

Molekylær Dynamikk

Oblig 3

av

Øyvind Sigmundson Schøyen

Kandidatnummer: 30

Avsluttande prosjekt i FYS3150



FYS3150 Computational Physics
Det matematisk-naturvitskaplege fakultet
Universitetet i Oslo

Desember 2014

Samandrag

I dette prosjektet har me tatt for oss modellering av Argon på atomært nivå. Me har vore interesserte i å lage eit program som skal lage ein atomstruktur etter eige ynskje. I tillegg har me ville sjå på korleis eit slikt system utvikler seg over tid og måle statistiske eigenskapar ved det. For å modellere eit så realistisk resultat som mogleg har me nytta cellelister for å auke hastigheita på programmet. For krafta har me nytta Lennard Jones potensialet og som integrator har me brukt Velocity Verlet-algoritma. Programma våre er objektorientert C++-kode med eit Python rammeverk som skal enklast mogleg køyre programmet vårt for forskjellige parametrar og plote verdiar. Me nyttar VMD for å visualisere atoma i rommet. All kjeldekode ligg på github.

<https://github.com/Schoyen/molecular-dynamics-fys3150>

Innhald

Introduksjon	4
Fysikken bak molekylær dynamikken	5
Oppsett	5
Face-Centered Cubic Lattice	5
Maxwell-Boltzmann og fartsmoment	5
Lennard Jones	6
Statistiske målingar	8
Energi	8
Temperatur	8
Nummertettleik	9
Trykk	9
Varmekapasitet	10
Berendsen termostat	11
Algoritmar	12
Simulering av eit uendeleg stort system	12
Periodiske randbetingelsar	12
Avstand frå endepunkta	12
Velocity Verlet	13
Cellelister	13
Struktur	15
Objektar i C++	15
Atom	15
Berendsen	15
Cell	15
Cell List	15
IO	15
Statistics Sampler	16
System	16
Unit Converter	16
Integrator	16
Velocity Verlet	16
Random	16
Vec3	16
Potential	17
Lennard Jones	17
Python-rammeverk	17

Resultat	18
Køyretid	18
Fysikk	22
Initial system	22
Variasjon i trykk mot tettleiken	27

Introduksjon

I dette prosjektet tek me for oss eit system med Argon (Ar) atom. Me vil modellere og sjå korleis eit slikt system utvikler seg over tid. Me vil sjå korleis ein slik modellering kan gjerast numerisk for å gje eit bra resultat. Grunna mangel på prossesorkraft må me gjere nokre triks og antakelsar som hjelper oss med å visualisere eit “uendeleg” system av atomar. For å auke hastigheita på koda vil me nytte celledister til å dele systemet i mindre bitar. Eit godt mål på den potensielle energien og ein god måte å rekne ut krafta mellom atoma på vil vere med “Lennard Jones”-potensialet. Då systemet vårt er uendeleg stort ved hjelp av randbetingelsar vil me sjå at den totale energien er bevart. Dette er og grunnen til at me vil nytte “Velocity Verlet” til å tidsintegrere oss fram i tid.

Programma er objektorientert C++-kode med eit Python-rammeverk som gjer det enklare for oss å plote og køyre simuleringar. Me vil teste og rapportere om køyretida til programma for forskjellige verdiar. Til slutt ser me på korleis eit enkelt system vil sjå ut samt korleis trykk varierar mot tetleiken til atoma i systemet.

God lesning!

Fysikken bak molekylær dynamikken

I denne delen av rapporten vil me sjå på dei forskjellige eigenskapane me måler i MD-koda vår. Eventuelle måleresultat vil bli vist i resultat-seksjonen.

Oppsett

Systemet med atom me set opp krev nokre tilpassningar for å gje eit realistisk resultat.

Face-Centered Cubic Lattice

Det fyrste me vil gjere å plassera atoma i ein krystallstruktur. For Argon vil me då nytte “face-centered cubic lattice” (FCC). Me plasserer fire og fire atom i ei einingscelle. Posisjonane til kvart atom vil vere gjeve ved

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_1 &= 0\mathbf{i} + 0\mathbf{j} + 0\mathbf{k}, \\ \mathbf{r}_2 &= \frac{b}{2}\mathbf{i} + \frac{b}{2}\mathbf{j} + 0\mathbf{k}, \\ \mathbf{r}_3 &= 0\mathbf{i} + \frac{b}{2}\mathbf{j} + \frac{b}{2}\mathbf{k}, \\ \mathbf{r}_4 &= \frac{b}{2}\mathbf{i} + 0\mathbf{j} + \frac{b}{2}\mathbf{k}.\end{aligned}$$

Her vil b vere ein konstant, me skal seinare sjå på korleis trykket er avhengig av denne.

Maxwell-Boltzmann og fartsmoment

Etter at atoma vert plasserte i einingscellene vil me gje dei ein liten starthastighet kor me nyttar Maxwell-Boltzmann distribusjon. Denne beskriver hastigheita til partiklar i “ideal” gassar. Ho beskriv korleis partiklar beveger seg fritt inn i ein stasjonær beholder uten å røre einannan, med unntak av ein og annan kollisjon kor energien og rørslemengda vil vere bevart. Då vil

$$\|\mathbf{v}\| \propto \sqrt{T}.$$

Hastigheita til atoma vil bli fordelt tilfeldig i rommet. Resultatet er at systemet har eit ikkje-null fartsmoment. Før me byrjar å rekne ut nye posisjonar vil me fjerne dette fartsmomentet. Me vil då finne den totale hastigheita til

systemet og trekke denne frå kvart atom.

$$\mathbf{V} = \frac{1}{M} \sum_i^N m_i \mathbf{v}_i^{\text{f\o{r}}},$$

$$\mathbf{v}_i^{\text{etter}} = \mathbf{v}_i^{\text{f\o{r}}} - \mathbf{V}, \quad i \in [1, N],$$

kor \mathbf{V} er den total hastigheita til systemet, N er antal atom, M er den totale massa til alle atoma summert opp. Dette bidrar til at systemet vårt ikkje har ein total hastigheit, men heller står i ro.

