

Краевой конкурс творческих работ учащихся
«Прикладные и фундаментальные вопросы математики»

Математическое моделирование

**Математическое моделирование структуры материала методом
молекулярной динамики**

Голубев Андрей, Кургульский Михаил,
11 кл., МБОУ «Лицей №1» г. Перми,

Волегов Павел Сергеевич,
доцент ПНИПУ, к.ф.-м. н.

Пермь. 2012.

Оглавление

Введение.....	3
Глава 1. Концептуальная постановка задачи	4
Глава 2. Математическая постановка.....	6
Глава 3.Метод решения.....	6

Введение

Проблема изучения свойств новых материалов заключается в том, что невозможно до производства образца исследовать его физические свойства, с другой стороны, экспериментальные исследования при создании новых материалов (в том числе функциональных, для которых свойства заданы наперед) обходятся чрезвычайно дорого. Поэтому единственным способом изучения новых материалов является математическое моделирование. Математические модели помогают рассмотреть тела не только на макро-, но и на микро-уровне, позволяют изучать внутреннюю структуру материала. В свою очередь, среди методов математического моделирования, применяемых для анализа микроструктуры, наиболее физически прозрачным и простым в реализации является метод молекулярной динамики.

Целью работы является разработка и исследование математической модели, позволяющей описать движение молекул при переходе вещества в разные фазовые состояния, при учете различных факторов, влияющих на движение этих частиц.

Модель должна позволять:

- вычислять положение частиц молекул в любой момент времени;
- описывать движение с большого количества молекул в трехмерном пространстве;
- по движению молекул определять вид образующейся структуры
- моделировать процессы перехода вещества из одного агрегатного состояния в другое.

Исходные данные:

- масса и радиус молекулы;
- начальные координаты, начальная скорость молекулы;
- количество молекул.

Глава 1. Концептуальная постановка задачи

Объектом исследования в математической модели берем совокупность атомов в пространстве.

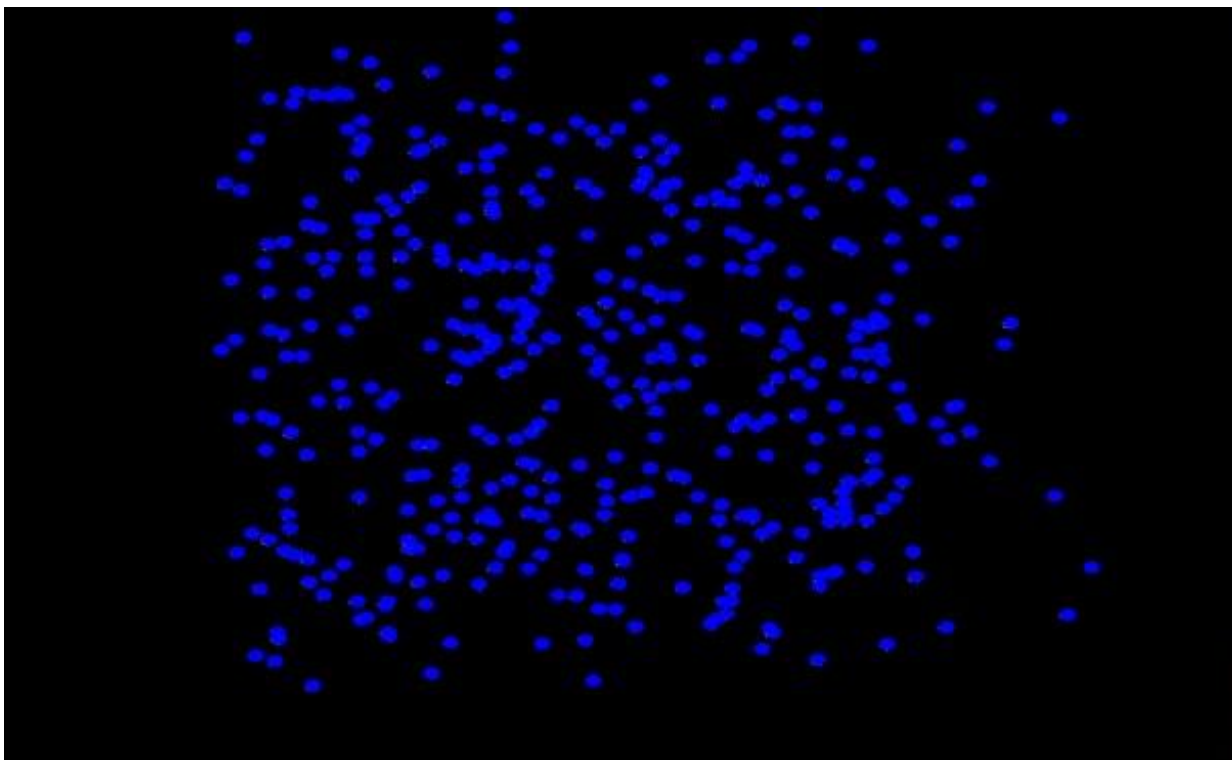


Рисунок 1

Гипотезы:

