

运动诱导相分离的分子动力学模拟

——Python 科学计算基础大作业（2025 年春季学期）

王云志 PB21020537

一、作业介绍

相分离在自然界非常普遍，比如水油分离等，这种现象的发生往往来自分子之间的吸引力，但是，在活性体系中，即使粒子之间只有纯排斥力和活性自推进力，也可以发生相分离现象，称之为运动诱导相分离^[1,2]（Motility Induced Phase Separation, MIPS）。

本作业模拟活性体系的最基本模型——活性布朗粒子^[1,2]（Active Brownian Particles），使用过阻尼假设，其运动方程如下：

$$\gamma \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = v\mathbf{n}_i - \sum_{j=1}^N \frac{\partial U(r_{ij})}{\partial \mathbf{r}_i} + \boldsymbol{\xi}_i(t),$$

$$\gamma_r \frac{d\theta_i}{dt} = \eta_i(t),$$

$$\langle \xi_i(t) \xi_j(t') \rangle = 2D_t \delta_{ij} \delta(t - t'),$$

$$\langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = 2D_r \delta_{ij} \delta(t - t').$$

其中： γ 是摩擦系数， γ_r 是转动摩擦系数， v 自推动力大小， ξ_i 是平移噪声， η_i 是转动扩散噪声， U 是两体作用势函数，本文选择 WCA 势函数^[3]：

$$u(r_{ij}) = \begin{cases} 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \epsilon, & r \leq 2^{1/6}\sigma \\ 0, & r > 2^{1/6}\sigma, \end{cases}$$

其中， ϵ 是排斥能量参数， σ 是距离参数。

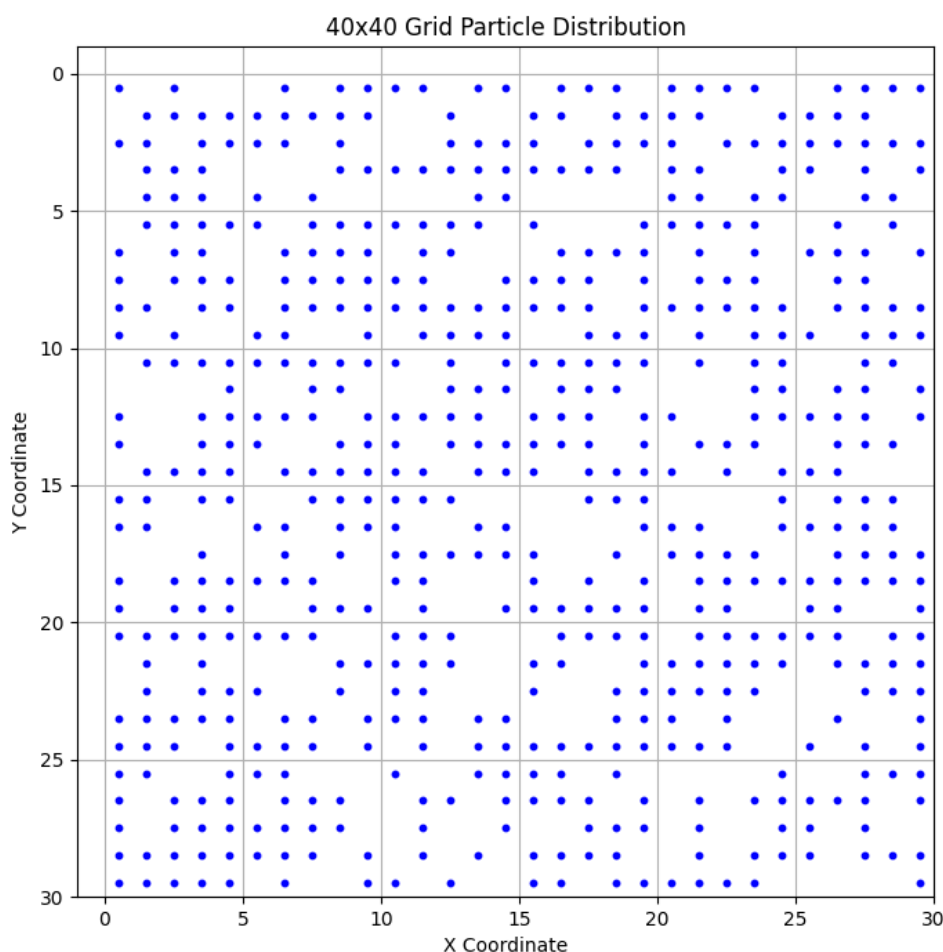
在本作业的数值模拟中，选用二维周期性边界条件假设，固定面积数密度为 0.64，使用命令行传参传入体系尺寸 `box` 与粒子数 `num_particles`、自推进力大小 v 、转动扩散系数 D_r 、热噪声扩散系数 D_t 和随机数种子 `seed`。

