

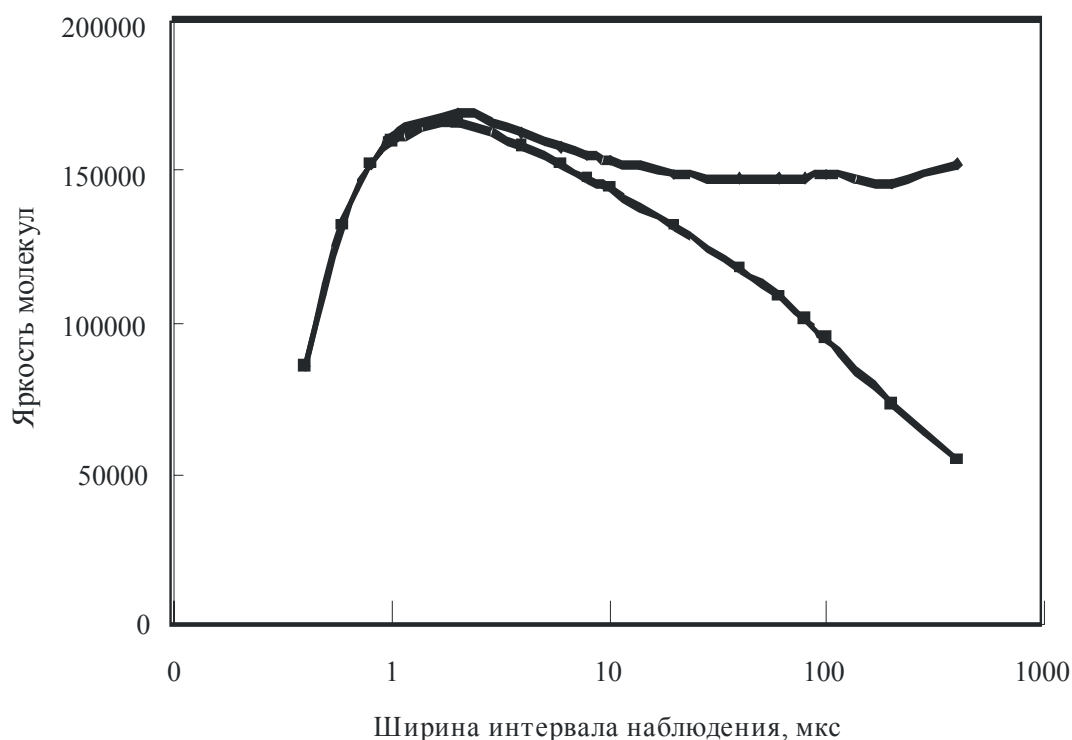


Рис. 2. Зависимость яркости молекул от ширины интервала наблюдения

◆ с коррекцией
 ■ без коррекции

Таким образом, в данной работе предложена модель кумулянтного анализа распределения числа фотоотсчетов с учетом диффузии. Разработанная модель протестирована на смоделированных и реальных данных.

Литература

1. Yan Chen, Joachim D. Muller, Peter T.C. So, and Enrico Gratton. The Photon Counting Histogram in Fluorescence Fluctuation Spectroscopy. Biophysical Journal. 1999.
2. Muller Joachim D. Cumulant Analysis in Fluorescence Fluctuation Spectroscopy. Biophysical Journal. 2004.
3. Skakun V., Novikov E., Apanasovich V., Tanke H., Deelder A. Initial guesses generation for fluorescence intensity distribution analysis. Biophysical Journal. 2006.
4. Дж. Кендалл М. и Стьюарт А. Теория распределений. М.: Наука, 1966. 588 с.
5. Shingaryov I.P., Skakun V. V., Apanasovich V. V. Photon Count Simulation in Fluorescence Fluctuation Spectroscopy // Proc. of PRIP' 2009 int. conference. Minsk 2009. P. 178–182.

ПРОГРАММНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ РЕАЛИЗАЦИИ МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Ю. П. Жишко, А. В. Асташкин, Е. В. Лисица, В. М. Лутковский

Метод молекулярной динамики, в основе которого лежит численное решение уравнений Ньютона для взаимодействующих частиц, относится

к числу наиболее гибких методов компьютерного моделирования жидкостей и газов [1–4]. Этот метод позволяет моделировать различные молекулярные системы и изучать их свойства. В литературе рассмотрено несколько вариантов программной реализации этого метода с использованием алгоритма Верле на языках Pascal [1], Fortran [1, 2] и C [3]. Код программ, приведенный в указанных источниках, обеспечивает моделирование систем одноатомных молекул, имеет консольный ввод-вывод данных и числовой вывод данных, что усложняет применение и ограничивает область их использования. Данная работа направлена на создание программных средств моделирования с развитым пользовательским интерфейсом и возможностью исследования ансамбля более сложных молекул методами молекулярной динамики. Разработанные программные средства являются развитием программной реализации рассматриваемого метода, разработанной применительно к одноатомному газу (аргону) и идеальной жидкости [4, 5].

Модель одноатомной системы реализована на Java платформе в соответствии с алгоритмом, рассмотренном в работе [5]. Потенциал взаимодействия частиц в данном случае описывается формулой Леннарда-Джонса:

$$V(r)=4\varepsilon[(\frac{\sigma}{r})^{12}-(\frac{\sigma}{r})^6], \quad (1)$$

а безразмерные параметры и переменные, входящие в эту формулу, в процессе моделирования полагались единичными ($\varepsilon=1$, $\sigma=1$).