Lennard Jones

For å få ein fysisk effekt på systemet må me byrje å rekne ut krafta mellom atoma. Me nyttar Lennard Jones potensialet for å finne krafta mellom atompara. Lennard Jones har den eigenskapen at potensialet tek med den fråstøytande og den tiltrekkjande krafta mellom para. Potensialet er gjeve ved

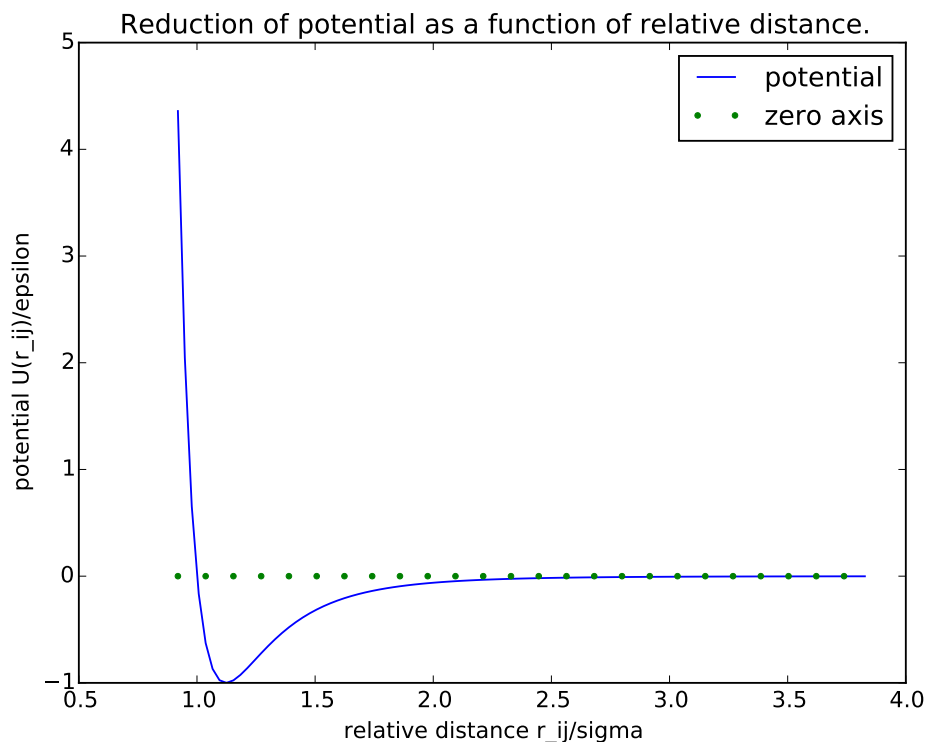
$$U(r_{ij}) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right],$$

kor r_{ij} er avstanden frå atom i og j , σ og ϵ er konstantar som bestemmer kva distanse potensialet er null og kor djup potensialbrønnen skal vere. Me finn krafta ved å ta den negative gradienten til potensialet. Då får me

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}_{ij}) = -\nabla U(r_{ij}) = -\frac{\partial U(r_{ij})}{\partial r_{ij}}$$

$$= -4\epsilon \left[12 \left(\frac{\sigma^{12}}{r_{ij}^{14}} \right) - 6 \left(\frac{\sigma^6}{r_{ij}^8} \right) \right] \mathbf{r}_{ij}.$$

Grunna dei høge potensane kan me sjå at denne krafta kjapt vil gå mot null. Denne eigenskapen gjer at me kan effektivisere koda vår ved berre å rekne ut krafta mellom atoma kor avstanden mellom dei er innanfor ein radius r_{cut} . Eit plott over U/ϵ mot r_{ij}/σ vil gje oss ein indikator kva tid krafta vil vere null.



Figur 1: I plottet kan me lett sjå kor dei tiltrekkjande og kor dei fråstøytande kreftene har sine styrker. Då krafta er gjeve som den negative gradienten til potensialet vil me kunne sjå at i det atoma kjem veldig nære einannan vil det virke ei kraftig fråstøyting (r_{ij}^{12} -delen) medan det for større avstand vil virke ei svakare, men med større rekkevidde, tiltrekkjande kraft (r_{ij}^6 -delen).

Frå figuren les me av

$$\frac{r_{\text{cut}}}{\sigma} \approx 2.5 \quad \Rightarrow \quad r_{\text{cut}} \approx 2.5\sigma.$$

Utanfor denne radiusen vil me ikkje rekne krafta mellom atompara.

Statiske målinger

Hensikten med koda vår er for å måle eigenskapar i eit system med atomar.

Energi

Det enklaste å måle vil vere energien i systemet. Me har allereie implementert eit uttrykk for den potensielle energien med Lennard Jones. Då finner me den kinetiske energien ved formelen

$$E_k = \sum_i^N \frac{1}{2} m_i v_i^2,$$

kor N er antal atomar i systemet. Total energien vil då vere gjeve ved

$$E = E_k + U.$$

For eit system av atom med dei randbetingelsane me har satt forventer me energibevaring. Grunna numerisk avrunding vil det alltid oppstå små fluktuasjonar, men desse vil knapt vere synlege.