二、选题相关性：

1. 分子动力学模拟作为典型的高性能计算任务，作为 Python 作业练习非常合适；
2. 活性体系时近年来兴起的物理学研究方向，针对活性体系的分子动力学模拟方法尚待开发，有独立思考的价值；
3. 本作业中锻炼了 `numpy` 向量化编程的思想、`numba` 库 `jit` 的使用及其对 `numpy` 的兼容技巧、`matplotlib` 绘图、`moviepy` 视频制作、`time` 库计时分析等 Python 科学计算的重要技能；还锻炼了使用命令行传参和使用脚本批量提交服务器任务的重要工程代码能力。

三、核心算法：

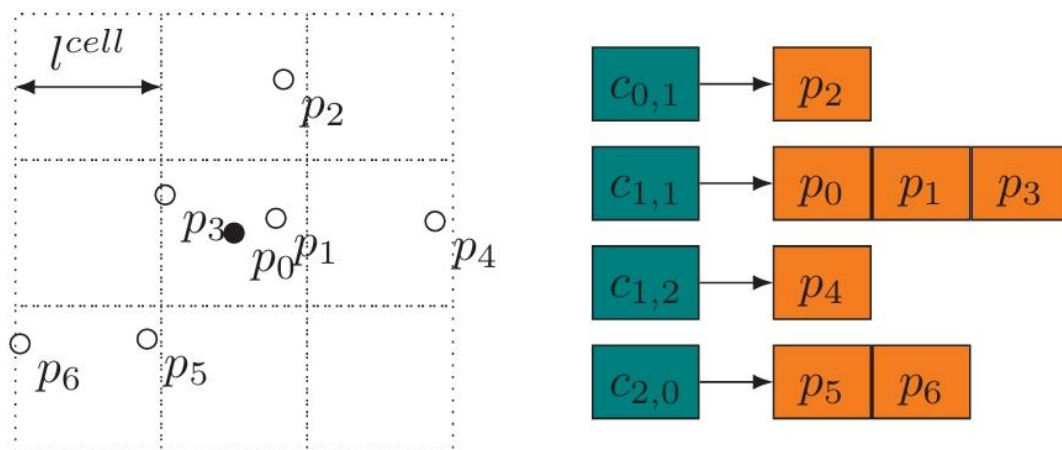
其中，初始化方法使用网格法：先把体系分成若干正方形网格，对网格做编号，然后按照均匀分布生成编号范围内不重复的随机整数将粒子初始化在网格中央。这样的初始化方法使粒子间的最小距离为网格间距，不会导致能量发散问题。



图一：初始化方法示例。

加速算法使用 Cell List 算法,即先划分网格元胞,计算每个粒子所在的元胞,按照元胞的邻居关系,访问元胞内的粒子索引名单计算每个粒子的邻居;在计算邻居之间的作用力时,只需要计算一半即可(只在邻接矩阵的上半区计算即可)。

理论上,若粒子的局域分布密度不变,Cell List 算法可以做到 $O(N)$ 或 $O(N\log N)$ 的时间复杂度。



图二：Cell List 算法：先把粒子分配到元胞中。摘自文献^[4]。

在本作业中,将模拟的主函数分为三个,对应不同的工作模式:仅计算并计时(`md_cell_ana_time.py`),计算并计时且存储粒子轨迹数据且绘制最终位形图像(`md_cell_ana.py`),计算并录制位形变化视频(`md_cell_vedio.py`)。

