

计算机模拟方法促进热学课程教学创新

——分子动力学模拟在分子动理学理论教学上的应用

张扬果儿, 陈 楚

新疆大学物理科学与技术学院, 新疆 乌鲁木齐

收稿日期: 2022年10月18日; 录用日期: 2022年11月4日; 发布日期: 2022年11月14日

摘 要

热学课程为物理专业一年级本科生的必修专业基础课, 具有很强的承上启下的功能, 但学生受制于当时的能力水平, 在知识上难于理解某些过于抽象的知识点, 在能力培养上个性化的需求难以满足, 在课程思政上很难将所学与国家地区需求相结合。本文尝试在课程早期即分子动理学理论部分引入分子动力学模拟方法连接以上三个方面, 实现在知识掌握上提高对热学基础知识的理解和掌握, 并提高与其它专业课程之间的关联度; 在能力培养上基于学生的个性化需求, 培养学生的科学精神和科研兴趣; 在课程思政方面, 引导建立服务国家和地区需求的意识, 培养学生的家国情怀。

关键词

热学课程, 分子动力学模拟, 分子动理学理论

The Teaching Innovation of Thermology Course Based on Computer Simulation Method

—Application of Molecular Dynamics Simulation in the Teaching of Molecular Kinetics Theory

Guoer Zhangyang, Chu Chen

College of Physical Science and Technology, Xinjiang University, Urumqi Xinjiang

Received: Oct. 18th, 2022; accepted: Nov. 4th, 2022; published: Nov. 14th, 2022

Abstract

Thermology is a fundamental curriculum of physics and plays an important role in the study of

major courses. Students should meet some difficulties during the study of thermology: the abstract concepts lead to the difficulty in the understanding of the specific knowledge; the personalized requirements cannot be satisfied owing to the loss of ability training; the ideological and political education in curriculum is hard to be related with the national needs. This paper attempts to introduce molecular dynamics simulation method in the early part of the course, namely molecular kinetics theory. Molecular dynamics simulation is used to connect the above three aspects. The simulation improves the understanding of the basic knowledge of thermology and promotes the correlation with other major courses. Based on the individual needs of students, students' scientific spirit and the research interest should be cultivated. In the ideological and political aspects of the curriculum, it guides the establishment of the consciousness of serving the needs of the country and the region, and cultivates students' feelings of home and country.

Keywords

Thermology Course, Molecular Dynamics Simulation, Molecular Kinetics Theory

Copyright © 2022 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

热学课程作为物理学本科专业课程,是继力学课程后在一年级第二学期所开设的专业必修课程。作为专业基础课程,热学研究的是有关物质热运动以及和热相联系的各种规律的科学,主要分为分子动理学理论,热力学和物态与相变三大部分,涉及众多概念。作为低年级本科生重要的专业课,热学课程在内容上,即承接中学物理热学相关部分,又是开启热力学与统计物理课程的基础知识;在方法论上,从力学研究对象——机械运动所使用的确定论的方法过渡到热学研究对象——热运动所使用的概率论的方法;在教学目标上,即传授学生热学的基本概念,基本知识和基本原理,也要利用热学的基本思想和方法提高学生的科学精神和创新能力。但是,在教学过程中,存在着以下三个问题:一是由于热学课程的研究对象即可以是微观上的原子分子也可以是宏观上的气象活动,热学相关规律多且不像力学联系紧密,对学生的抽象能力要求较高;二是由于目前的热学知识内容主要还是以基本的热学概念和规律为主,虽然热学的研究范围很广,但在内容上与目前的研究前沿很难产生直接关联,更别说满足学生个性化诉求和多样化发展的要求;三是一年级本科生在知识储备上确实不够充分,因此在科研能力和创新能力的培养方面依然存在较大挑战。

随着我国信息技术的快速发展,计算机在高校中得到普及,为计算机模拟方法的广泛应用提供基础。同时,由于实验上表征手段的限制,系统的演变过程在实验中很难被直接观测到,计算机模拟方法可以重现研究系统的演变过程并以图示的方法直观地呈现给学生,这将有效增加学生对相关概念和过程的理解[1]。计算机模拟的方法很多,如第一性原理方法[2],有限元方法[3],和分子动力学模拟方法[4]等。考虑到热学课程的研究对象为包含大量分子的系统,并且学生也已具备一定的力学知识的储备,在这些模拟方法中,对于包含有大量分子数的研究系统而言,分子动力学模拟具有程序编写难度低,物理背景相对简单,对计算资源需求小并且结果相对可靠等优点而成为比较适合应用于热学课程教学的辅助手段。与计算机程序课程,如C语言,Python语言等课程相结合,既能降低掌握分子动力学方法的程序编写难度,又能在一定程度上实现课程之间互联互通。任何程序都是为了实现某一目的而存在,学生在经过一