1. молекулу будем считать материальной точкой массой m , положение которой совпадает с центром масс;
2. движение частиц описывается уравнениями классической механики Ньютона;
3. движение молекул происходит в трёхмерном пространстве;
4. будем считать, что сила взаимодействия двух молекул описывается при помощи выражения:

$$f(r) = \frac{12D}{a} \left[\left(\frac{a}{r} \right)^{13} - \left(\frac{a}{r} \right)^7 \right], \quad (1)$$

где $f(r)$ - сила взаимодействия, D - энергия связи, a - длина связи (то есть расстояние, на котором обращается в ноль сила взаимодействия) (Рисунок 2).

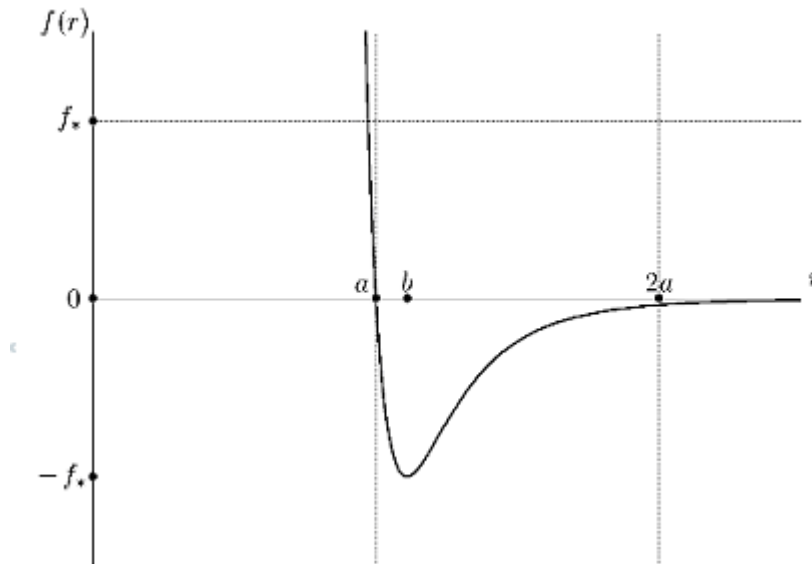


Рисунок 2. Зависимость силы взаимодействия двух частиц от расстояния между ними. (Кривцов А.М., 2002)

$$f(r) = -\Pi'(r), \quad (2)$$

где $\Pi(r)$ - потенциал взаимодействия (потенциал Леннарда-Джонса):

$$\Pi(r) = D \left[\left(\frac{a}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{a}{r} \right)^6 \right], \quad (3)$$

5. распределение модулей начальных скоростей частиц удовлетворяет распределению Максвелла:

$$dn = 4\pi n \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} v^2 dv; \quad (4)$$

6. распределение направлений начальных скоростей частиц случайное равномерное по пространству;

7. для учета диссипации энергии вводится вязкое слагаемое в выражение для 2 закона Ньютона.

$$\vec{\psi}(\vec{r}, \vec{v}) = -B\vec{v} \quad B > 0, \quad (5)$$

где $\vec{\psi}(\vec{r}, \vec{v})$ описывает внешнее неконсервативное силовое поле, которое часто используется для отвода энергии из системы посредством внешней диссипации, силой вязкого трения, B - коэффициент диссипации энергии всей системы.

Глава 2. Математическая постановка

Рассматривается некоторое число частиц, у каждой из них известны начальные условия: скорость и радиус-вектор ($\vec{r}_i; \vec{v}_i$).

Второй закон Ньютона для N взаимодействующих частиц, находящихся под действием некоторого внешнего силового поля имеет вид:

$$m\ddot{\vec{r}}_k = \sum_{n=1}^N \Phi(r_{kn})\vec{r}_{kn} + \vec{\psi}(\vec{r}_k, \vec{v}_k), \quad k = \overline{1, N}, \quad (6)$$

где \vec{r}_k и \vec{v}_k - радиус-вектор и скорость k -ой частицы, m - масса частицы, $\Phi(r_{kn})$ и $\Psi(r_{kn}, v_{kn})$ - консервативные и неконсервативные составляющие силы взаимодействия частиц.