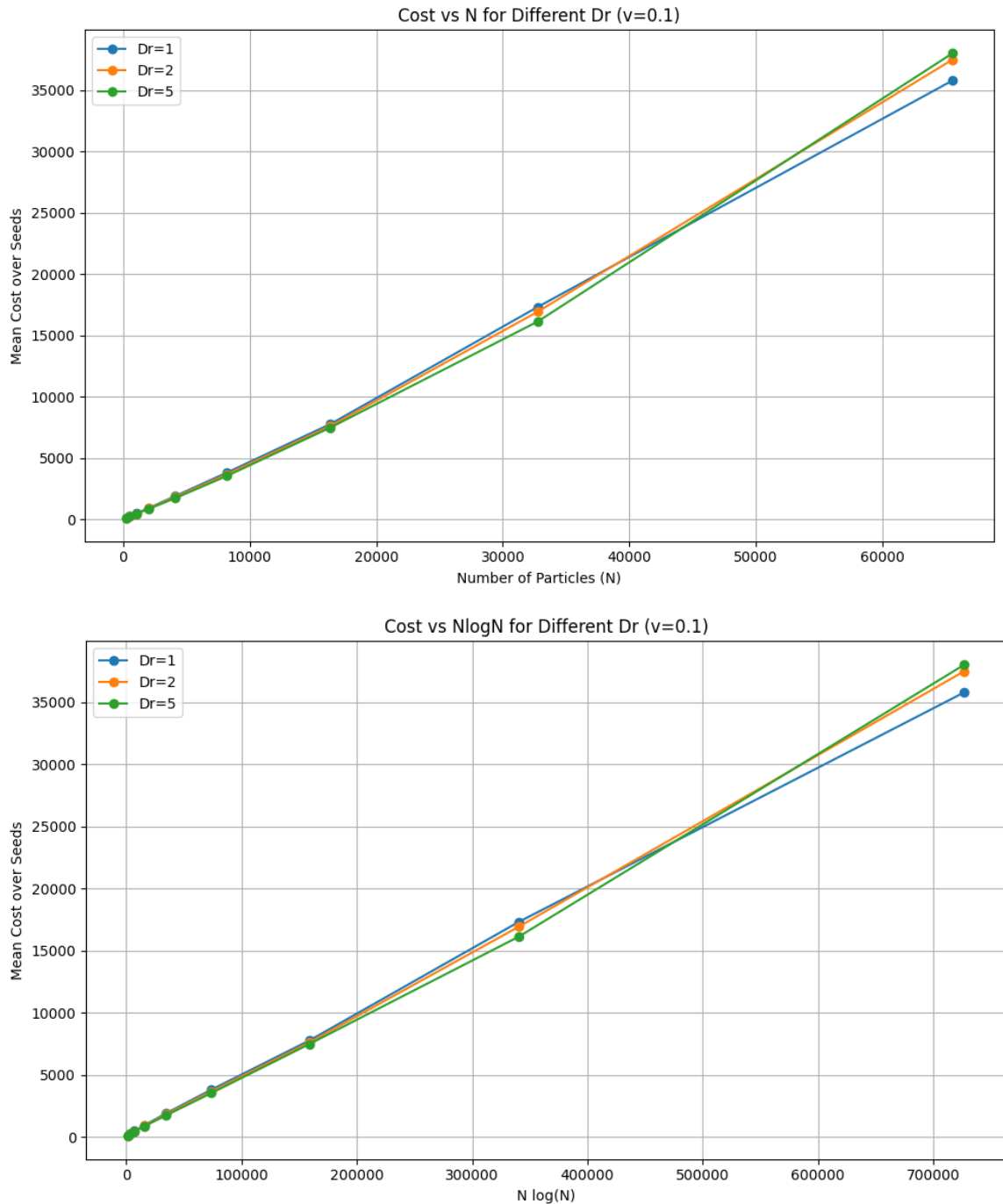
为了保证粒子大小和坐标轴大小的对应,在绘图和存储位形图像时需要计算像素大小使粒子半径与体系坐标轴比例正常。