定的知识和能力的储备后, 利用分子动力学方法这一工具探索个性化目标或解决某一个具体的科学问题也能做到水到渠成, 在探索的过程完成对知识的深入了解并使创新能力和科研能力得到锻炼, 更为关键的是, 因此而具有了解决问题的信心和能力, 这为学生进入高年级后参加各类科研和创新活动提供一定的基础。

2. 分子动力学模拟对热学课程教学的促进作用

2.1. 在知识掌握上提高对热学基础知识的理解和掌握, 并提高与其它专业课程之间的关联度

一个基本的分子动力学程序包含以下步骤: 1) 初始化各分子的位置速度; 2) 基于分子间势函数计算分子间相互作用力; 3) 利用牛顿力学计算下一个时间步长后的位置和速度; 4) 计算和位置与速度相关的物理量; 5) 重复 2~4 直到程序结束。由以上流程可以看出, 分子动力学模拟和热学相关的内容包括: 理想气体微观模型, 分子间相互作用势能, 温度的微观意义, 宏观物理量的微观统计诠释, 平衡态和弛豫过程等, 其中大部分内容和《热学》教材中分子动力学理论部分相关[5], 比较适合在课程开始时逐渐引入分子动力学模拟的内容, 为学生本学期中熟悉掌握分子动力学模拟方法并进行个性化研究提供足够的适应时间。除此之外, 分子动力学模拟方法可以再现热学过程更直观的理解基本知识, 通过与其它课程关联的部分加深对热学概念的理解。

在热学课程授课中, 有一些概念如平衡态, 弛豫时间和涨落等过于抽象, 学生理解存在一定困难, 通过分子动力学模拟可以直接观察相关过程, 降低理解的难度, 帮助学生快速准确的掌握相关知识。在关于平衡态和弛豫时间的内容中, 平衡态的定义为: 在没有外界影响的条件下, 系统宏观状态保持不变的状态; 而弛豫时间是指系统由一个平衡态到达另一个平衡态所需要的时间。无外界影响的条件对应于体系与外界无能量和粒子交换的过程, 即体系的分子数(N)和总能(E)保持不变, 再考虑到通常容器的体积(V)是不变的, 这时的系统即为统计物理学中的 NVE 系综(微正则系综)。通过分子动力学模拟孤立系统即 NVE 系综为例来讨论弛豫时间和平衡态。启动一个分子动力学模拟需要给系统每个分子随机赋予初始坐标和速度, 系统的初始状态明显偏离平衡态, 因此, 体系达到平衡态所需要的时间即为弛豫时间。由于系统的总分子数和宏观状态参量中体积始终不变, 即分子数密度(n)不变, 根据理想气体温度(T)和压强(p)的公式 $p = nkT$ 可以看出, 压强和温度只有一个是独立的, 如果以温度为列, 通过在不同时刻对体系温度进行采样, 从其中可以直观的看出, 体系温度在某个时间之前一直有幅度较大的震荡, 而之后, 温度会在某个固定值附近轻微震荡。温度震荡较大的区域即为弛豫过程, 之后震荡较小的部分对应于体系达到平衡态, 而在平衡态, 体系温度依然有轻微震荡, 则对应于系统温度的涨落。通过改变系统的分子数, 也可以直观看到小分子数时温度的涨落与大分子数时明显增大, 即验证涨落与分子数成反比的关系。

在热学中, 一些物理知识和其它课程存在交叉, 如分子间作用力来源于电磁学中的电磁力, 这种交叉可以用来建立不同课程间的连接, 强化物理学专业内各门课程的联系和逻辑性, 为各门课程形成育人合力提供可能。在分子动力学模拟中, 一个关键的近似是通过有限个分子数目的系统的时间平均值来代替真实系统的测量值。在真实的实验中, 平衡态下, 测量值来源于一定时间间隔内进行测量的平均值, 该测量值与时间无关, 并且经过足够长时间, 该系统会经历所有可能的状态。这种经历所有可能状态的过程即为统计物理中的各态历经假设。在平衡态下, 孤立系统的各部分具有相同的宏观量, 因此可以通过测量局部的物理量来代替整体上的物理量, 如同只需要测量一个角落的温度就可以知道整个房间的温度。

