

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

21 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	6
1.3.1. Описание функционала разработанной программы	6
1.3.2. Визуализация всей системы и траектории отдельной частицы .	7
1.3.3. Результаты моделирования	9
1.3.4. Контроль температуры	10
1.4. Выводы	13

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.

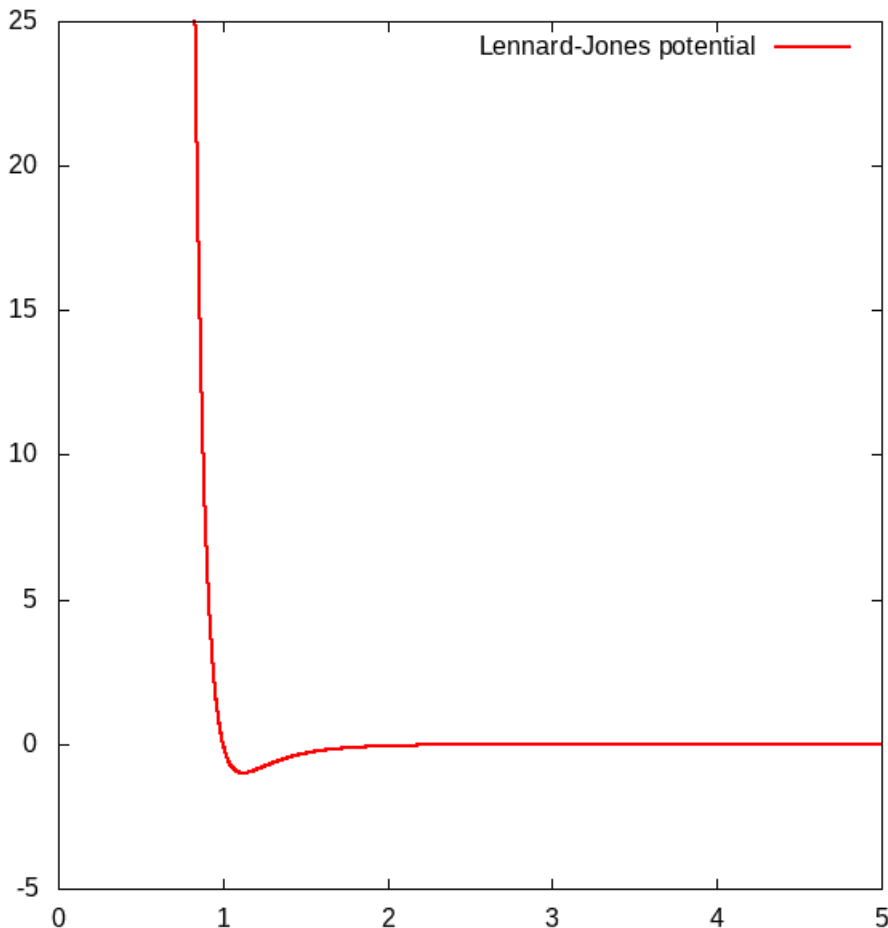
1.2. Теоретическая часть

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, состоящей из N взаимодействующих частиц необходимо численно решить классические уравнения движения системы

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

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

Сила, действующая на i -ю частицу, может быть найдена как градиент потенциала:

$$\vec{F}_i = -\vec{\nabla}U(\vec{r}) \quad (1.4)$$

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.

$$\vec{r}_{n+1} = \vec{r}_n + \vec{v}_n \cdot dt \quad (1.5)$$

$$\vec{v}_{n+1} = \vec{v}_n + \frac{1}{2} \cdot (\vec{a}_n + \vec{a}_{n+1}) \quad (1.6)$$

Ускорения определяем из потенциала Леннарда-Джонса:

$$\vec{F}_i = -\vec{\nabla}U(\vec{r}) = m_i \vec{a}_i \quad (1.7)$$

Подставляя выражение для потенциала Леннарда-Джонса (1.1) в выражение для силы (1.7), действующей на каждую частицу со стороны системы, получаем ускорение i -й частицы:

$$\vec{a}_i = 4\epsilon \cdot \sum_{j=1}^N \sum_{j \neq i}^N \frac{\vec{r}_{ij}}{m_i |\vec{r}_{ij}|^2} [2(\sigma/\vec{r}_{ij})^{12} - (\sigma/\vec{r}_{ij})^6] \quad (1.8)$$

Из полученных данных возможно вычислить кинетическую (1.9) и потенциальную (1.10) энергии системы:

$$E_{kinetic} = \sum_{i=1}^N \frac{m_i \vec{v}_i^2}{2} \quad (1.9)$$

$$E_{potential} = 4\epsilon \sum_{i=1}^N \sum_{s=i+1}^N [(\sigma/\vec{r}_{is})^{12} - (\sigma/\vec{r}_{is})^6] \quad (1.10)$$

Полная энергия системы (1.11) вычисляется как сумма кинетических и потенциальных энергий всех частиц в системе.

$$E_{total} = E_{kinetic} + E_{potential} \quad (1.11)$$

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

$$\vec{v}_{i \text{ new}} = \vec{v}_i - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \vec{v}_i \quad (1.12)$$

Также необходимо было реализовать контроль температуры, суть которого заключается в том, чтобы по прошествии заданного числа итераций, когда система окажется в равновесии с некоторой температурой $T_{current}$, на систему воздействовал мгновенный импульс, задача которого - перевести систему в равновесие с некоторой заданной температурой $T_{desired}$.