四、实验结果:

1. 时间复杂度分析

在 $v=0.1$ 参数下的各个 D_r 值下计算不同尺度的时间消耗,每组参数计算 10 组不同的随机数种子,分别按照粒子数 N 和 $N\log N$ 拟合计算时间,得到图三所示的计时图像:其中,不同 D_r 值下的计算耗时不同,这是因为 D_r 值对体系密度分布有显著影响,低 D_r 值下体系形成团簇,空旷的元胞更多,计算时间较短。

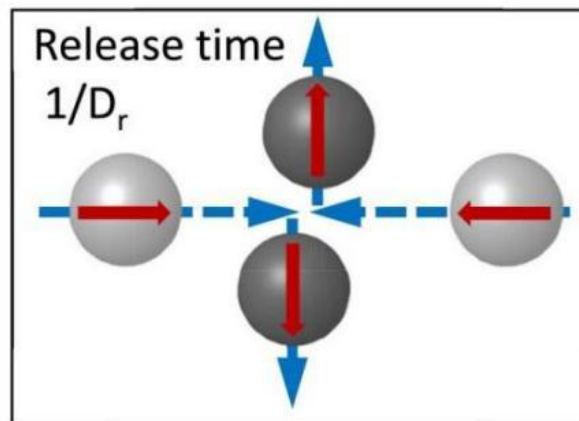
由于尺度偏差不大,按照 N 和 $N\log N$ 拟合计算时间区别不明显,可能需要更大的尺度计算。目前的尺度可以近似认为时间复杂度更接近 $O(N\log N)$ 。



图三：N 和 NlogN 拟合计算时间

2. 物理学表征计算

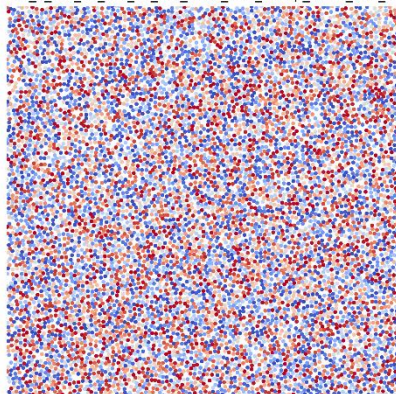
体系发生的 MIPS 程度不同，随着活性自推进力 v 增大，MIPS 程度增加；随着转动扩散系数 D_r 增加，MIPS 程度降低；这是因为，MIPS 的形成原因来自活性粒子撞击后由于自推进力方向没有及时转向造成的阻塞，这个阻塞的解除需要自推进力转向后才能完成，所以转动扩散越强，阻塞解除越快^[1,5]。（见图四）



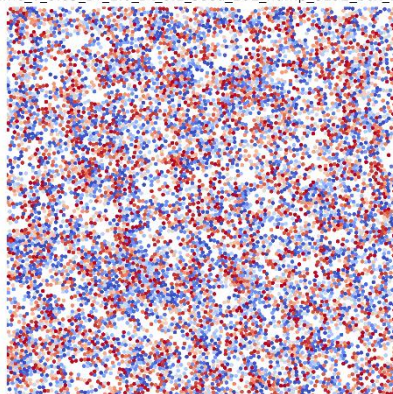
图四：MIPS 的形成：撞击后分离的弛豫时间为 D_r 。摘自文献^[5]。

首先，可以观察不同参数下的终止位形初步判断 MIPS 的发生：（以粒子数 8192 为例）

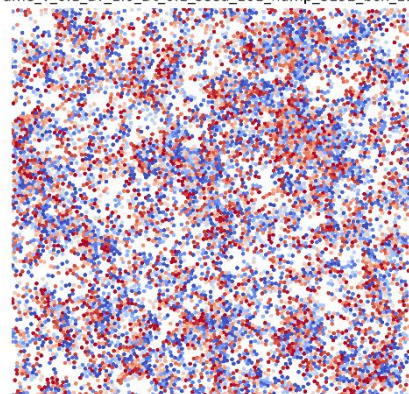
endframe_v_0.0_Dr_1.0_Dt_0.1_seed_101_nump_8192_box_113.png