Då me ikkje reknar krafta mellom atompar utanfor r_{cut} må me endre litt på Lennard Jones potensialet slik at me har energibevaring. Potensialet vil nå bli skalert etter likninga

$$U_{\text{skalert}}(r_{ij}) = \begin{cases} U(r_{ij}) - U(r_{\text{cut}}), & r \leq r_{\text{cut}} \\ 0, & r > r_{\text{cut}}. \end{cases}$$

Temperatur

Me er interesserte i å finne ut kva tid strukturen smelter og kor tid ho held seg stabil. Me finn ho ved ekvipartisjonsteoremet som seier

$$\langle E_k \rangle = \frac{3}{2} N k_B T \quad \Rightarrow \quad T = \frac{2}{3} \frac{E_k}{N k_B},$$

kor T då angjer den momentane temperaturen då me ikkje tek gjennomsnittet av E_k . Temperaturen vil fluktuere siden den kinetiske energien vil endre seg for kvart tidssteg. Etterkvart vil me nå eit stabilt likevektspunkt kor temperaturen held seg nokonlunde jamnt.

Nummertettleik

Me vil måle tettleiken til systemet til å vere antal atomar delt på volumet til heile systemet. Dette vil vere ein konstant, men me vil sjå på korleis denne vil endre seg som ein funksjon av konstanten b som me nyttar ved konstruksjon av einingscellene til systemet. Storleiken på systemet vil vere gjeve ved

$$V = S_x S_y S_z,$$

kor V er volumet og S_x , S_y og S_z er lengda til kvar av sidene til systemet. Då finner me tettleiken ved

$$\rho_N = \frac{N}{V},$$

kor N er antal atomar i systemet. Me vil og finne eit uttrykk for nummertettleiken som ein funksjon av konstanten b som avgjer avstand mellom atoma i einingscellene. Då får me at

$$\rho_N = \frac{N}{V} = \frac{N}{S_x S_y S_z}.$$

Storleiken på systemet i dei forskjellige retningane er gjeve ved likningane

$$S_x = bN_{FCCX},$$

$$S_y = bN_{FCCY},$$

$$S_z = bN_{FCCZ},$$

kor N_{FCC} avgjer kor mange einingsceller i kvar dimensjon me vil ha. Då ser me at

$$\rho_N = \frac{N}{V} = \frac{4N_{FCCX}N_{FCCY}N_{FCCZ}}{b^3N_{FCCX}N_{FCCY}N_{FCCZ}},$$

og det følgjer at

$$\rho_N = \frac{4}{b^3}.$$

Trykk

Trykket til systemet er gjeve ved formelen

$$P = \rho_N k_B T + \frac{1}{3V} \left\langle \sum_{i=1}^N \mathbf{F}_i \cdot \mathbf{r}_i \right\rangle,$$

kor ρ_N er tettleiken, k_B er Boltzmann konstanten, T er temperaturen, V er volumet til systemet og \mathbf{F}_i og \mathbf{r}_i er henholdsvis krafta og posisjonen til atom i . Då me nyttar Newtons tredje lov (N3L) i kraftutrekninga vår vil me kunne forenkle dette uttrykket og istaden rekne ho ut inne i kraftløkka. Me kan for parvis interaksjon skrive krafta om til å vere

$$\begin{aligned}
\sum_i^N \mathbf{F}_i \cdot \mathbf{r}_i &= \sum_i \sum_{j \neq i} \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{F}_{ij} \\
&= \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} (\mathbf{r}_i \cdot \mathbf{F}_{ij} + \mathbf{r}_j \cdot \mathbf{F}_{ji}) \\
&= \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} (\mathbf{r}_i \cdot \mathbf{F}_{ij} - \mathbf{r}_j \cdot \mathbf{F}_{ij}) \\
&= \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} ((\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \cdot \mathbf{F}_{ij}) \\
&= \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{F}_{ij} \\
&= \sum_i \sum_{j > i} \mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{F}_{ij},
\end{aligned}$$

kor \mathbf{F}_{ij} og \mathbf{r}_{ij} er krafta og avstanden mellom atom i og j . Me set dette inn i uttrykket for trykk.

$$P = \rho_N k_B T + \frac{1}{3V} \left\langle \sum_{i > j} \mathbf{F}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{ij} \right\rangle.$$

Varmekapasitet

Varmekapasiteten er eit mål på kor mykje varme eit materiale kan lagre medan det skjer ei temperaturendring. Me kan rekne ut varmekapasiteten ved å nytte variansen i kinetisk energi. Me har då eit forhold som seier

$$\langle E_k^2 \rangle - \langle E_k \rangle^2 = \frac{3Nk_B^2 T^2}{2} \left(1 - \frac{3Nk_B}{2C_V} \right),$$

kor k_B er Boltzmann konstanten, T er temperatur og C_V er varmekapasiteten. Me vil omforme denne likninga slik at me får varmekapasiteten for seg sjølv

på venstre sida. Me får då

$$\begin{aligned}\langle E_k^2 \rangle - \langle E_k \rangle^2 &= \frac{3Nk_B^2 T^2}{2} - \frac{9N^2 k_B^3 T^2}{4C_V}, \\ \Rightarrow -4C_V \left(\langle E_k^2 \rangle - \langle E_k \rangle^2 - \frac{3Nk_B^2 T^2}{2} \right) &= 9N^2 k_B^3 T^2, \\ \Rightarrow C_V &= -\frac{9N^2 k_B^3 T^2}{4 \left(\langle E_k^2 \rangle - \langle E_k \rangle^2 - \frac{3Nk_B^2 T^2}{2} \right)}.\end{aligned}$$

Me vil måle denne verdien i eininga $\frac{\text{J}}{\text{Kmol}}$ for å samanlikne med eksperimentelle verdier. Boltzmann konstanten er gjeve ved

$$k_B \sim \frac{\text{m}^2 \text{kg}}{\text{s}^2 \text{K}} \sim \frac{\text{J}}{\text{K}}.$$

Då ser me at vermakapasiteten vil vere gjeve ved

$$C_V \sim \frac{\left(\frac{\text{J}}{\text{K}}\right)^3 \text{K}^2}{\text{J}^2 - \text{J}^2 - \left(\frac{\text{J}}{\text{K}}\right)^2 \text{K}^2} \sim \frac{\text{J}}{\text{K}}.$$