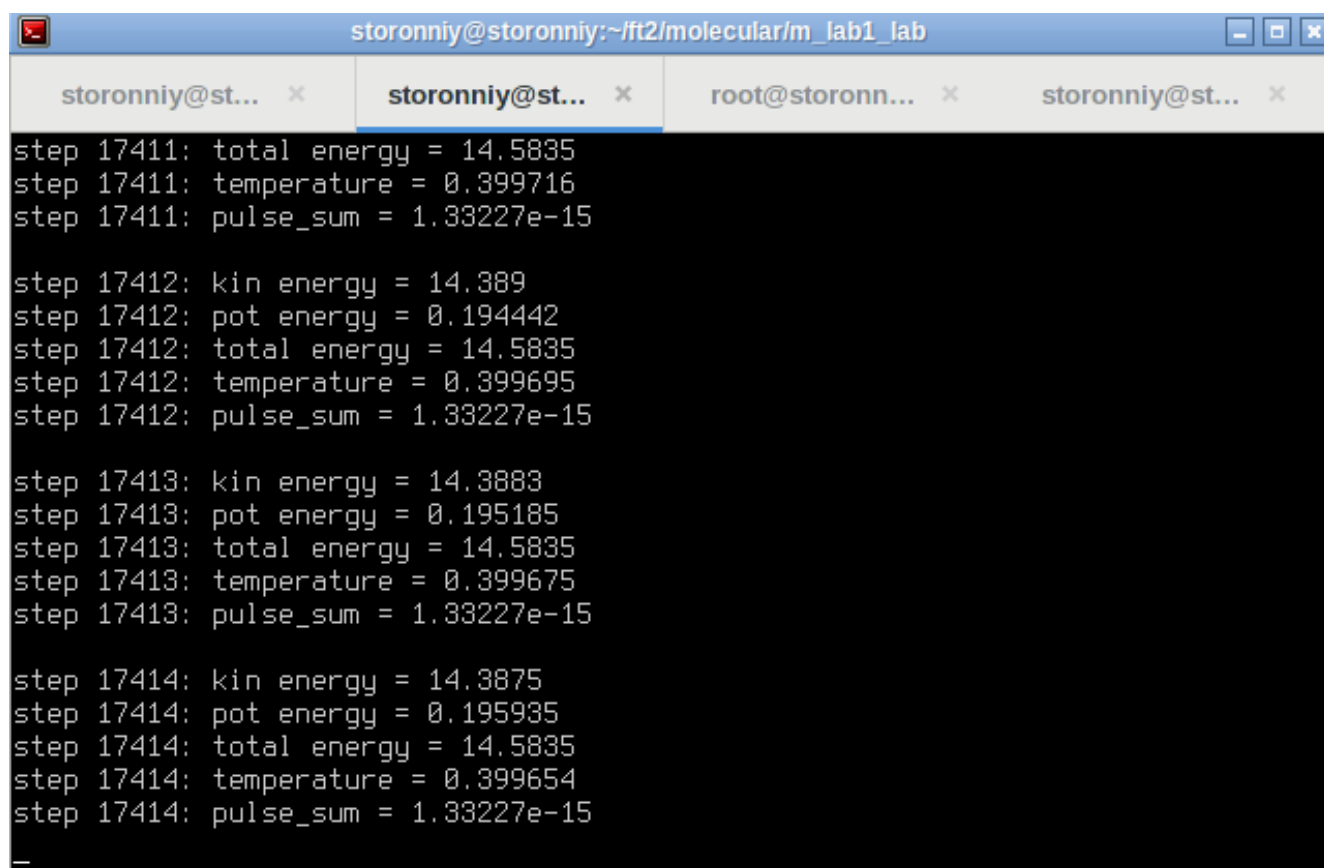
Осуществляется это следующим образом: на заданном шаге все скорости частиц в системе умножаются на масштабирующий коэффициент $k = \sqrt{\frac{T_{desired}}{T_{current}}}$. Далее продолжается моделирование системы, которая релаксировала к состоянию с заданной температурой.