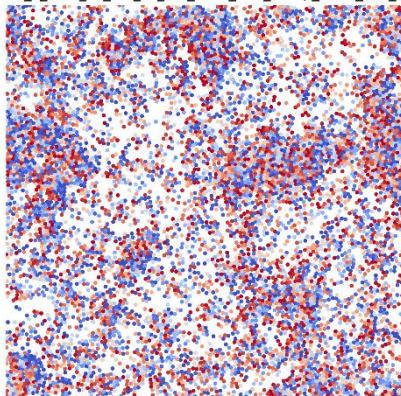
endframe_v_0.05_Dr_1.0_Dt_0.1_seed_101_nump_8192_box_113.png



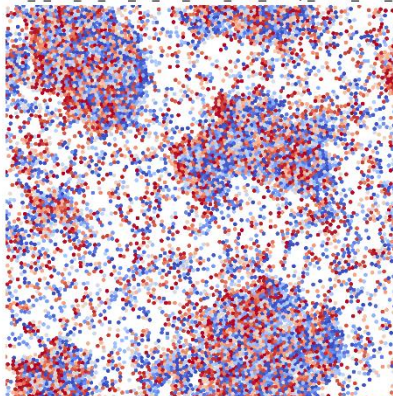
endframe_v_0.1_Dr_1.0_Dt_0.1_seed_101_nump_8192_box_113.png



endframe_v_0.15_Dr_1.0_Dt_0.1_seed_101_nump_8192_box_113.png



endframe_v_0.2_Dr_1.0_Dt_0.1_seed_101_nump_8192_box_113.png

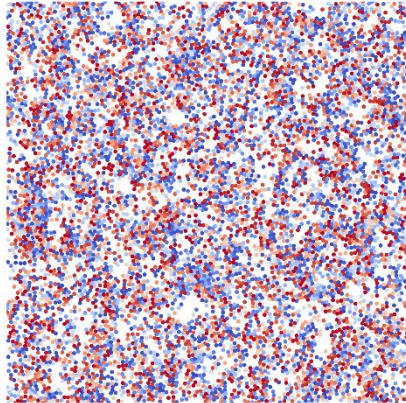
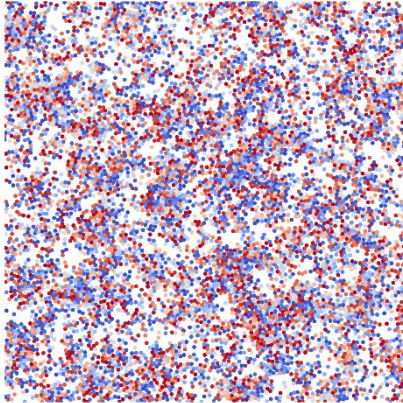
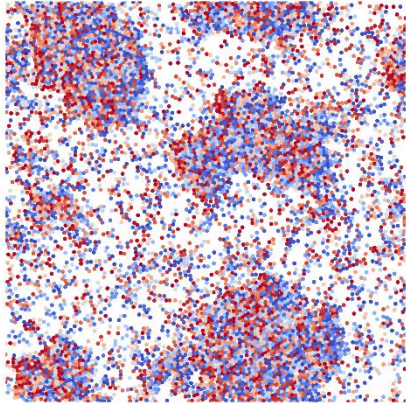