For å finne mol må me difor gonge antal atomar med **Avogrados konstant**. Denne er gjeve ved

$$k_A = 6.02214129 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}.$$

Berendsen termostat

Siden temperaturen fluktuerer vil me gjerne ha moglegheit til å styre ho. Me vil implementere ein **Berendsen termostat**. Ho er gjeve ved

$$\gamma = \sqrt{1 + \frac{\Delta t}{\tau} \left(\frac{T_{\text{bath}}}{T} - 1 \right)}.$$

Skaleringsfaktoren γ vil me gonge med hastigheita \mathbf{v} til atoma i systemet. Her er τ ein parameter som avgjer kor kjapt temperaturen skal endrast. T_{bath} er den ønska temperaturen medan T er den noverande temperaturen. Me kan då sjå at $\gamma = 1$ for $T = T_{\text{bath}}$. Desverre er ikkje dette ein veldig realistisk termostat då temperaturen endrer seg mykje fortare enn det ville skjedd i virkelegheita. Dette gjer blant anna at me ikkje vil måle fysiske eigenskapar så lenge termostaten er på. Me vil difor nytte ho for å nå ei ynskja temperatur for så å la systemet få stabilisere seg litt før me byrjar å måle verdier.

Algoritmar

Simulering av eit uendeleg stort system

Då me ikkje kan simulere eit uendeleg stort system vil me nytte nokre metodar kor me slepper å sjå at atoma våre forsvinn ut i ingenting.

Periodiske randbetingelsar

Viss eit atom har ein posisjon som ligg utanfor storleiken på systemet vårt vil me flytte atomet slik at det kjem inn frå den andre sida av systemet. For eit stort system kan dette vere ei god tilnærming då det heile tida forsvinn atom ut frå eit lite område, medan det samstundes kjem inn nye atom slik at tettheten er jamn. Dette vil og vere med på å gje oss bevaring av total energi då det ikkje går noko tap til vegger. Periodiske randbetingelsar vil vere gjeve ved formelen

$$\mathbf{r}_i = x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k}, \quad i \in [1, N],$$

kor N er antal atom i systemet. Då vil kvar komponent i \mathbf{r}_i vere gjeve ved

$$x = \begin{cases} x + S_x, & x < 0 \\ x, & x \in [0, S_x) \\ x - S_x, & x \geq S_x \end{cases},$$

kor S_x er storleiken på systemet i x -retning og x er noverande posisjon for atomet. Me gjentek dette for dei to andre retningane og.

Avstand frå endepunkta

Frå analogien ved bruk av periodiske randbetingelsar må me ta hensyn til at avstand mellom atompar ikkje nødvendigvis stemmer. Argumentet vårt er at atoma som ligg heilt i kanten av systemet har “tvillingar” som kjem inn frå andre sida på nøyaktig same tid og med dei same parametrane som seg sjølve. Når me då rekner avstand mellom atoma vil me sjekke om dei eigentleg ligg mykje nærare viss det eine atomet vert flytta over på den andre sida av systemet. Me kjem til å nytte “**Minimum Image Criterion**” for å sjekke om dette er oppfylt. Me definerer

$$\Delta\mathbf{R} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, \quad i \neq j, \quad i, j \in [1, N],$$

som gjer oss avstanden mellom atoma slik det framstår i simuleringa. For å simulere eit uendeleg system vil me difor sjekke om denne oppfyller krava

$$\Delta\mathbf{R} = \Delta X\mathbf{i} + \Delta Y\mathbf{j} + \Delta Z\mathbf{k},$$

kor me har skrive $\Delta \mathbf{R}$ på komponentform. Då får me

$$\Delta X = \begin{cases} \Delta X - S_x, & \Delta X > \frac{S_x}{2} \\ \Delta X, & \Delta X \in \left(-\frac{S_x}{2}, \frac{S_x}{2}\right] \\ \Delta X + S_x, & \Delta X \leq -\frac{S_x}{2} \end{cases}$$

Velocity Verlet

Idet systemet vårt er satt opp med ein starthastighet for kvart atom vil me tidsintegrere oss fram i tid for å sjå korleis det utvikler seg. Då systemet vårt er pakka inn med periodiske randbetingelser og biletekriterie vil me nytte ein algoritme som bevarer energien. Velocity Verlet er ein **symplektisk integrator** som bevarer total energien. Velocity Verlet er i tillegg ein enkel og kompakt algoritme med eit feilledd som går som $\mathcal{O}(\Delta t^2)$. Integrasjonen består av tre ledd

$$\begin{aligned} \mathbf{v}(t + \Delta t/2) &= \mathbf{v}(t) + \frac{\mathbf{F}(t)}{m} \frac{\Delta t}{2}, \\ \mathbf{r}(t + \Delta t) &= \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(t + \Delta t/2) \Delta t, \\ \mathbf{v}(t + \Delta t) &= \mathbf{v}(t + \Delta t/2) + \frac{\mathbf{F}(t + \Delta t)}{m} \frac{\Delta t}{2}, \end{aligned}$$

kor me må rekne ut krafta ein gong for fyrste ledd før me byrjar å integrere oss fram i tid.

Cellelister

Det som er kostbart ved Velocity Verlet er utrekninga av kraft to gonger per ledd. Viss me rekner ut krafta mellom kvart atom vil me ha ei algoritme som går som $\mathcal{O}(N^2)$, kor N er antal atom. Ved å sette opp cellelister vil me dele opp systemet vårt i mindre celler kor kvar side av cellene har lengde r_{cut} runda av til næraste heiltal. Ved å gjere dette slipper me å leite gjennom alle atoma i systemet vårt og rekne ut krafta mellom dei. Me vil heller rekne ut krafta mellom atoma i ei celle og alle nabocellene til denne cella. Viss me då i tillegg sjekker om atoma i nabocellene ligg utanfor r_{cut} vil me redusere køyretida til $\mathcal{O}(N)$.