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 исходные координаты частиц в системе в виде сетки в пределах постоянной решётки, 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, а также координаты для следующего, $(n+1)$ -го шага по времени.



```
storonniy@storonniy:~/ft2/molecular/m_lab1_lab
step 17411: total energy = 14.5835
step 17411: temperature = 0.399716
step 17411: pulse_sum = 1.33227e-15

step 17412: kin energy = 14.389
step 17412: pot energy = 0.194442
step 17412: total energy = 14.5835
step 17412: temperature = 0.399695
step 17412: pulse_sum = 1.33227e-15

step 17413: kin energy = 14.3883
step 17413: pot energy = 0.195185
step 17413: total energy = 14.5835
step 17413: temperature = 0.399675
step 17413: pulse_sum = 1.33227e-15

step 17414: kin energy = 14.3875
step 17414: pot energy = 0.195935
step 17414: total energy = 14.5835
step 17414: temperature = 0.399654
step 17414: pulse_sum = 1.33227e-15
```

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, 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

При моделировании системы были использованы следующие входные данные:

- значение параметра $\sigma=2.74$;
- значение параметра $\varepsilon=0.0031$;
- линейный размер системы $L=40$;
- число частиц $N=36$;
- шаг по времени $dt=0.0001$;
- число шагов по времени $NSTEP=1000000$;
- диапазон начальных скоростей $[-1; 1]$;
- шаг начала контроля температуры $N=100000$;
- конечная температура $T=0.4$.

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 на выходе 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.

Траектория отдельной частицы представлена на рисунке 1.3. Изменение направления импульса частицы означает столкновение данной частицы с другими частицами системы. Периодические граничные условия, как видно, заставляют частицу, выходящую за границы рассматриваемой области, "появляться" с противоположной стороны рассматриваемой области.

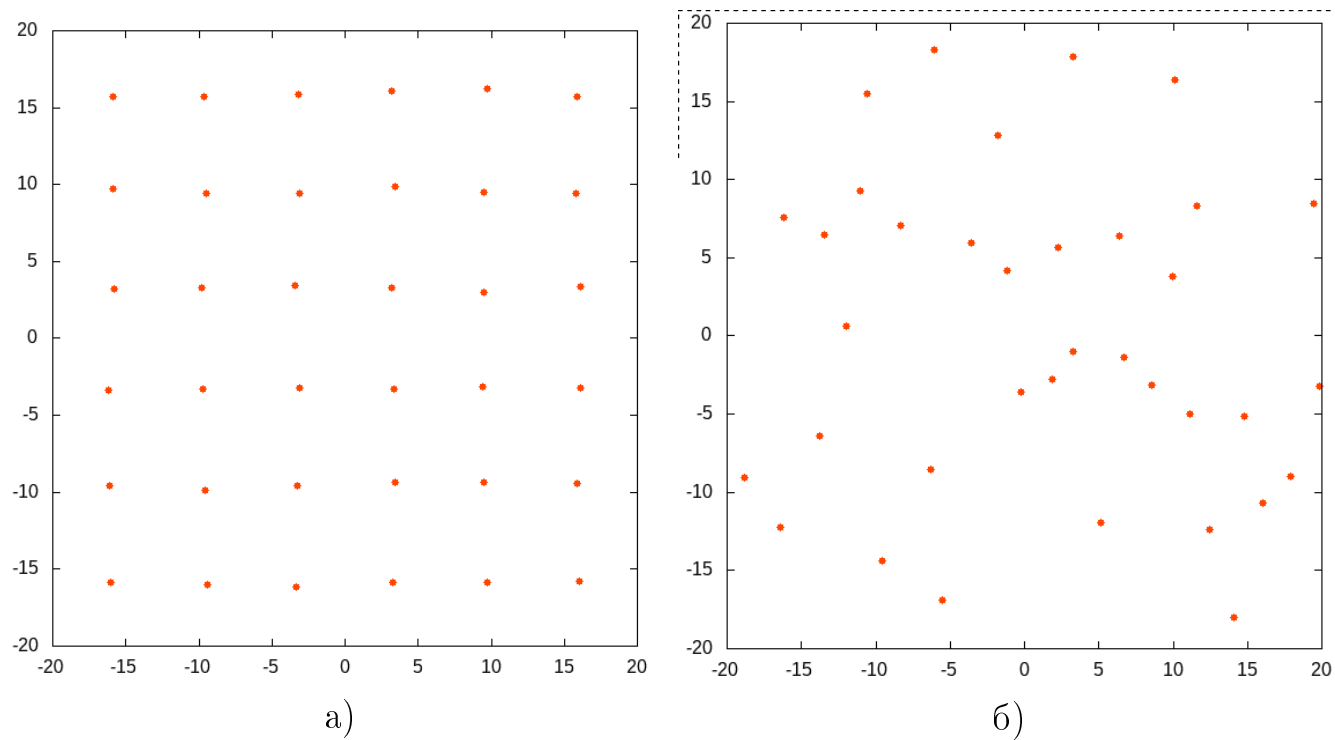


Рис. 1.2. Положение частиц в системе а) в исходном состоянии; б) в ходе моделирования.