图五： $D_r=1.0$ 参数下，不同自推进力参数下体系的位形。

endframe_v_0.2_Dr_1.0_Dt_0.1_seed_101_nump_8192_box_113.png

endframe_v_0.2_Dr_2.0_Dt_0.1_seed_101_nump_8192_box_113.png

endframe_v_0.2_Dr_5.0_Dt_0.1_seed_101_nump_8192_box_113.png



图六：v=2.0 参数下，不同转动扩散系数的位形。

可以发现，随着活性增大和转动扩散减弱，MIPS 现象越强。进一步，可以计算局部面积粒子数密度：用每个粒子一定半径内的邻居数除以对应面积，计算粒子面积数密度的分布：

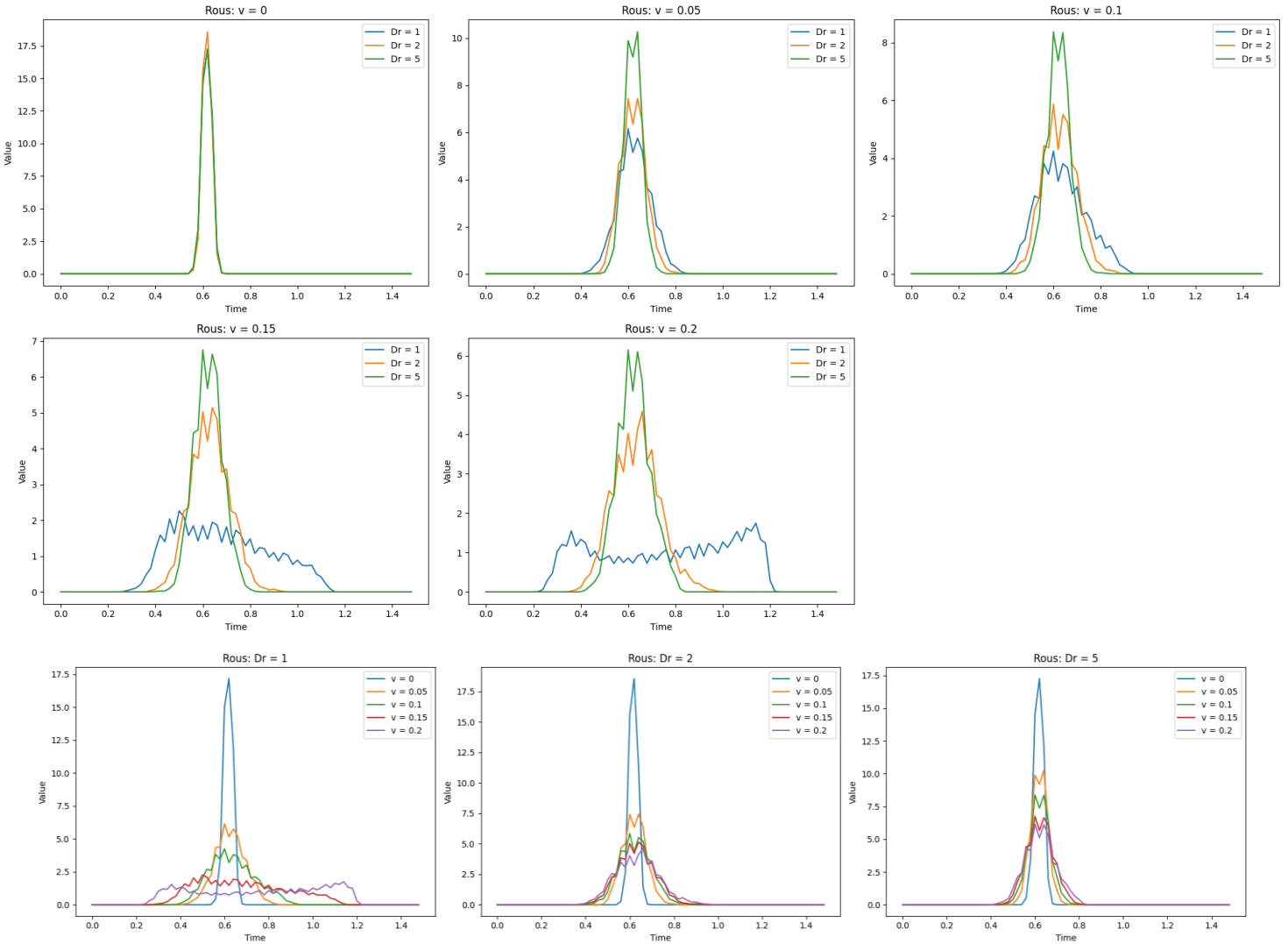


图 7：不同自推进力与转动扩散系数体系的粒子数密度概率分布函数。

可以发现，随着活性增大和转动扩散减弱，粒子数密度的分布逐渐趋向于双峰分布，即体系自发分离为高密度与低密度态，MIPS 现象增强。

除此之外，还可以观察视频（见附件）。

运动诱导相分离的表征还可以用结构因子 $S(k)$ 表征，标准的运动诱导相分离现象在 k 较小处表现出 $S(k) \sim k^\omega$ 的幂律标度^[6]， ω 为负数，可以用 $\log(S(k)) - \log(k)$ 计算较小 k 处的斜率检验。