在分子动力学模拟中, 速度是一个关键物理量, 对于孤立的热学系统, 体系的温度和系统的无规则热运动有关。但是, 在模拟过程中, 体系的速度分布可能会导致体系整体出现平动和转动, 利用力学知识, 通过对速度的三个分量进行求和, 判断体系是否有平动。在理想气体温度公式中, 温度和气体分子

平均平动动能相关, 而分子平均平动动能是分子无规则热运动时的平均平动动能, 不包括整体定向运动动能。因此, 当体系所有分子速度在三个方向上的分量和不为零, 则意味着有整体的平动。此时, 只要对每个分子添加一个适当的反向动量即可消除整体的平动。整体运动除了平动外, 还有转动, 即所有质点相对于质心的合力矩在三个方向上的分量不为零。根据力学知识, 改变力矩可以通过调整力和力臂的大小进行改变。在分子动力学模拟中, 力臂和力都与位置有关, 直接调整位置是一种很复杂的方式。简单适用的方式是对每个分子增加一个阻力矩来消除转动, 对于同一个分子, 阻力矩和旋转力矩具有相同的力臂, 只要对分子所受的力进行调整即可。考虑到孤立体系没有外力, 一些常用的势函数的形式为对势且为保守势, 因此只需要在位置和速度初始化时进行力和速度的修正即可, 其后会一直保持没有整体运动的情况。

分子动力学模拟中另一个关键量是势函数。热学课程中认为, 气体分子间作用力为复杂的电磁相互作用力, 是保守力, 但对力的来源没有具体说明。在热学教材中最常用到的势函数为 Lennard-Jones 势(L-J 势), 包含两项, 排斥项和吸引项, 这种相互作用方式呈现轴对称性, 只和两个分子的距离有关[6]。L-J 势的这些特性很容易和静电相互作用相联系。对于中性无磁性分子而言, 分子间的排斥力来源于分子间电子云因靠近而产生的排斥作用, 而吸引力则来源于分子间色散力。虽然排斥力和吸引力都来自分子的量子效应, 但从经典物理的角度看, 也可利用分子的偶极(包括固有偶极和瞬时偶极)间的相互作用得到。偶极间相互作用在电磁学教材中有明确的相互作用公式[7], 但是其相互作用能与分子间距离的三次方成反比, 和 L-J 势里的吸引项是距离六次方成反比有明显不同, 其原因在于电磁学中计算的是具有确定方向的两对偶极子间静电能, 但是, 对于热学系统, 分子的偶极矩方向各有不同并与温度有关, 通过计算统计平均值后的静电能正好与距离的六次方成反比并和温度相关[6], 这正是两门课程之间的区别。考虑到中学物理的学习方式, 对于在同一学期学习电磁学和热学的学生而言, 有意识强调两门课程之间的区别是很有必要的。

2.2. 在能力培养上基于学生的个性化需求, 培养学生的科学精神和研究兴趣

创新能力是本科生培养的重要目标之一, 作为一年级本科生, 大多数学生物理知识的储备还很欠缺, 创新能力的培养应该建立在科学精神和研究兴趣的基础上。目前我院的情况是, 大部分本科生对创新项目望而却步, 其根本原因不在于没有兴趣, 而在于不知道如何入手, 缺乏信心。分子动力学模拟方法是一种成熟的数值模拟方式, 适用于研究基于位置和速度相关的物理量的理论模拟, 同时, 免费开源的程序也有很多, 功能强大, 相关的网络社区也很活跃, 这都极大的降低了学习成本。最近几年从中国大学生物理竞赛和各级各类大学创新项目中可以看出, 各种计算机模拟方法在这些项目中开始逐渐流行。分子动力学模拟的研究体系从几个原子的团簇体系到几万个原子的高分子体系, 可应用于从几何结构到热力学性质的预测和分析中, 广泛的适应范围可以满足大部分学生的研究兴趣。通过组成兴趣小组来完成一个共同的研究目标, 并定期进行小组报告, 这种基于兴趣的学习方式无疑是更有效、更持久的。