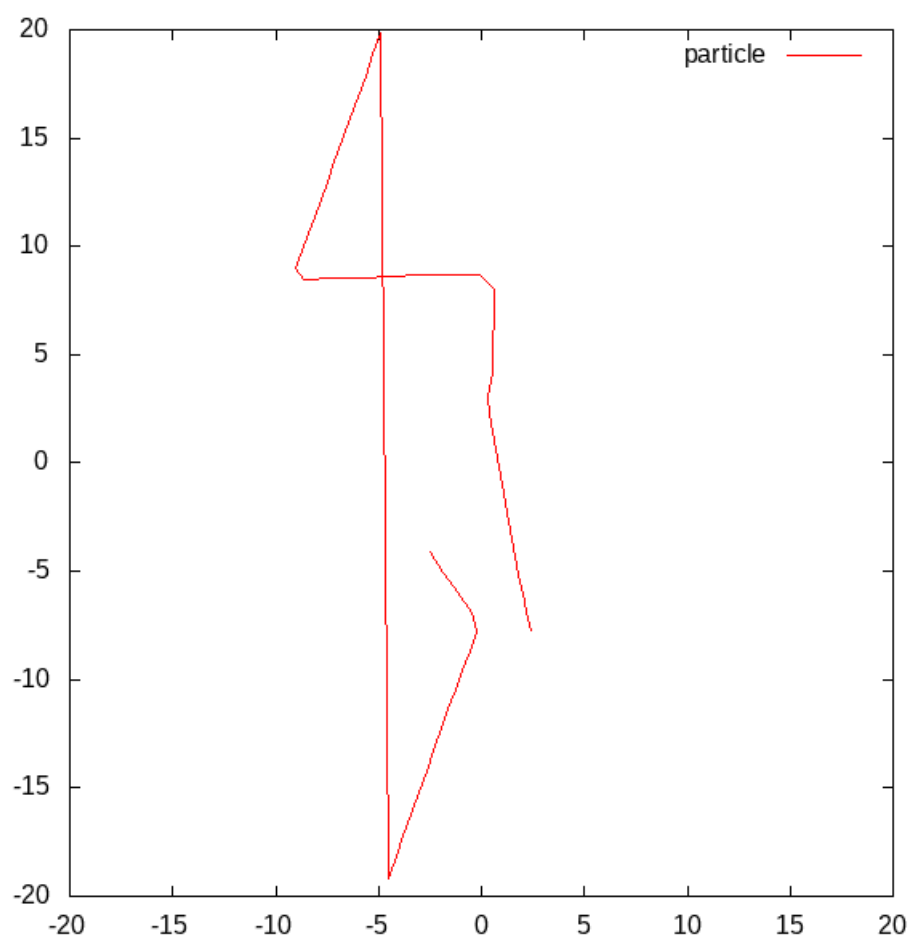


Рис. 1.3. Траектория отдельной частицы.

1.3.3. Результаты моделирования

В ходе моделирования были получены графики зависимости кинетической, потенциальной и полной энергии системы от шага по времени (рисунок 1.4), а также температуры системы и средней температуры системы от шага по времени (рисунок 1.5).

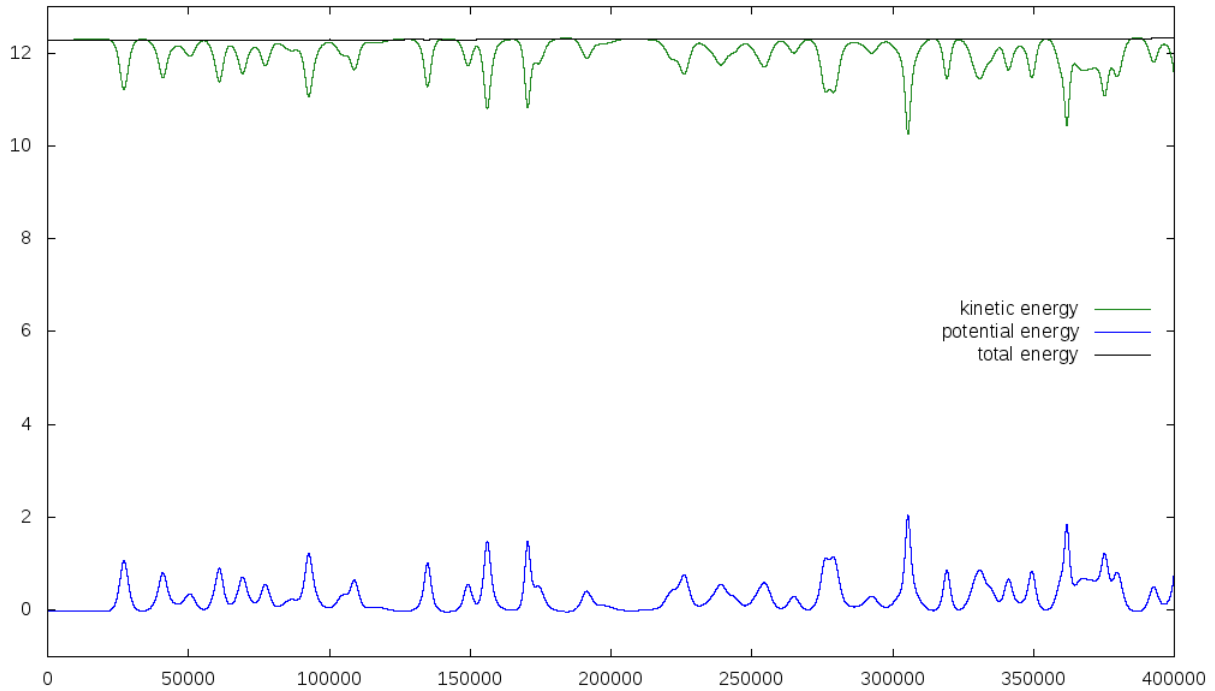


Рис. 1.4. Зависимость кинетической (зеленый), потенциальной (синий) и полной (черный) энергии системы от шага по времени.

