

ПРОГРАММНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ В ЖИДКОСТЯХ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Л. И. Кравцевич, П. В. Прибыток, В. В. Савицкий

На данном этапе развития науки молекулярное моделирование приобрело исключительное значение в биофизических и нанотехнологических исследованиях как один из самых мощных подходов и методов компьютерного анализа. Применения методов молекулярного моделирования достигли той точки отсчета, с которой они способны обеспечить реальный взгляд на процессы и механизмы, протекающие в физических, химических и, в особенности, биологических системах (ДНК, белки и подобные структуры). Точность, эффективность, прямое сравнение с экспериментом плюс возрастающая с каждым годом вычислительная мощность сделали методы молекулярного моделирования незаменимым инструментом в науке и инженерии [1].

Развитие молекулярной динамики шло двумя путями. Первый, обычно называемый классическим, (когда вычисляются траектории атомов) имеет довольно длительную историю. Он восходит к задаче двухчастичного рассеяния, которая может быть решена аналитически. Позднее классический подход был подкреплён полуклассическими и квантовохимическими расчетами в тех областях, где влияние квантовых эффектов становилось значимым. Вторым путем развития метода молекулярной динамики стало исследование термодинамических и динамических свойств систем. Идеи, лежащие в основу этого пути восходят к работам Ван-дер-Ваальса и Больцмана [2].

Рассмотрим классическую задачу. Поскольку мы хотим понять качественные свойства системы многих частиц, пойдем на упрощение задачи, предполагая, что динамику можно считать классической, а молекулы – химически инертными шариками. Мы предполагаем также,

что сила взаимодействия любых двух молекул зависит только от расстояния между ними. В этом случае полная потенциальная энергия U определяется суммой двухчастичных взаимодействий:

$$U = V(r_{12}) + V(r_{13}) + \dots + V(r_{23}) + \dots = \sum_{i < j-1}^N V(r_{ij}), \quad (1)$$

где $V(r_{ij})$ – потенциал двухчастичных взаимодействий.

$V(r_{ij})$ зависит только от абсолютной величины расстояния r_{ij} между частицами i и j . Парное взаимодействие вида (1) соответствует простым жидкостям, например жидкому аргону [3]. Наиболее важными особенностями $V(r)$ для простых жидкостей является сильное отталкивание для малых r и слабое притяжение на больших расстояниях. Одной из наиболее употребительных феноменологических формул для $V(r)$ является потенциал Леннарда-Джонса (рис. 1):

$$V(r) = \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (2)$$

где σ – нормированная единица расстояния, r – расстояние между частицами в единицах σ .

Для расчета траекторий каждой частицы в нашей модели используется алгоритм Верле в скоростной форме [1].

Расчет координаты:

$$x_{n+1} = x_n + v_n \Delta t + a_n (\Delta t)^2. \quad (3)$$

Расчет скорости:

$$v_{n+1} = v_n + \frac{1}{2} (a_n + a_{n+1}) \Delta t. \quad (4)$$

Расчет ускорения:

$$a_{n+1} = \frac{x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1}}{(\Delta t)^2}. \quad (5)$$

Где x_n , v_n , a_n – значение координаты, скорости и ускорения на n -ом шаге расчета, x_{n+1} , v_{n+1} , a_{n+1} – значение координаты, скорости и ускорения на $n+1$ -ом шаге расчета, Δt – шаг по времени.