Консервативная составляющая силы взаимодействия частиц равна:

$$\Phi(r) = \frac{1}{r} f(r), \quad (7)$$

тогда с помощью уравнений (1), (5) и (7), подставляя их в (6), можно получить уравнение движения в векторном виде (8) и проекции уравнения движения на оси координат (9)-(11):

$$m\ddot{\vec{r}}_k = \sum_{n:|\vec{r}_{kn}|<2a}^N \frac{1}{r_{kn}} \frac{12D}{a} \left[\left(\frac{a}{r_{kn}} \right)^{13} - \left(\frac{a}{r_{kn}} \right)^7 \right] \vec{r}_{kn} - B\vec{v}_k, \quad (8)$$

$$x: \quad m\ddot{x}_k = \sum_{n:|\vec{r}_{kn}|<2a}^N \frac{1}{r_{kn}} \frac{12D}{a} \left[\left(\frac{a}{r_{kn}} \right)^{13} - \left(\frac{a}{r_{kn}} \right)^7 \right] x_{kn} - B\dot{x}_k, \quad (9)$$

$$y: \quad m\ddot{y}_k = \sum_{n:|\vec{r}_{kn}|<2a}^N \frac{1}{r_{kn}} \frac{12D}{a} \left[\left(\frac{a}{r_{kn}} \right)^{13} - \left(\frac{a}{r_{kn}} \right)^7 \right] y_{kn} - B\dot{y}_k, \quad (10)$$

$$z: \quad m\ddot{z}_k = \sum_{n:|\vec{r}_{kn}|<2a}^N \frac{1}{r_{kn}} \frac{12D}{a} \left[\left(\frac{a}{r_{kn}} \right)^{13} - \left(\frac{a}{r_{kn}} \right)^7 \right] z_{kn} - B\dot{z}_k. \quad (11)$$

Для того, чтобы система уравнений (9)-(11) имела однозначное решение, нужно задать начальные условия: начальные координаты всех частиц и начальные скорости.

Начальные координаты частиц определяются тем или иным способом, а начальные скорости зададим с помощью распределения Максвелла (уравнение (4)). Оно позволяет разбить все частицы на неравнозначные по количеству группы, скорости частиц в которых генерируются случайным образом в заданном диапазоне.

Глава 3. Метод решения

Для решения системы дифференциальных уравнений (9)-(11) будем использовать алгоритм Верле:

$$\vec{r}(t + \tau) = 2\vec{r}(t) - \vec{r}(t - \tau) + \vec{a}(t)\tau^2, \quad (12)$$

$$x: \quad x(t + \tau) = 2x(t) - x(t - \tau) + a_x(t)\tau^2, \quad (13)$$

$$y: \quad y(t + \tau) = 2y(t) - y(t - \tau) + a_y(t)\tau^2, \quad (14)$$

$$z: \quad z(t + \tau) = 2z(t) - z(t - \tau) + a_z(t)\tau^2. \quad (15)$$

Алгоритм Верле, согласно формулам (12)-(15) дает возможность вычислить координаты частицы в некоторый момент времени по ее координатам в два предыдущих и ускорению в этот момент времени. Начальные координаты мы зададим сами, ускорение можно выразить из уравнения (8):

$$\vec{a}_k = \left(\sum_{n:|\vec{r}_{kn}| < 2a} \frac{1}{r_{kn}} \frac{12D}{a} \left[\left(\frac{a}{r_{kn}} \right)^{13} - \left(\frac{a}{r_{kn}} \right)^7 \right] \vec{r}_{kn} - B\vec{v}_k \right) \frac{1}{m}, \quad (16)$$

координаты в первый (следующий за начальным) момент времени вычислим с помощью метода Эйлера:

$$\vec{r}_{1k} = \vec{r}_{0k} + \vec{r}'_{0k} dt, \quad (17)$$

$$x: \quad x_{1k} = x_{0k} + \dot{x}_{0k} dt, \quad (18)$$

$$y: \quad y_{1k} = y_{0k} + \dot{y}_{0k} dt, \quad (19)$$

$$z: \quad z_{1k} = z_{0k} + \dot{z}_{0k} dt. \quad (20)$$

(этот метод позволяет определить координаты в следующий момент времени по координатам и скорости частицы в предыдущий, начальные скорости мы так же задаем сами).

Заключение

Список литературы

Кривцов А.М., К. Н. (2002). *Метод частиц и его использование в механике деформируемого твердого тела.*