Algoritme 1 Rekn ut krafta ved hjelp av cellelister

```
1: for  $i \in N_x$  do
2:   for  $j \in N_y$  do
3:     for  $k \in N_z$  do
4:        $Cell_1 = CellIndex(i, j, k)$ 
5:       for  $cx \in [i - 1, i + 1]$  do
6:         for  $cy \in [j - 1, j + 1]$  do
7:           for  $cz \in [k - 1, k + 1]$  do
8:              $applyPeriodic(cx, cy, cz)$ 
9:              $Cell_2 = CellIndex(cx, cy, cz)$ 
10:            for  $m \in Cell_1.getAtoms()$  do
11:              for  $n \in Cell_2.getAtoms()$  do
12:                Rekn ut krafta
13:              end for
14:            end for
15:          end for
16:        end for
17:      end for
18:    end for
19:  end for
20: end for
```

Her er N_x , N_y og N_z antal celler i henholdsvis x -, y - og z -retning. cx , cy og cz viser til koordinatane til nabocellene. Metoden $applyPeriodic()$ sjekker om cellene i endepunkta har naboar på andre sida av systemet. For kvart tidssteg må me legge atom i dei riktige cellene. Me lagrar cellene på indeksar gjeve ved formelen

$$index = iN_yN_z + jN_z + k,$$

kor i , j og k er indeksane me sender inn. Då kan me finne kva celle eit atom høyrer til i ved å nytte formelen

$$index_x = \left\lfloor \frac{x_{\text{Atom}}}{S_x} N_x \right\rfloor,$$

og tilsvarende for y - og z -retning. Då vil $index$ -formelen over returnere cella som inneheld det gjeldane atomet.

Struktur

I dette prosjektet har me nytta objektorientering for å halde styr på simuleringa vår. Simuleringane vert køyrde i C++. Me har bygd eit rammeverk med Python som tek seg av køyringa i C++ for å gje eit betre overblikk.

Objektar i C++

Under følgjer ein kort oversikt over objekta me nyttar og formålet deira.

Atom

Filene `atom.h` og `atom.cpp` utgjer ein liten klasse kor me lagrar masse, posisjon, hastighet og krafta til eit atom. I tillegg gjer me kvart atom ein indeks som gjer det mogleg for oss å nytte Newtons tredje lov kor me kun vil rekne ut krafta mellom para viss atom-objektet me har valgt har ein større indeks enn det andre atom-objektet me har valgt.

Berendsen

Programma `berendsen.h` og `berendsen.cpp` implementerer Berendsen termostaten beskrevet i seksjonen om fysikken bak molekylær dynamikken. Ho vert nytta av integratoren til å skalere hastigheita viss me vil ha kontroll over temperaturen.

Cell

Programma `cell.h` og `cell.cpp` vert nytta til å ta vare på atoma som ei einskild celle inneheld. Formålet med klassa er fyrst og fremst å kunne indeksere cellene slik at me kun treng å rekne ut krafta mellom ei og ei celle ein gong. Me slepp då å sjekke for kvart atom to for-løkker djupare.

Cell List

Programma `celllist.h` og `celllist.cpp` inneheld ein vektor med Cell-objektar. Ho vil i tillegg lagre antal celler i x -, y - og z -retning. Klassa tek seg og av sorteringa av atom og legg dei inn i riktige celler.

IO

Programma `io.h` og `io.cpp` tek seg av utskrift til fil i `.xyz`-formatet. Dette formatet vert lese av VMD for visualisering.

Statistics Sampler

Programma `statisticssampler.h` og `statisticssampler.cpp` inneheld metodar som lagrar og skriv ut dei fysiske eigenskapane me vil måle til fil.

System

Programma `system.h` og `system.cpp` er sjølv fundamentet blant objekta. Klassa handterer oppsett, køyring og lagrar atom. Ho handterer sjølv gjennomføringa slik at eit main-program kun treng å køyre nokre få enkle metodar.

Unit Converter

Programma `unitconverter.h` og `unitconverter.cpp` skalerer einingane på dei fysiske verdiane slik at me arbeider med meir handterlege tal. Dette gjer og moglegheita for store numeriske avrundingsfeil mykje mindre.

Integrator

Programma `integrator.h` og `integrator.cpp` utgjer ein superklasse som tillater oss å nytte forskjellige numeriske integrasjonsalgoritmar.

Velocity Verlet

Programma `velocityverlet.h` og `velocityverlet.cpp` er ein numerisk integrasjonsalgoritme som står forklart i algoritme seksjonen.

Random

Programma `random.h` og `random.cpp` utgjer ein random-generator som me nyttar når me set starthastigheita til kvart atom med Maxwell-Boltzmann distribusjon.

Vec3

Programma `vec3.h` og `vec3.cpp` er ein lett vektorklasse som implementerer vektoroperasjonar for tre-dimensjonale vektorar. Styrken til klassa er at me berre lagrar tre double-verdiar. Ho vil difor vere kjapp under runtime.

Potential

Programma `potential.h` og `potential.cpp` er ein superklasse, som på same måte som `integrator.h` tillater bruk av forskjellige potensial. Klassen lagrar og den potensielle energien og summen av krafta og avstanden mellom atoma som me treng for å rekne ut trykket.

Lennard Jones

Programma `lennardjones.h` og `lennardjones.cpp` implementerer Lennard Jones potensialet og uttrykket for krafta. Her ligg og implementasjonen av cellelister.