Графический интерфейс пользователя обеспечивает возможность ввода параметров моделирования (количества молекул, размеров рабочего объема, шага интегрирования) с их последующей проверкой. Вывод данных осуществляется в виде графиков, что значительно информативнее и удобнее для восприятия. Тестирование программы показало, что относительное отклонение энергии системы от среднего значения не превышало 5%, что находится в соответствии с законом сохранения энергии в консервативной системе. Полученные результаты представлены графиками зависимостей давления от времени и энергии от времени (рис. 1).

Модель двухатомной системы. Существуют различные способы построения модели для молекул, имеющих неоднородные атомы и различную форму: многоатомное моделирование, использование потенциалов зависящих от ориентации между молекулами и др. [5]. В данной работе использован один из наиболее простых способов.

В отличие от одноатомной модели, где каждая молекула состоит сугубо из одного типа атомов с одинаковыми потенциалами взаимодействия, в двухатомном газе каждая молекула может состоять из двух типов ато-

мов, поэтому необходимо выделять два вида сил: силы взаимодействующих атомов одного вида, так и силы взаимодействия между атомами разных видов.

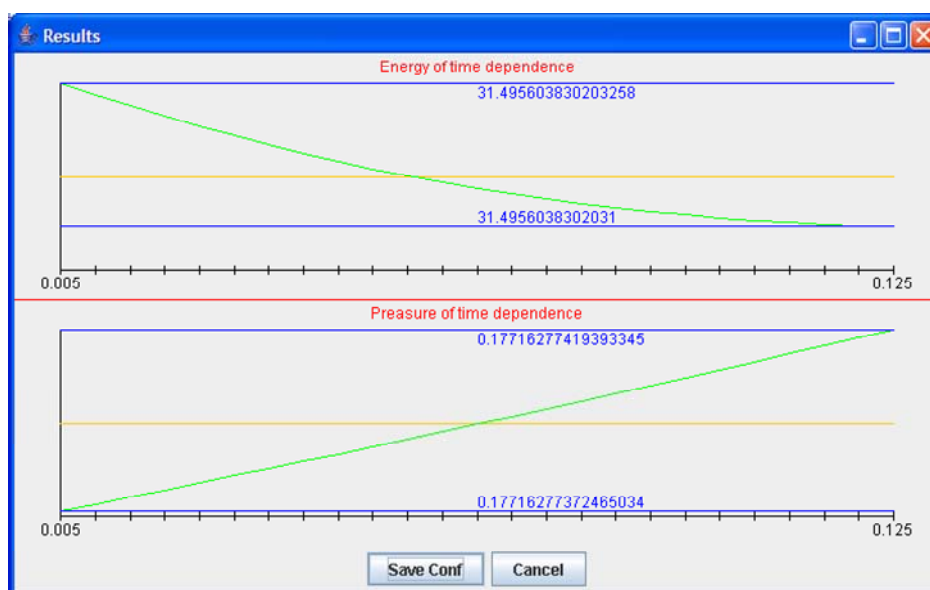


Рис. 1. Результаты моделирования одноатомной системы

Таким образом, на каждый атом действует три различные результирующие силы:

- Сила со стороны атомов того же типа, что и атом.
- Сила со стороны атомов другого типа.
- Сила со стороны второго атома входящего в молекулу.

Третья сила тесно связана с силами, отвечающими за целостность всей молекулы [6]. Для учёта двух оставшихся сил в алгоритме Верле необходимо ввести дополнительные уравнения: для подсчета силы взаимодействия атомов разных видов и для нахождения общей силы действующей на атом (векторное сложение сил). Силы отвечающие за целостность молекул, учитывались приближенно с помощью процедуры, отвечающей за целостность молекулы. Сущность этой процедуры состоит в коррекции расстояния между атомами, составляющими молекулу.

Для моделирования реальных одноатомных газов использовался аргон, а для двухатомных – кислород, параметры которых соответствовали реальным данным [7]. В случае идеальных газов строго выполняются законы Бойля-Мариотта и Гей-Люссака. Эти законы выражаются уравнениями: $PV=CT$, где C – постоянная, зависящая только от массы и химической природы газа, и $PV=P_0V_0(1+\alpha t)$, здесь P_0 , V_0 – давление и объём газа при температуре $t=0$ °C, а α – постоянный коэффициент [1]. Таким

образом, при постоянном давлении для идеального газа наблюдается линейная зависимость давления от температуры (рис. 2), что подтверждает адекватность использованного алгоритма и его реализации.



Рис. 2. Зависимость давления от температуры для двухатомного газа

Представленные программные реализации метода молекулярной динамики используются на кафедре системного анализа при изучении специального курса «Моделирование процессов и систем».

Литература

1. Гулд Х., Табончик Я. Компьютерное моделирование в физике. М., 1990.
2. Frenkel D., Smith B. Understanding Molecular Simulations: from Algorithms to Applications. Academic Press: San Diego, 1996.
3. Rapaport D. C. The art of molecular dynamics simulation. Cambridge, 2004.
4. Лисица Е. В. Особенности реализации метода молекулярной динамики //Тез. докл. XVI Респуб. науч. конф. аспирантов, магистрантов и студентов «Физика конденсированного состояния», 23–25 апреля 2008 г. Гродно, Республика Беларусь. С. 69–70.
5. Лисица Е. В. Моделирование идеальной жидкости методом молекулярной динамики // Сборник работ 65-й науч. конф. студентов и аспирантов БГУ. Минск. 2008. С. 176–179.
6. Эткинс П. Физическая химия. М.: Мир. 2007. 494 с.
7. Интернет-адрес: <http://ru.wikipedia.org/wiki/>

ВЫДЕЛЕНИЕ ГРАНИЦ НА РЕНТГЕНОГРАММАХ

Е. В. Лисица

ВВЕДЕНИЕ

Системы автоматизации диагностики широко применяются в промышленном производстве и медицине. В качестве перспективной задачи рассматривается создание систем автодиагностики [1].