小 k 处的 $S(k)$ 值越大，说明体系的密度涨落越大，即 MIPS 越显著。

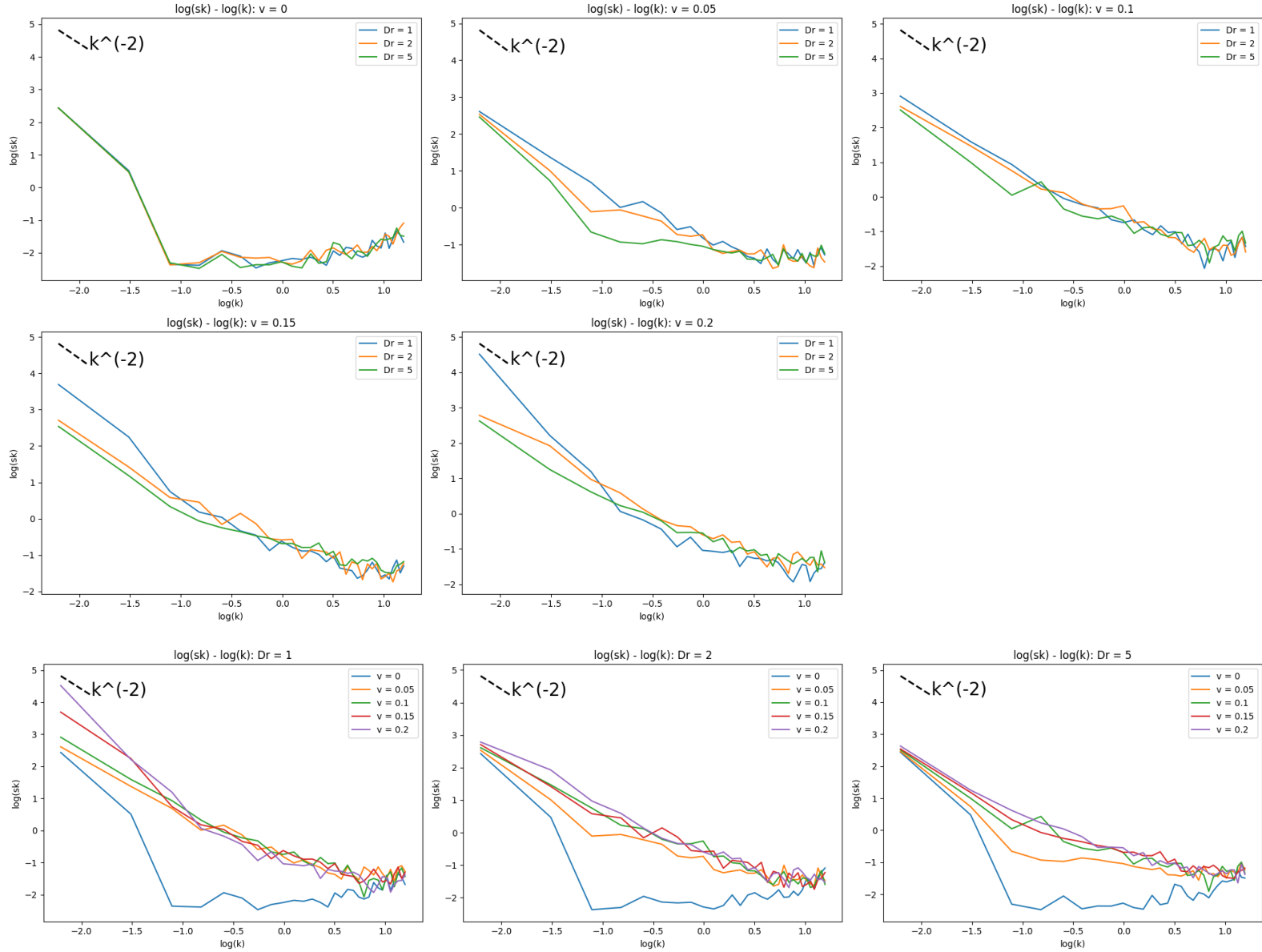


图 8：不同自推进力与转动扩散系数体系的结构因子。

五：参考文献

- [1] 苏杰.活性系统非平衡相变行为的理论研究[博士毕业论文].合肥：中国科学技术大学，2022.
- [2] Redner G, Hagan MF, Baskaran A. 2013. Structure and Dynamics of a Phase-Separating Active Colloidal Fluid[J]. Phys. Rev. Lett. 110, 055701.
- [3] Weeks JD, Chandler D, Andersen HC. 1971. Perturbation Theory of the Thermodynamic Properties of Simple Liquids[J]. J.Chem.Phys. 54,5237.
- [4] Duan XH, Gao P, Zhang M, *et al.* 2020. Cell-List based Molecular Dynamics on Many-Core Processors: A Case Study on Sunway TaihuLight Supercomputer[J]. *SC20: International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis*, Atlanta, GA, USA, 2020, pp. 1-12.
- [5] Su J, Jiang HJ, Hou ZH. 2021. Inertia-induced nucleation-like motility-induced phase separation[J]. New J. Phys. 23, 013005.
- [6] 廖沁怡.趋于阻塞态的结构玻璃中的自由能景观与临界响应[博士毕业论文].合肥：中国科学技术大学，2020.

六：数据声明

.py 文件（模拟）：

