

Modelekularna dinamika

Miha Čančula

8. april 2013

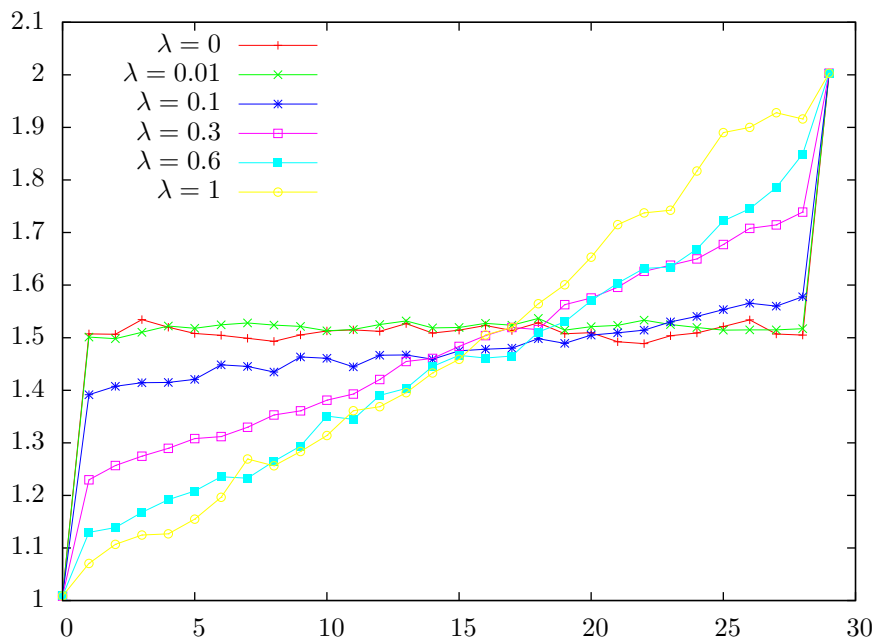
1 Transport toplote

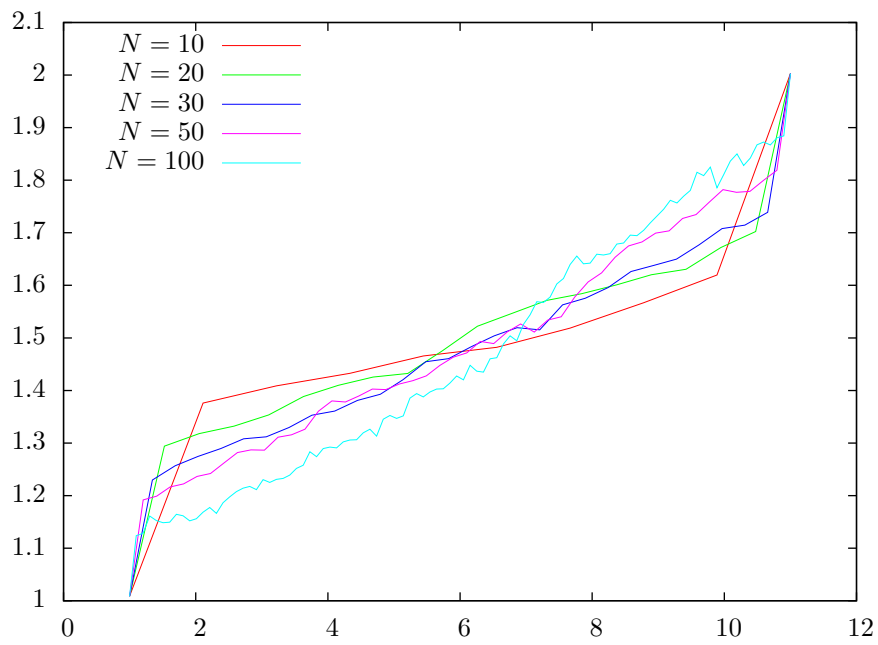
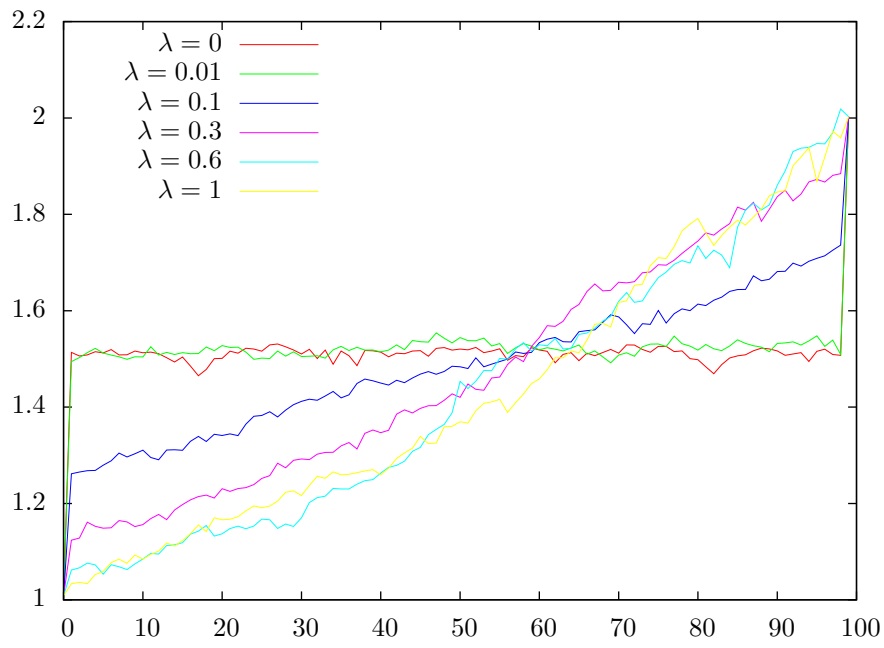
Transport toplote sem preučeval z enodimenzionalno verigo oscilatorjev. Delca na koncih verige sem sklopil s toplotnima kopelima z brezdimenzijskima temperaturama $T_L = 1$ in $T_R = 2$.

