

## **Задание 1. Исследование особенностей методов молекулярного моделирования.**

Срок сдачи: 30 апреля.

Выполнить на выбор одно из заданий.

**Общая литература для всех заданий:** Frenkel & Smit (2002), Allen & Tildesley (2nd ed., 2017)

### **1      *Исследование разбегания траекторий***

Для системы частиц с потенциалом Леннард-Джонса исследовать скорость разбегания траекторий, найти время динамической памяти в зависимости от шага численного интегрирования.

Размер системы: 125...8000 частиц. Расчетная область: кубическая. Фазовое состояние: жидкость (Т от 0,7 до 1,5, плотность от 0,5 до 0,85). Радиус обрезания: 3,0. Коррекция «хвоста»: по желанию.

Выбрать рабочую точку на фазовой диаграмме (Т, ρ). Для исследования разбегания использовать интегрирование в прямом направлении по времени с шагом  $\Delta t$ , в обратном  $\Delta t' = \Delta t/n$ . Найти параметры неустойчивости Ляпунова для координат и скоростей в зависимости от n. Время динамической памяти определить через параметр Ляпунова при  $n \rightarrow \infty$  путем экстраполяции.

Вычислить время динамической памяти для 4-5 величин шага по времени от  $10^{-4}$  до  $5 \times 10^{-3}$  (в приведенных единицах).

Команды LAMMPS: variable atom, velocity, timestep, fix ave/spatial, pair\_modify tail

Что читать: Норман Г.Э., Стегайлов В.В. // Математическое моделирование. 2012. Т. 24. N. 6. С. 3-44. (на <http://jiht.ru/norman/eLibrary/MMCS%20NormanStegailov%202013%20v5%20pp305-333.pdf> доступен переводной английский вариант).

### **2      *Исследование дрейфа энергии в методе МД***

Для системы с парным потенциалом исследовать дрейф энергии при интегрировании схемой Верле. Сравнить схемы Верле и rRESPA для моделирования молекулярных систем.

Потенциалы: LJ/smooth, harmonic.

Размер системы: 125...8000 частиц. Расчетная область: кубическая. Фазовое состояние: жидкость (Т от 0,7 до 1,5, плотность от 0,5 до 0,85). Радиус обрезания: 2,5 внутренний, 3,0 внешний.

Выбрать рабочую точку на фазовой диаграмме (Т, ρ). Исследование дрейфа энергии проводить на траекториях длиной 500τ. Шаг интегрирования менять от  $5 \times 10^{-4}$  (1 млн. шагов) до 0,01 (50 тыс. шагов). Получить зависимость величины среднего дрейфа  $dE/dt$  от длины шага интегрирования.

Аналогичную зависимость получить для жидкости димеров при той же плотности и температуре. Димер представляет собой двухатомную молекулу с гармонической связью жёсткостью 20000..100000.

Повторить расчет для димеров, используя двухуровневую схему интегрирования rRESPA. Какой требуется шаг интегрирования внутреннего уровня, чтобы получить сохранение энергии на уровне шага интегрирования верхнего уровня для атомной жидкости? Сравнить вычислительные затраты в случае схемы rRESPA и в случае, когда аналогичный уровень дрейфа энергии будет достигаться уменьшением шага схемы Верле.

Команды LAMMPS: pair\_style lj/smooth, bond\_style harmonic, run\_style respa.

Что читать: Tuckerman, Berne and Martyna, J Chem Phys, 97, p 1990 (1992)

### **3      *Исследование влияния термостатов на динамические свойства***

Исследовать влияние добавочных сил из-за применения термостатов на свойства моделируемой системы.

Потенциал: LJ/cut

Размер системы: 1000...8000 частиц. Расчетная область: кубическая. Фазовое состояние: жидкость (Т от 0,7 до 1,5, плотность от 0,5 до 0,85). Радиус обрезания: 3,0.

Выбрать рабочую точку на фазовой диаграмме (Т, ρ). Провести равновесные расчеты в NVE и NVT ансамблях. Вычислить коэффициенты самодиффузии по формуле Эйнштейна-Смолуховского и вязкости по соотношению Грино-Куба.

Для той же точки фазовой диаграммы провести расчеты с термостатом Ланжевена или Берендсена с характерным временем выхода на равновесие от 0,05 до 10,0. Вычислить коэффициенты самодиффузии и вязкости. Сопоставить с NVE расчетом.

Команды LAMMPS: fix nvt, fix langevin, fix temp/berendsen, compute msd, fix ave/correlate, compute pressure.

