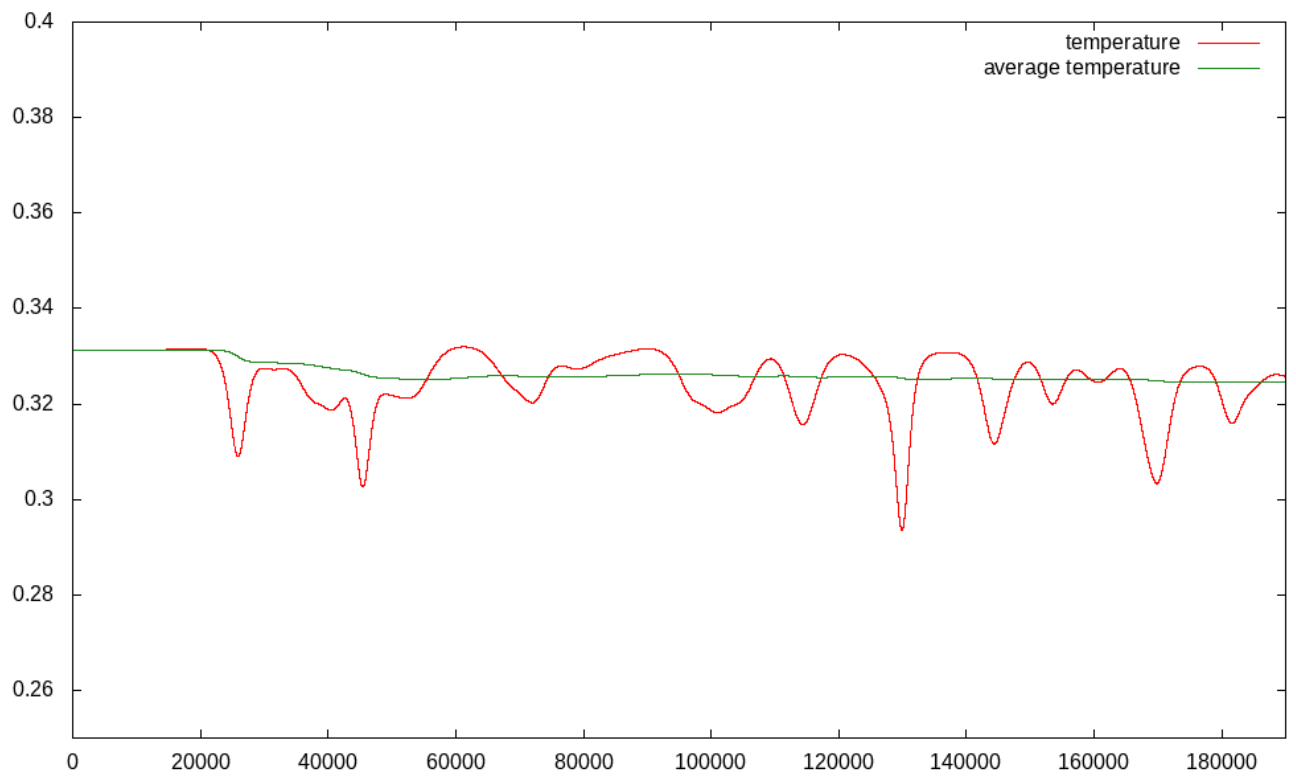


Рис. 1.4. Зависимость температуры системы от шага по времени.

1.3.3. Выводы