md_cell_ana.py: 计算，计时，存储结束位形与历史轨迹。

md_cell_ana_time.py: 计算，计时。

md_cell_vedio.py: 计算，录制视频。

compute.py: 加速算法与初始化算法。

.sh 文件（脚本提交）：

runmips.sh: 批量提交不同参数的 md_cell_ana.py。

runmipstime.sh, runmipstime_bu.sh : 批量提交不同参数的 md_cell_ana_time.py。

runmipsvedios.sh: 批量提交不同参数的 md_cell_vedio.py。

.py 文件（表征）：

structure_ana.py: 计算结构因子。

structure_show.py: 结构因子绘图。

structure_ana_2.py: 计算粒子数密度。

structure_show_2.py: 粒子数密度绘图。

timeana_v1.py,timeana_v2.py: 读取计时结果并绘图。

结果文件:

timesrecord_withoutoutput_v1.txt,timesrecord_withoutoutput.txt: 计时结果, v1 数据不足后补充了第二组。

rous_mips.npy: 粒子数密度计算结果。

sks_mips.npy: 结构因子计算结果。

ks.npy: 结构因子横坐标。

endframes: 结束位形 (1.06G, 放在网页)。

mipsrecord: 轨迹存储 (太大了, 如需要请及时联系发送)。

mipsvedios: 演化视频 (1.42G, 放在网页)。

mipsvediosmake: 生成演化视频的帧 (太大了, 如需要请及时联系发送)。

代码开源: [phywyz-ustc/MIPS_python: Molecular dynamics simulation of MIPS\(the course project of "Python 科学计算基础"\)](https://phywyz-ustc/MIPS_python: Molecular dynamics simulation of MIPS(the course project of)