Python-rammeverk

Grunna storleiken på programmet og dei forskjellige simuleringane me vil gjere er det enklare å køyre main-metoden frå `Python`. Rammeverket består av ein klasse som køyrer kommandolinje-argument. Ho tek seg av køyring av Makefile og plottar og skriv ut til fil. Det er i tillegg ein del mindre klassar som tek seg av plotting av forskjellige verdier.

Resultat

I resultata våre vil me sjå på både fysikken bak MD-simuleringane, samt køyretida på dei to forskjellige metodane me nyttar for å rekne ut krafta.

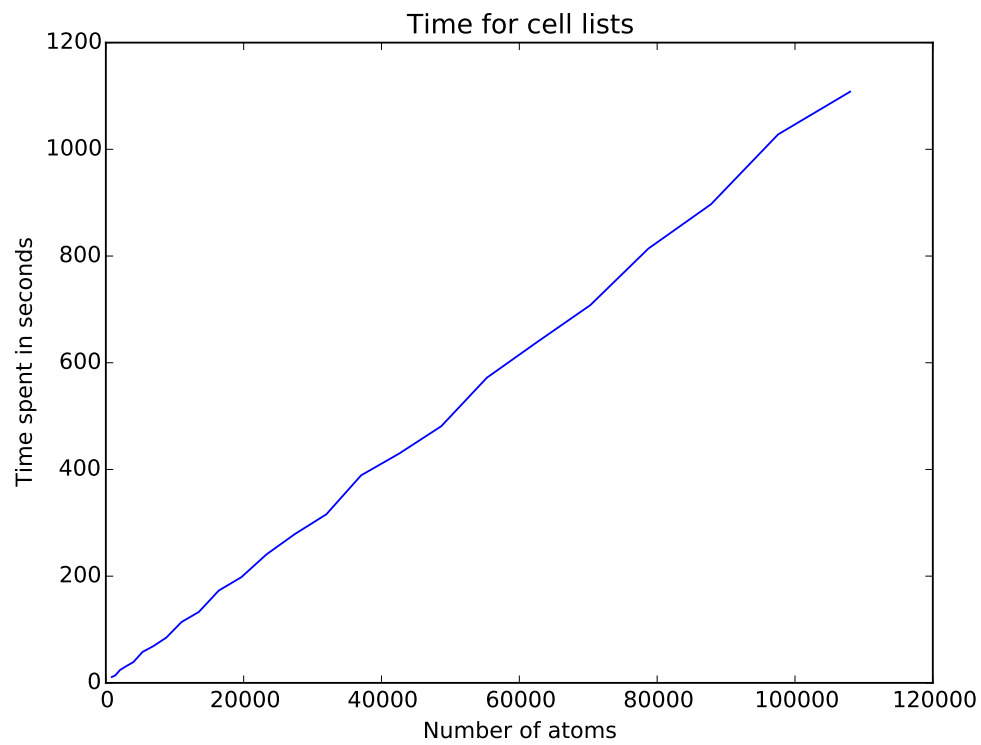
Køyretid

På køyretida har me ei slags forventning over kva som vil skje. Eg valgte å køyre programmet for eit aukande antal atom kor me gjer 1000 tidsskritt. Resultatet ligg i tabellen under.

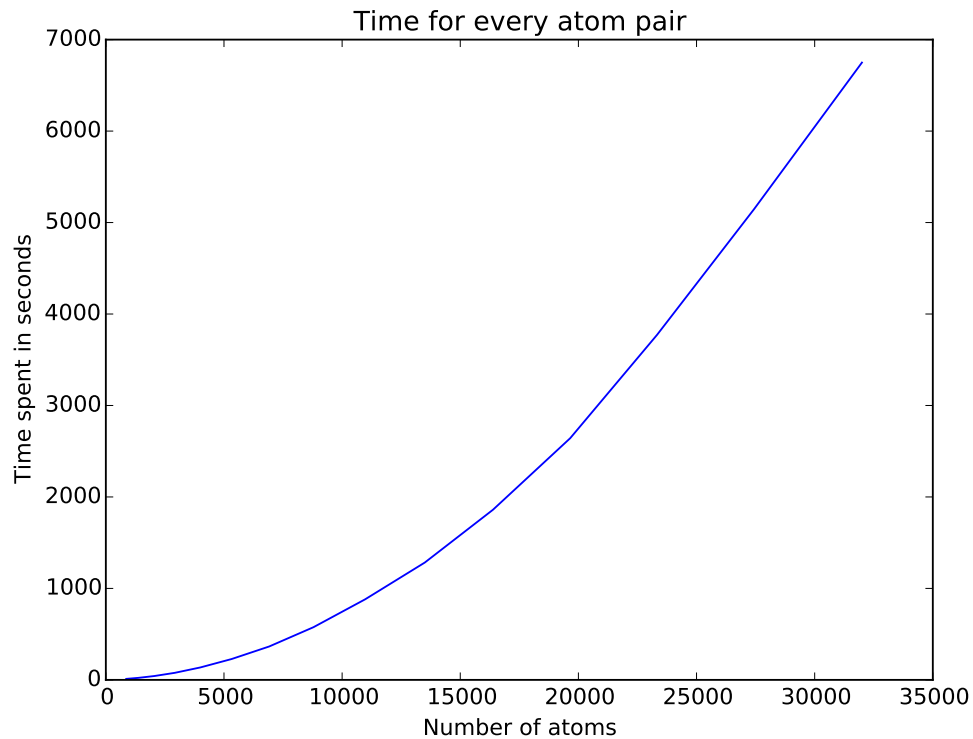
Antal atomar	Kraft mellom kvart atom	Cellelister
864	11s	11 s
2048	42 s	24 s
2916	77 s	31 s
4000	136 s	39 s
5324	228 s	58 s
6912	365 s	69 s
8788	576 s	85 s
10976	881 s	114 s
13500	1283 s	133 s
16384	1860 s	173 s
19652	2642 s	198 s
23328	3772 s	241 s
27436	5147 s	279 s
32000	6749 s	316 s

Tabell 1: I tabellen står køyretida programmet treng for køyre antal atomar som står på venstre side. Antalet atom er bestemt ut frå likninga $N = 4L^3$, kor L er antal FCC gitter. Køyretida er oppgjeven i sekund. Me kan tydeleg sjå korleis cellelister held ei lineær stigning i køyretid til skjelnad frå å rekne ut krafta mellom alle atoma.