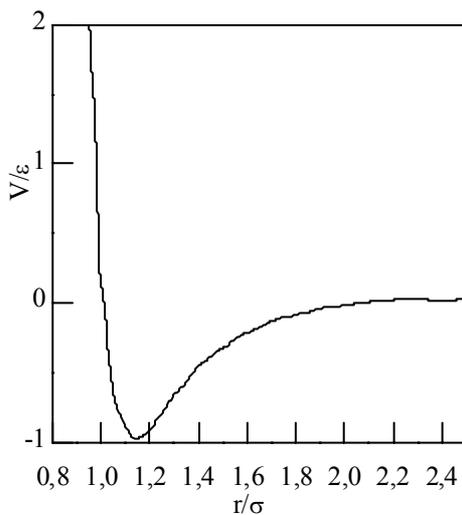


Рис. 1. Потенциал Леннарда-Джонса

Один из способов более точно промоделировать свойства макроскопической сис-

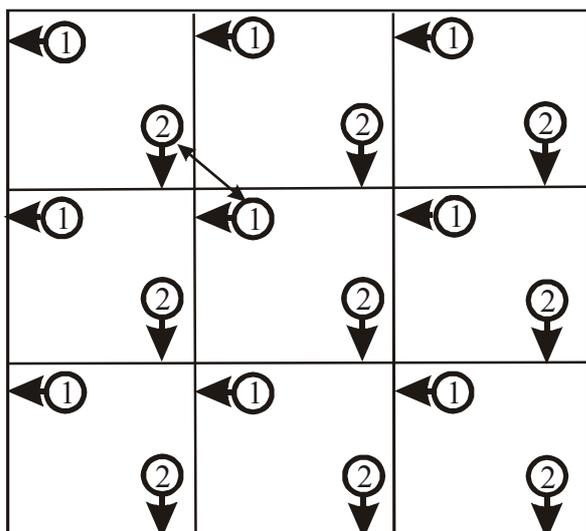


Рис. 2. Пример периодических краевых условий в двумерном случае

темы проиллюстрирован на рис. 2. Предположим, что частицы 1 и 2 находятся в центральной клетке. Клетка окружена периодически повторяющимися собственными копиями; каждая копия клетки содержит обе частицы в тех же относительных положениях. Когда частица влетает в центральную клетку или вылетает из нее с одной стороны, это перемещение сопровождается одновременным вылетом или влетом копии этой частицы в соседнюю клетку с противоположной стороны. Вследствие использования периодических краевых условий частица 1 взаимодействует с частицей 2 в центральной клетке и со всеми периодическими копиями частицы 2. Однако для короткодействующих взаимодействий мы можем принять правило ближайшей частицы [1].

Алгоритм Верле реализован на языке программирования C++, что позволяет легко интегрировать его в любое приложение, а так же легко модифицировать полученный код. Пример программы моделирования на основе алгоритма Верле, а так же результаты решения простейшей задачи молекулярного моделирования представлены на рис. 3 и рис. 4.

В результате работы были решены следующие задачи:

- рассмотрены методы молекулярной динамики;
- разработана программа моделирования на основе алгоритма Верле;
- создана основа для дальнейшего развития программы моделирования.

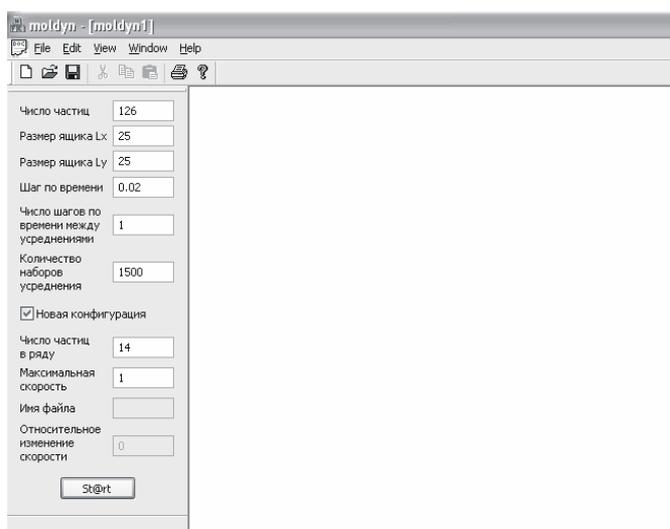


Рис. 3. Окно программы моделирования

Литература

1. Гулд Х, Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике: В 2-х частях. Часть 1. М., 1990.
2. Raparot D. C. The Art of Molecular Dynamics Simulation. Cambridge, 2004.

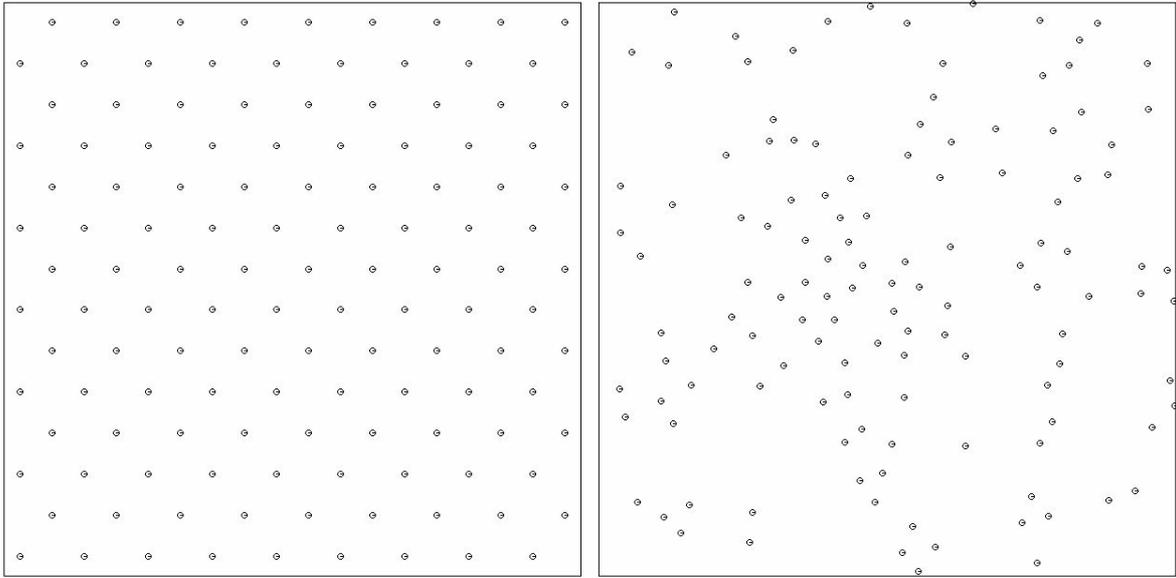


Рис. 4. Результат моделирования фазового перехода твердого телав жидкость

3. *Бриллиантов Н. В., Ревокатов С. П.* Молекулярная динамика неупорядоченных сред. С. П. 1996.