在热学课程中在关于理想气体状态方程和理想气体微观模型虽然都是理想化模型而非真实气体, 但其根源是真实气体共性的抽象, 这种抽象出来的理论模型具有坚实的实验基础。在分子动力学模拟方法中, 以势函数为例, 其发展经历了由实验结果拟合得到的经验势, 到结合第一性原理方法得到的半经验势, 以及完全基于第一性原理的分子动力学方法等。每一种势函数的发展都经历过大量的测试和修改, 既有理论依据, 也要符合实验结果。在针对具体的体系和研究目标时, 根据具体情况选用不同的势函数和模拟参数, 选取的标准也是以模拟结果和实验结果是否相符为准, 最终利用合适的势函数和参数得到实验上难以获得的信息并加深对实验现象的理解。由此可见, 尊重实验事实, 以真实的实验结果为依据的分子动力学模拟方法体现了具体问题具体分析和实事求是的科学精神, 并与热学课程所倡导的科学精神相契合。

2.3. 在课程思政方面, 引导建立服务国家和地区需求的意识, 培养学生的家国情怀

近年来, “高校科研服务于国家需求”在校内外的广泛宣传下也号召了很多本科生开始参与相关研究, 这同样也是本科物理学专业的建设目标。作为物理学专业下的一门专业基础课, 热学课程也承担着培养学生具有相关意识和能力的任务。长期以来, 由于普通一年级学生不具备科研能力, 接触科研少, 畏难情绪大, 主动参与服务国家需求的意识差。如何解决让低年级学生既可以加强课程知识的理解和掌握, 又可以部分参与科研服务国家战略需求这一矛盾成为热学课程思政方面急需解决的难点。

二氧化碳的存储和利用是我国实现碳达峰和碳中和目标的关键。由于宣传到位, 教师对学生在对相关内容的引导方面难度得到降低, 学生参与的意愿强烈。在科研前沿, 分子动力学模拟方法也常用于模拟二氧化碳分子在不同材料上的吸附过程。受制于科研能力水平, 普通学生在一个学期的时间内不太可能出现科研创新成果, 但是, 通过参与相关科研工作, 可以了解二氧化碳分子被吸附的物理机制, 这背后涉及到的物理知识, 以及目前相关研究工作急需解决的问题等, 这些都毫无疑问会对学生今后的学习产生积极影响, 逐渐做到将个人的发展和国家的需求相结合。

3. 总结

本文通过在热学课程中引入分子动力学模拟方法达到连接知识讲授, 能力提升和课程思政三个方面, 为实现学生全面发展所作的尝试。在具体的实践过程中, 还应该注意分子动力学模拟应用于热学课程教学, 其目的也是为实现热学课程的教学目标: 在知识学习上, 基于地区院校学生学情, 主要提高学生在热学微观和宏观理论及其应用的理论基础, 而非舍本逐末, 过于介入统计物理学和分析力学的相关知识; 在能力上基于学生个性化需求, 以增强低年级学生学习兴趣为基础培育学生的科学精神, 培养学生的研究兴趣, 而非使学生具备科研能力, 揠苗助长; 在课程思政方面, 培养学生家国情怀, 服务国家和地区需求的意识, 而非坐而论道, 好高骛远。

致 谢

本项目得到新疆大学马慧慧, 齐冠淋, 彭子诺同学在程序编写与数据处理方面的大力帮助。

基金项目

本项目受新疆大学大学生创新训练计划资助项目 XJU-SRT-21041 支持。

参考文献

- [1] 丁鹏. MATLAB 在高校“传热学”教学中的应用与实践[J]. 中国电力教育, 2014(9): 149-150.
- [2] 潘郑宇, 崔逸阳, 李绍秀. 基于第一性原理的吸附物质相互作用机理研究进展[J]. 能源与环境, 2017(4): 12-13.
- [3] 周浩, 张北记. ANSYS 有限元分析软件在热分析中的应用[J]. 化工管理, 2016(12): 115.
- [4] 杨萍, 孙益民. 分子动力学模拟方法及其应用[J]. 安徽师范大学学报: 自然科学版, 2009, 32(1): 51-53.
- [5] 秦允豪. 热学[M]. 北京: 高等教育出版社, 2018: 1-112.
- [6] 伊利亚 G. 卡普兰. 分子间相互作用: 物理图像、计算方法与模型势能[M]. 北京: 化学工业出版社, 2013: 8-22.
- [7] 赵凯华, 陈熙谋. 新概念物理教程电磁学[M]. 第 2 版. 北京: 高等教育出版社, 2006: 12-14.