Eit plott over desse verdiane fylgjer under.

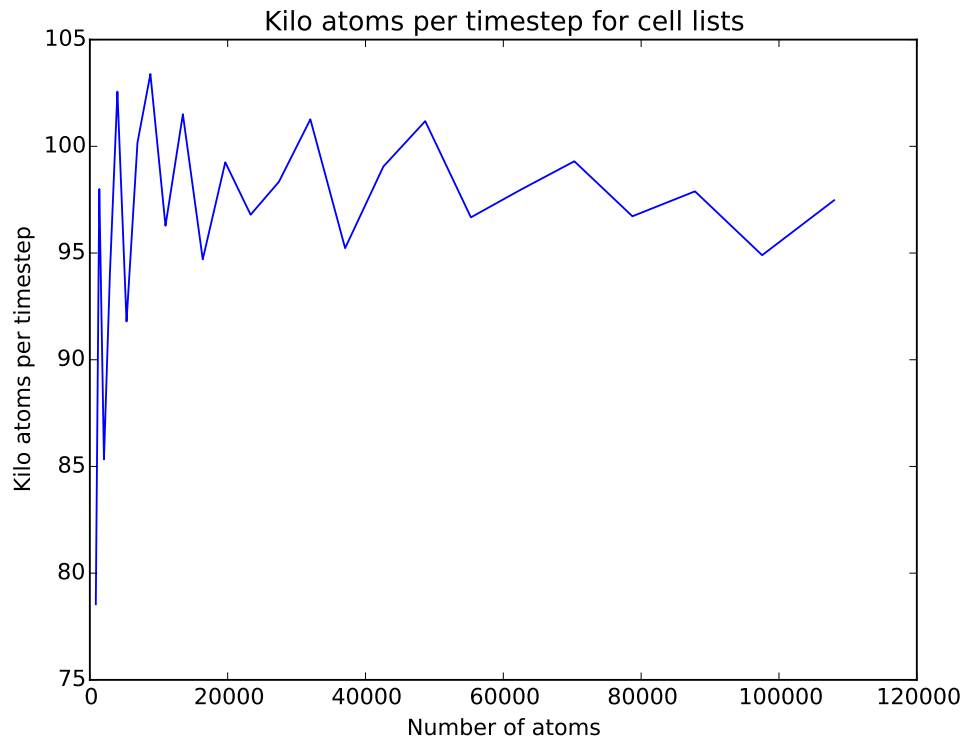


Figur 2: Her kan me sjå korleis celledista stig lineært med antal atomar. Dette gjeld for dei betingelsane me har satt for r_{cut} .

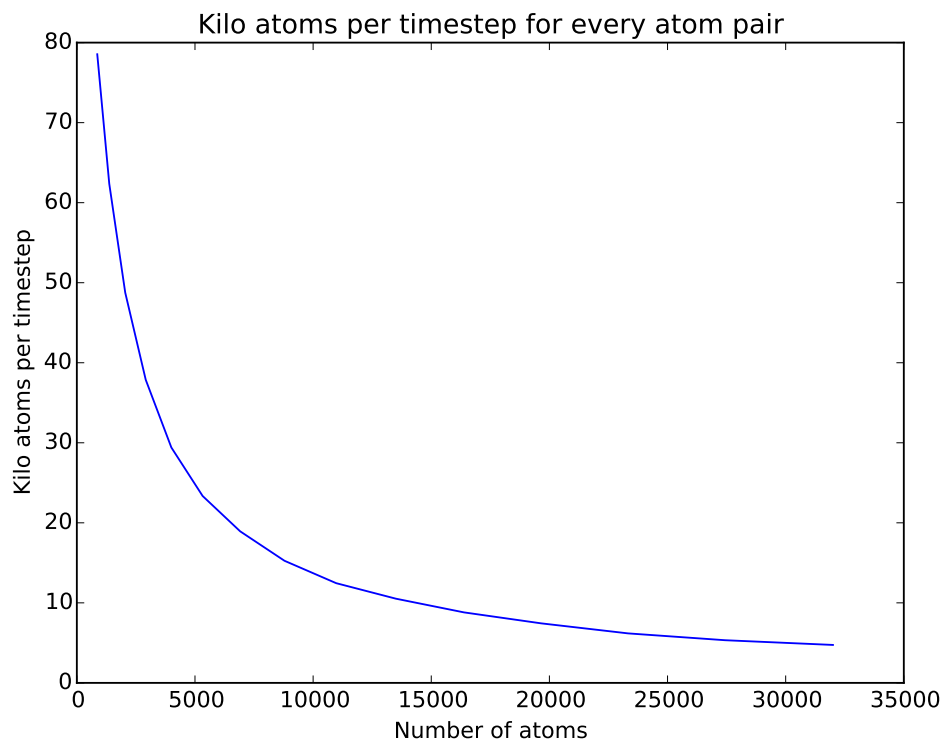


Figur 3: Me kan sjå at tida det tek å rekne ut krafta veldig fort vert stor.

Eg køyrde desse verdiane over 10 timar og har difor resultat frå høgare verdiar av celledister. Diverre vert tida det tok å køyre programmet for den treige kraftmetoden for stor. Eit interessant mål vil vere å sjå kiloatom per tidsskritt. Me ser med andre ord på kor mange tusen atom metoda klarer å rekne ut for per tidsskritt. Under fylgjer grafane for dei to metodane.