### **4      *Влияние обрезания потенциала на уравнение состояния и свойства***

Потенциал: LJ/cut, LJ/smooth

Размер системы: 1000...8000 частиц. Расчетная область: кубическая. Фазовое состояние: жидкость (Т от 0,7 до 1,5, плотность от 0,5 до 0,85).

Выбрать 2-3 температуры для исследования. Для этих температур построить изотермы жидкости в координатах Р-ρ при различных радиусах обрезания потенциала от 2,5 до 5,0 без коррекции «хвоста» и с ней. То же самое провести с потенциалом LJ/smooth (внешний радиус обрезания брать на 0,5 больше внутреннего).

Построить парную корреляционную функцию жидкости. Оценить, при каком радиусе обрезания коррекция «хвоста» даёт достоверные результаты.

Команды LAMMPS: pair\_modify tail, pair\_style lj/smooth, compute rdf, fix deform

## **5      *Исследование флуктуаций в микроканоническом и каноническом ансамблях.***

Потенциал: LJ/cut

Размер системы: 1000...8000 частиц. Расчетная область: кубическая. Фазовое состояние: жидкость (Т от 0,7 до 1,5, плотность от 0,5 до 0,85). Радиус обрезания: 3,0.

Выбрать 2-3 температуры для исследования. Провести равновесные расчеты в NVE и NVT ансамблях. Вычислить теплоемкость  $C_v$  системы по величине флуктуаций температуры в обоих ансамблях, сравнить получаемые величины. Определить длину траектории, которая позволяет найти теплоемкость с точностью до 5%. Вычислить коэффициент термический коэффициент давления через флуктуации, сравнить с аппроксимацией зависимости  $P(T)$  на изохоре.

Команды LAMMPS: fix langevin, fix nvt

Что читать: Ландау, Лифшиц. Теоретическая физика. Т.5. Статистическая физика. Ч. 1. Глава XII.

Frenkel & Smit, Chapter 4.4

Allen & Tildesley, Chapter 2.5

## **6      *Частота принятия пробных шагов в методе Монте-Карло***

Потенциал: LJ/cut

Размер системы: 200...1000 частиц. Расчетная область: кубическая. Фазовое состояние: жидкость (Т от 0,7 до 1,5, плотность от 0,5 до 0,85). Радиус обрезания: 2,5.

Исследовать количество МК шагов для вычисления давления с точностью 1% при заданных объеме и температуре в зависимости от частоты принятия пробных шагов от 0,05 до 0,95. Частота принятия пробных шагов регулируется максимальной величиной пробных смещений. Оценить оптимальную частоту.

Команды LAMMPS: fix gcmc

## **7      *Термодинамическое интегрирование***

Реализовать интегрирование уравнения Клапейрона-Клаузиуса для расчёта кривой фазового равновесия.

Начальные данные: температура, давление и плотности фаз в одной из точек кривой равновесия.

Параметры интегрирования: конечная температура, шаг по температуре.

Скрипт должен по этим параметрам автоматически провести интегрирование кривой фазового равновесия до конечной температуры и вывести значения давления и плотностей фаз в этой точке.

Команды LAMMPS: pair\_style lj/cut, fix npt, write\_restart, read\_restart, clear, variable, label, jump, compute ave/time

Что читать: Kofke, Molecular Physics, 78, p. 1331 (1993)

## **8      *Термодинамическое интегрирование***

Реализовать термодинамическое интегрирование с переключением потенциала для расчета химического потенциала вещества. Рассчитать методом ТИ плотности сосуществующих фаз на линии плавления ЛДж кристалла при выбранной температуре в интервале от 0,7 до 1,3.

Команды LAMMPS: pair\_style gauss/cut, pair\_style hybrid

## **9      *Исследование методов обрезания кулоновского потенциала***

Потенциалы: lj/cut/coul/long, lj/cut/coul/dsf

Вычислить равновесную плотность и удельную теплоемкость воды при 25°C с использованием трехточечной модели SPC/E (параметры указаны в [http://www1.lsbu.ac.uk/water/water\\_models.html#back1](http://www1.lsbu.ac.uk/water/water_models.html#back1)). Провести расчеты с дальнедействующим кулоновским потенциалом (lj/cut/coul/long) и с экранированным кулоновским потенциалом (lj/cut/coul/dsf). Подобрать радиус обрезания и параметры экранирования потенциала так, чтобы результаты двух расчетов совпадали.

Команды LAMMPS: kspace\_style ppm, fix rattle, units real, fix npt, molecule, bond\_style harmonic