График зависимости потенциальной, кинетической и полной энергии системы от шага моделирования указывает на то, что закон сохранения полной энергии в системе выполняется, то есть полная энергия системы не изменяется в ходе эволюции системы.

Требование нулевого суммарного импульса системы, как видно из графика 1.6, выполняется.

Также были построены графики среднеквадратического смещения (рис 1.7) и автокорреляционной функции скорости (рис. 1.8). Из графика 1.8 видно, что первые 20000 шагов частицы движутся почти без столкновений, это соответствует квадратичной зависимости среднеквадратического смещения (рис. 1.7). Далее следует скачок потенциальной энергии системы с изменением характера движения с баллистического на диффузионный, что отражается резким спадом автокорреляционной функции скорости и линейной частью среднеквадратического смещения.

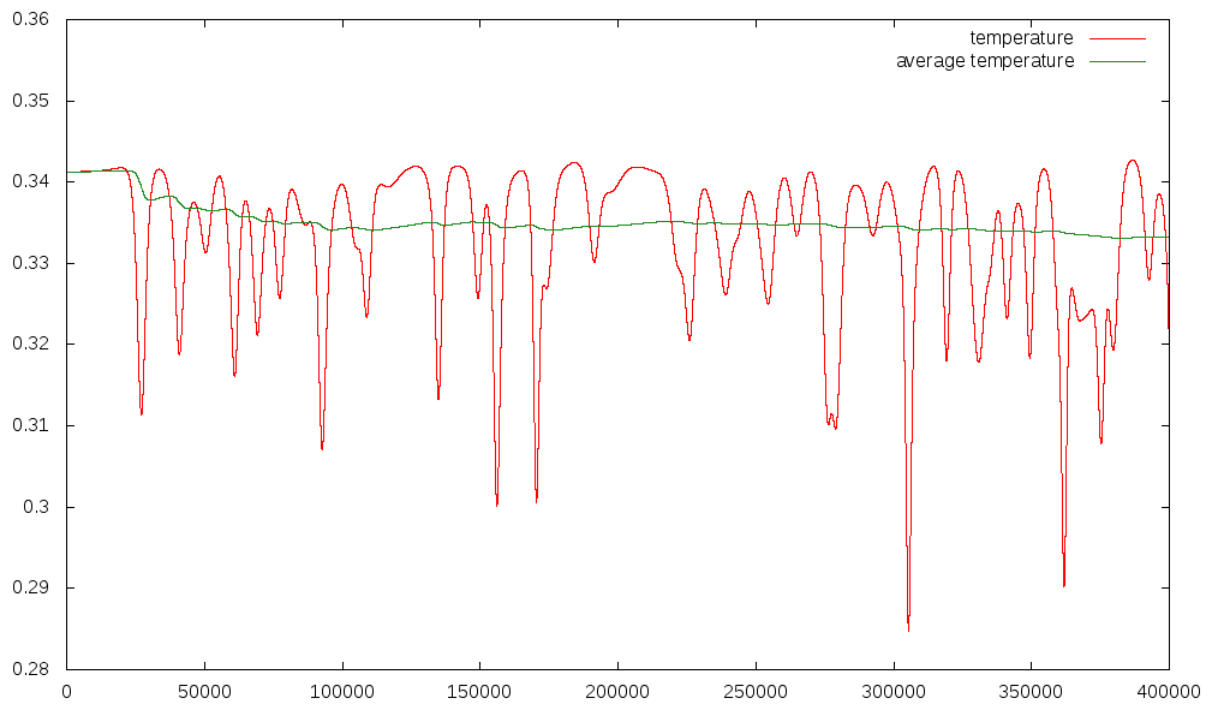


Рис. 1.5. Зависимость средней (зеленый) и мгновенной (красный) температуры системы от шага по времени.

