

Анализ проблем компьютерного моделирования и визуализации молекулярной структуры жидкостей и поиск способов их решения

Хамайдула Д.М., Пчелкин В.Н.

hamanetda@gmail.com

Аннотация. В статье рассматривается метод молекулярной динамики, а также его основы и особенности. Также рассматриваются важные элементы для изучения жидкого состояния вещества. Была изучена применимость молекулярной динамики.

Ключевые слова: дуговая молекулярная динамика, моделирование, компьютер...

Моделирование микроструктуры жидкостей. При изучении жидкого состояния вещества важно определить его микроструктуру. Зная, как расположены атомы в жидкой матрице в каждый момент времени, в конечном счете можно определить термодинамические, кинетические и химические свойства жидкости. Однако описать микроструктуру жидкого состояния довольно сложно. Положение частиц в пространстве все время меняется, создавая беспорядок ансамбля частиц в виде термически разрушаемого порядка, характерного для кристалла, и нет такого малого параметра, как в газе и твердом теле, с помощью которого можно было бы описать жидкое состояние.

Метод молекулярной динамики

Молекулярная динамика (MD) - это метод компьютерного моделирования, который позволяет проследить эволюцию системы взаимодействующих атомов с течением времени путем интегрирования уравнений движения. Применимость молекулярной динамики определяется доступной вычислительной мощностью и сложностью законов, используемых для описания межатомного взаимодействия. В приложениях материаловедения MD используется для изучения динамики кристаллической решетки материалов, моделирования различных дефектов кристаллической структуры: от точечных (вакансии, дефекты встраивания) до линейных (дислокации) и плоских (межфазные границы, доменные границы и т.д.). Исследования кинетики движения количество дефектов и примесных атомов

в объеме материала и кинетика взаимодействия дефектов друг с другом. Преимуществом метода MD является возможность моделирования атомных ансамблей, как в условиях теплового равновесия, так и в нетермодинамических быстротекущих процессах (например, при формировании каскадов атомных столкновений при облучении или ионной имплантации). Метод молекулярной динамики по сравнению с другими методами компьютерного моделирования обладает рядом полезных особенностей. Во-первых, это позволяет решать проблемы структурных и энергетических преобразований, как в кристаллических, так и в некристаллических материалах. Во-вторых, это дает возможность измерять динамику исследуемых процессов в режиме реального времени. Основным недостатком метода является большое количество машинного времени, необходимого для выполнения вычислений.

Основы метода молекулярной динамики

В методе молекулярной динамики поведение заданного набора атомов описывается в рамках классической механики системой простых дифференциальных уравнений движения в форме Ньютона, численное решение которых осуществляется на компьютере.

Чтобы однозначно решить систему дифференциальных уравнений второго порядка, необходимо задать начальные координаты атомов и их скорости.

Формально молекулярная динамика относится к классу детерминированных методов: для однозначно определенных (заданных) начальных координат и скоростей атомов последующая временная эволюция атомной системы, в принципе, полностью детерминирована. Однако сама траектория, как правило, не представляет особого интереса для исследователей. Чаще всего молекулярная динамика используется как метод статистической механики, который оправдан для эргодических систем. Для таких систем усреднение определенной физической величины по времени совпадает с ее усредненным значением по набору конфигураций, распределенных в соответствии с некоторой статистической функцией распределения или статистическим ансамблем.

Справочный материал:

1. Колокол А.С. «Микроструктурное моделирование простых жидких металлов» Москва, 2007 год.
2. М.А. Шилов В.В. Веселов, д-р техн. наук, проф. «КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ» Иваново, 2010

Сведения об авторах:

Хамайдула Данил Михайлович – ст.гр. КМДм-22, Донецкий национальный технический университет

Пчелкин Владимир Николаевич – доцент кафедры «Компьютерное моделирование и дизайн», Донецкий национальный технический университет