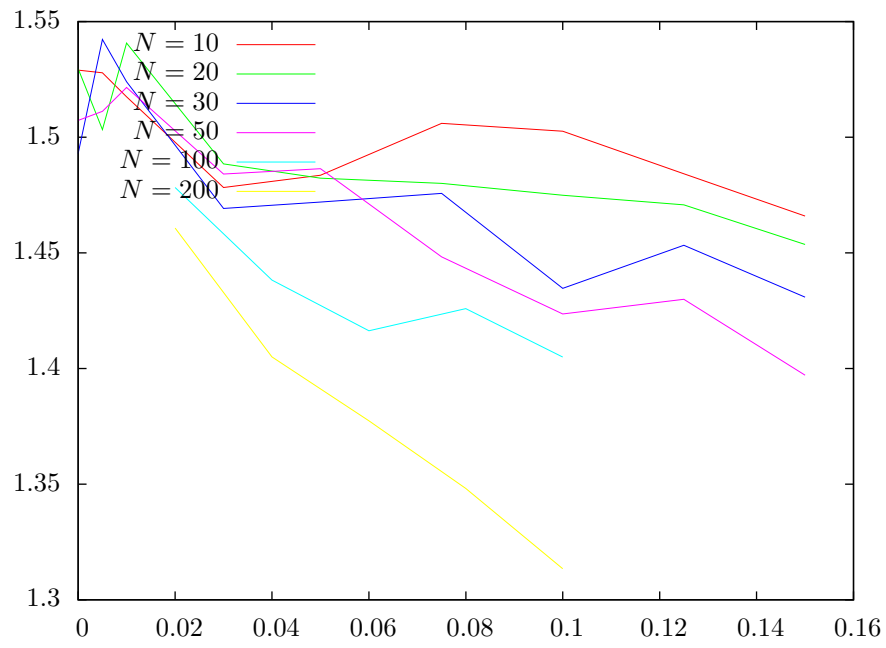
Zanimajo nas vrednosti v stacionarnem stanju, zato sem najprej napravil $N_I = 10^8$ korakov integracije dolžine $h = 10^{-2}$. Nato sem izvedel še $N_A = 10^7$ korakov, med katerimi sem opravil 10^5 meritev temperature in toplotnega toka. Meritve sem na koncu poprečil.

2 Maxwellske kopeli

Najprej sem za modeliranje toplotnih kopeli uporabil Maxwellov algoritem, pri katerem gibalni količini sklopljenih delcev resetiramo vsakih $R = 100$ korakov. Preizkušal sem različne vrednosti za R , najboljše pa se je izkazala takšna, pri kateri se reset zgodi enkrat vsako časovno enoto, torej $Rh \sim 1$. Med reseti sem stanje propagiral s simplektičnim integratorjem s simetrično shemo S_2 .







3 Nosé-Hooverjeve kopeli