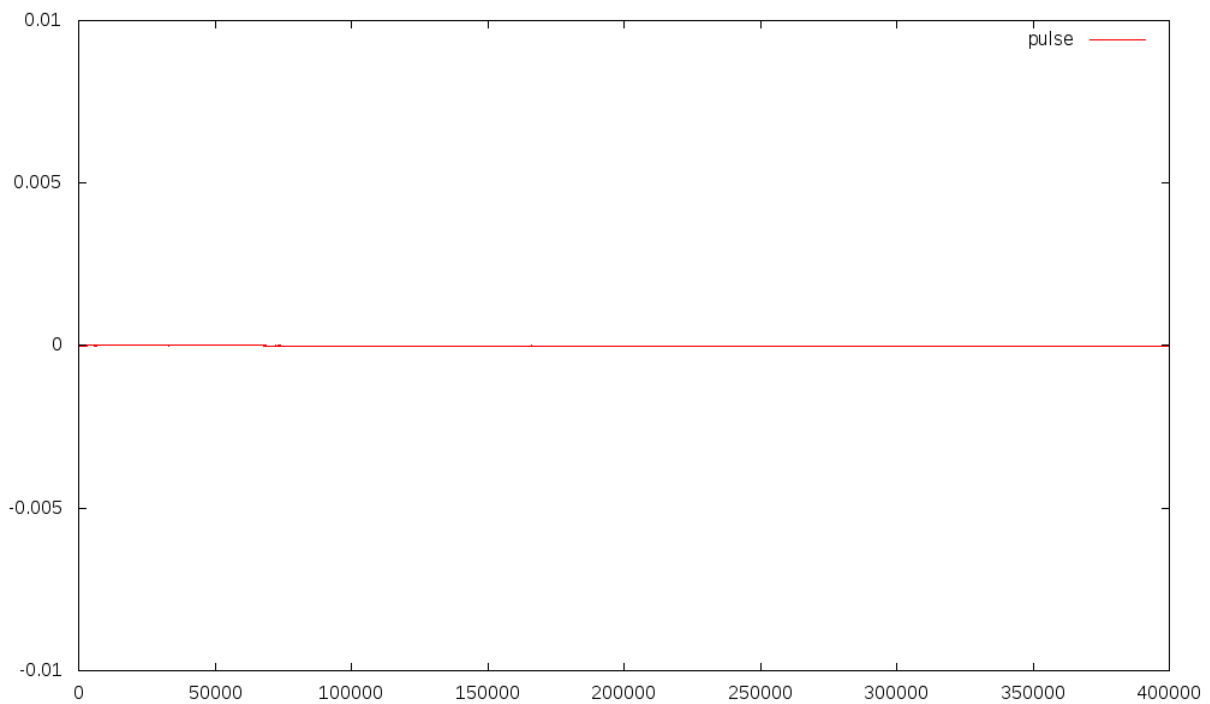


Рис. 1.6. Зависимость суммарного импульса системы от шага по времени.

1.3.4. Контроль температуры

Также в программе требовалось реализовать контроль температуры системы, суть которого заключается в том, чтобы, после некоторого шага моделирования, когда система придёт к положению равновесия при температуре $T_{current}$,

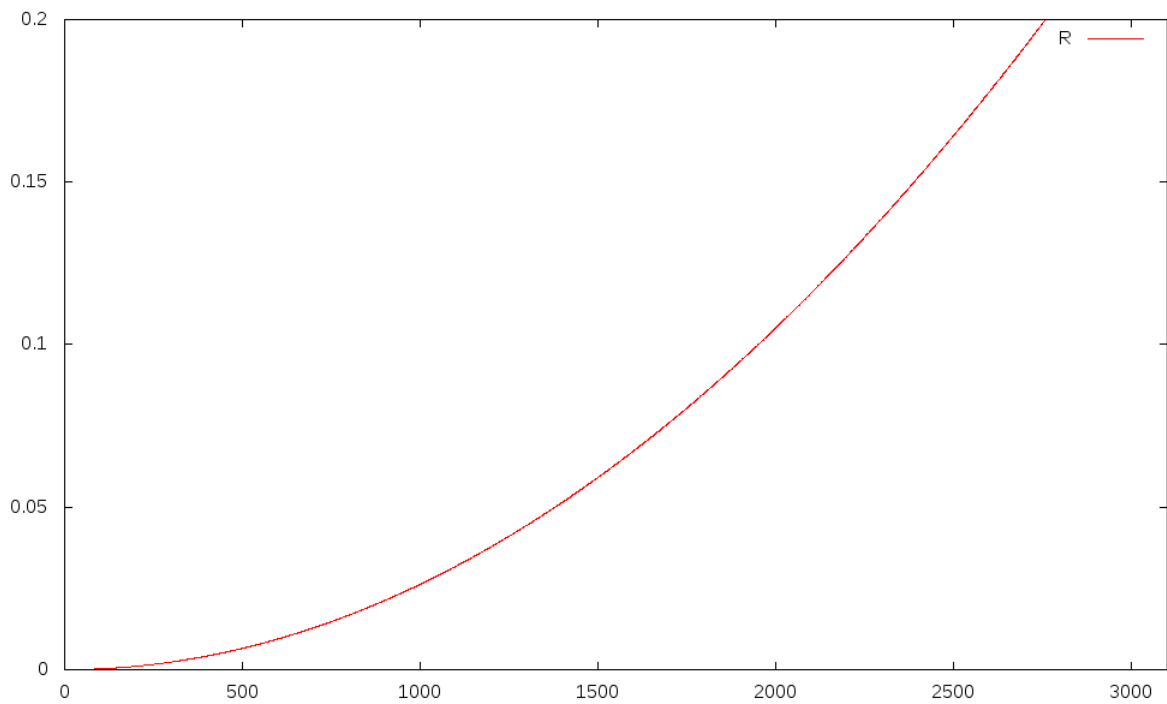


Рис. 1.7. Зависимость среднеквадратического смещения частиц системы от шага по времени.

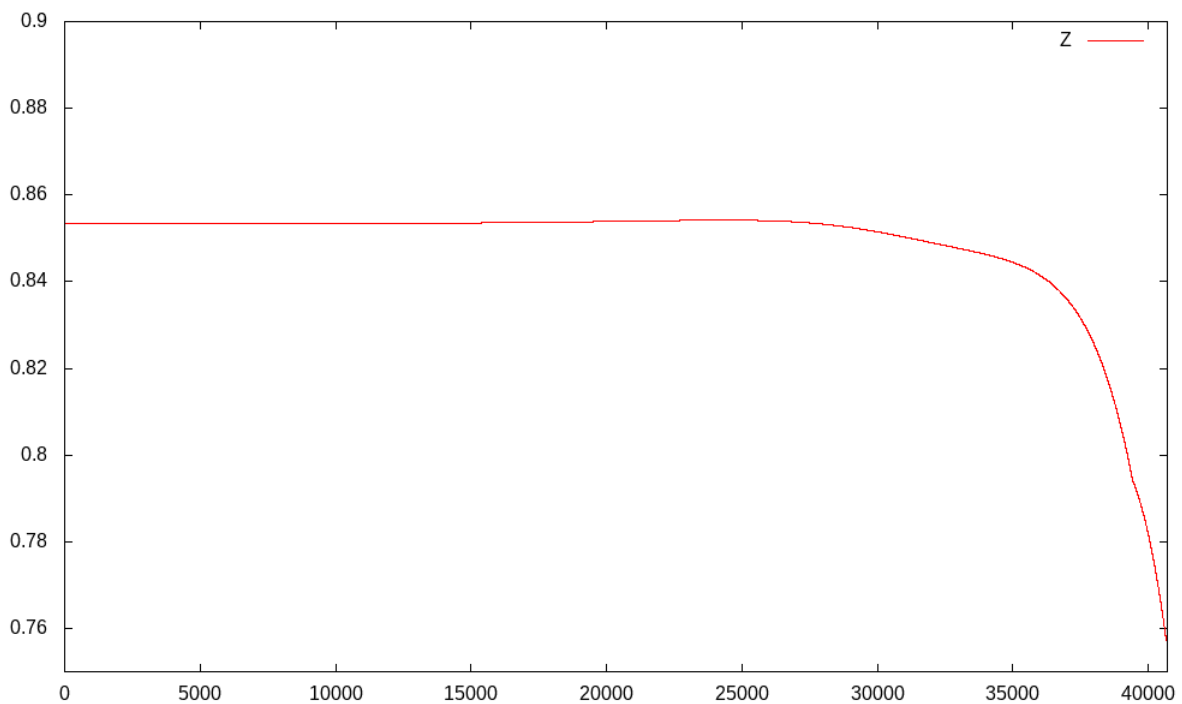


Рис. 1.8. Зависимость автокорреляционной функции скорости частиц от шага по времени.

сообщить системе некий импульс путем умножения скоростей всех частиц системы на коэффициент $\sqrt{T_{desired}/T_{current}}$, где $T_{desired}$ - требуемая температура системы, которой той необходимо достичь.

На рисунках 1.9 и 1.10 представлены характерные зависимости кинетиче-

ской, потенциальной, полной энергий системы от шага по времени, а также температуры и средней температуры системы от шага по времени при реализованном контроле температуры.

Из зависимости энергии системы от шага по времени (рисунок 1.9) при реализованном контроле температуры видно, что и после релаксации системы к заданной температуре закон сохранения энергии продолжает выполняться, хотя полная энергия также релаксировала к другому значению.

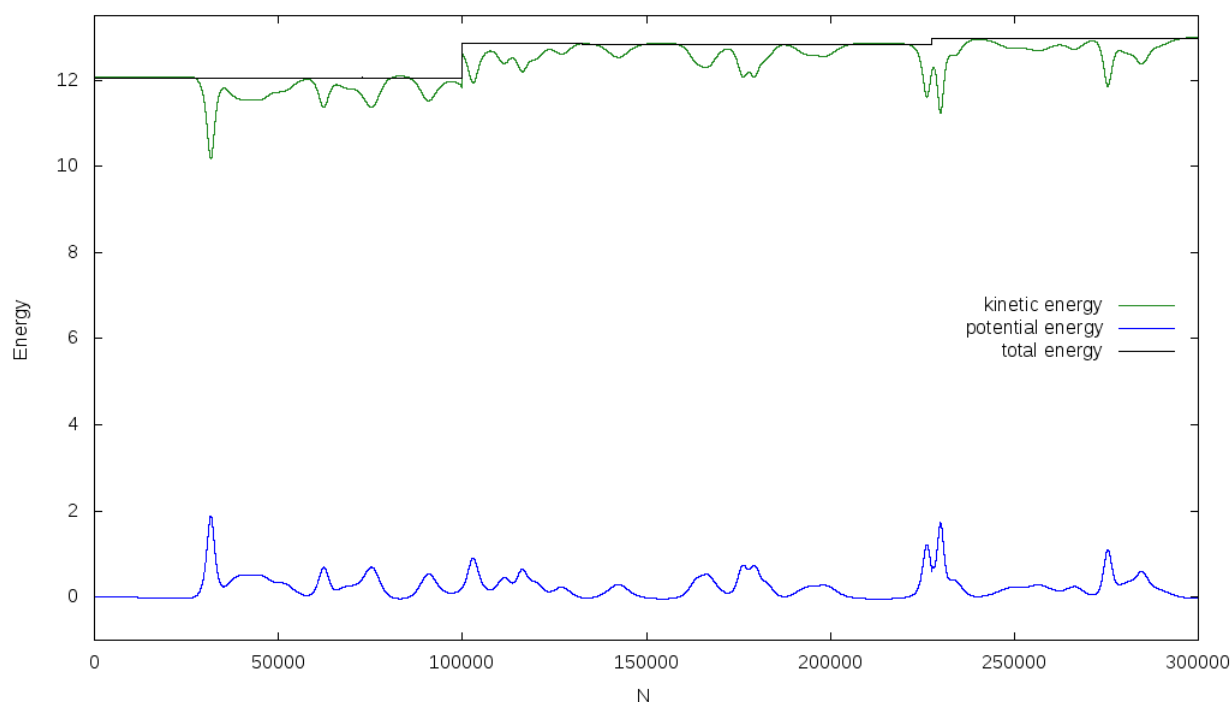


Рис. 1.9. Зависимость средней (зеленый) и мгновенной (красный) температуры системы от шага по времени при реализованном контроле температуры.

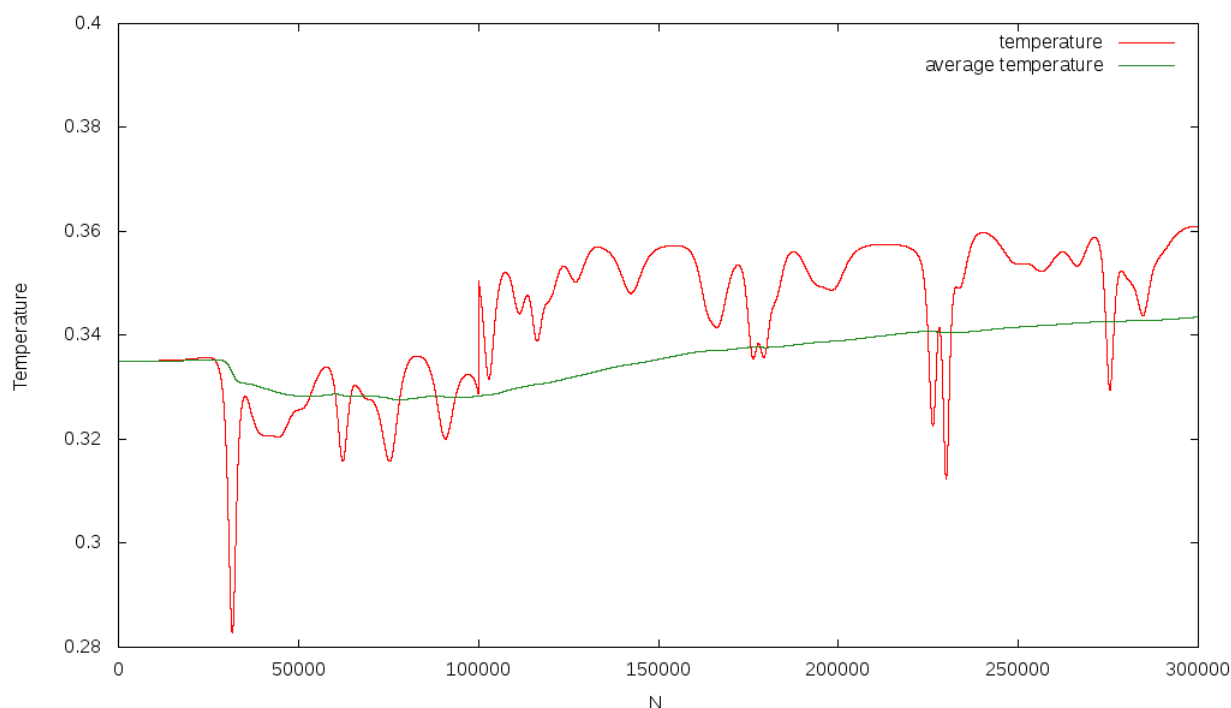


Рис. 1.10. Зависимость средней (зеленый) и мгновенной (красный) температуры системы от шага по времени при реализованном контроле температуры.

1.4. Выводы

В ходе выполнения работы была разработана программа для моделирования двумерной системы частиц, взаимодействующих через потенциал Леннарда-Джонса. Была реализована возможность задания произвольного числа частиц, расчёт кинетической, потенциальной и полной энергий системы, определение и контроль температуры, визуализация всей системы и траектории отдельной её частицы, а также расчёт среднеквадратичного смещения и автокорреляционной функции скорости. В результате моделирования были получены и проанализированы все соответствующие графики зависимостей величин от времени, из которых можно получать информацию о характере движения частиц в системе и оценить правильность реализованного моделирования системы. Запуск программы при различных входных данных, согласующихся с физическими представлениями о динамике многочастичных систем, показал, что моделирование системы происходит корректно.