Figur 4: For cellelister kan me sjå at me i byrjinga får eit brått hopp opp. Dette skjer då metoda fyrst vert effektiv når me får ein viss storleik på cellelistene i forhold til antal atom. Ho vil difor etterkvart stabilisere seg rimelig jamnt. Me får fluktuasjonar som kan skyljast ujamnt antal atom i kvar celle.

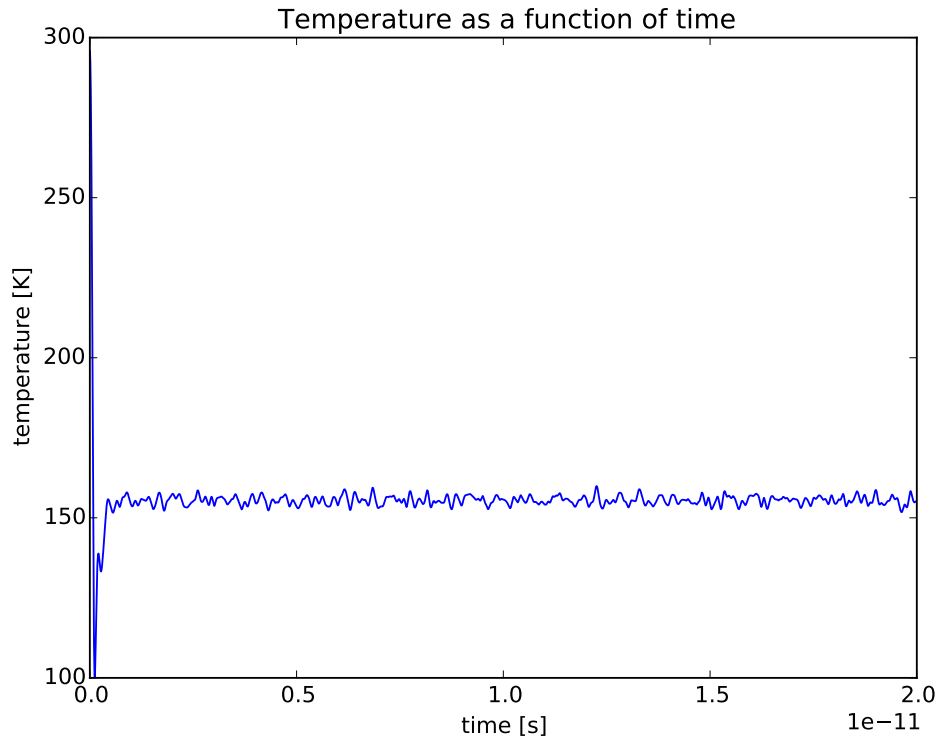


Figur 5: Ved å rekne krafta mellom kvart atom kan me sjå at metoda kjapt vil bli treig. Etterkvart klarer ho ikkje å rekne ut krafta mellom mange nok atom. Når me auker antal atom vil ho slite med å rekne ut krafta mellom mange nok atom til at me vil klare å bli ferdige med utrekningane.

Fysikk

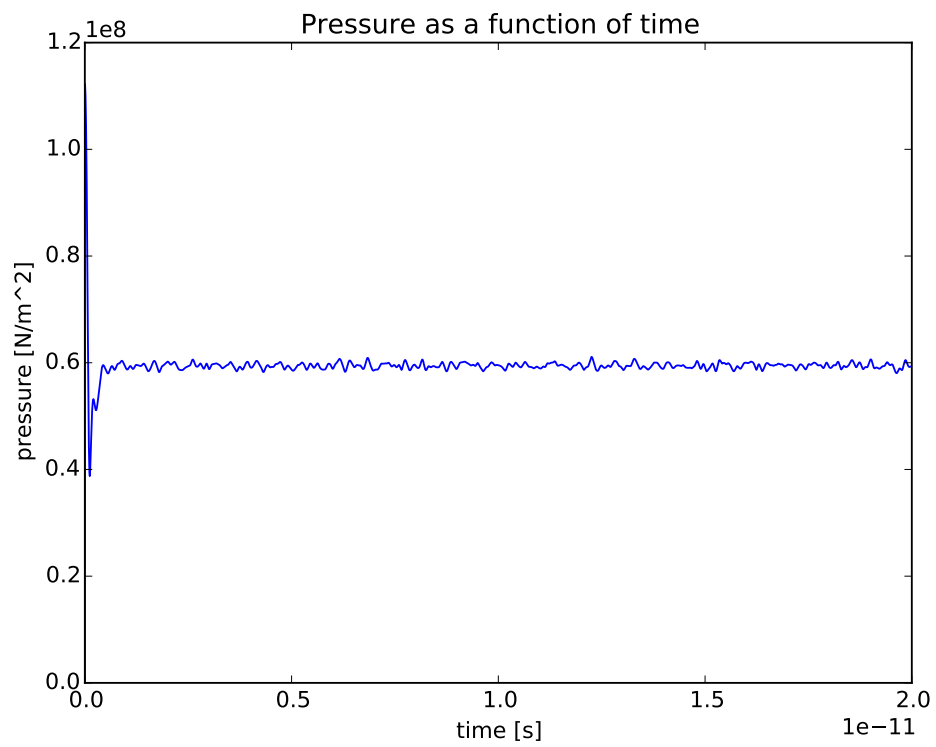
Initial system

For å gje oss ein indikator av kva som skjer i simuleringa vår vil me køyre ein enkel, men lang, simulering kor me måler og analyserer dataene me får ut. Me set opp eit system på 4000 atomar med ein starttemperatur på 300 K. Me simulerer for 20000 tidssteg. Då kan me sjå på korleis temperatur, trykk og energi utviklar seg over tid. Dei fyrste ~ 500 tidsstega vil gå til å stabilisere systemet før me etterkvart får ein jamn utvikling.

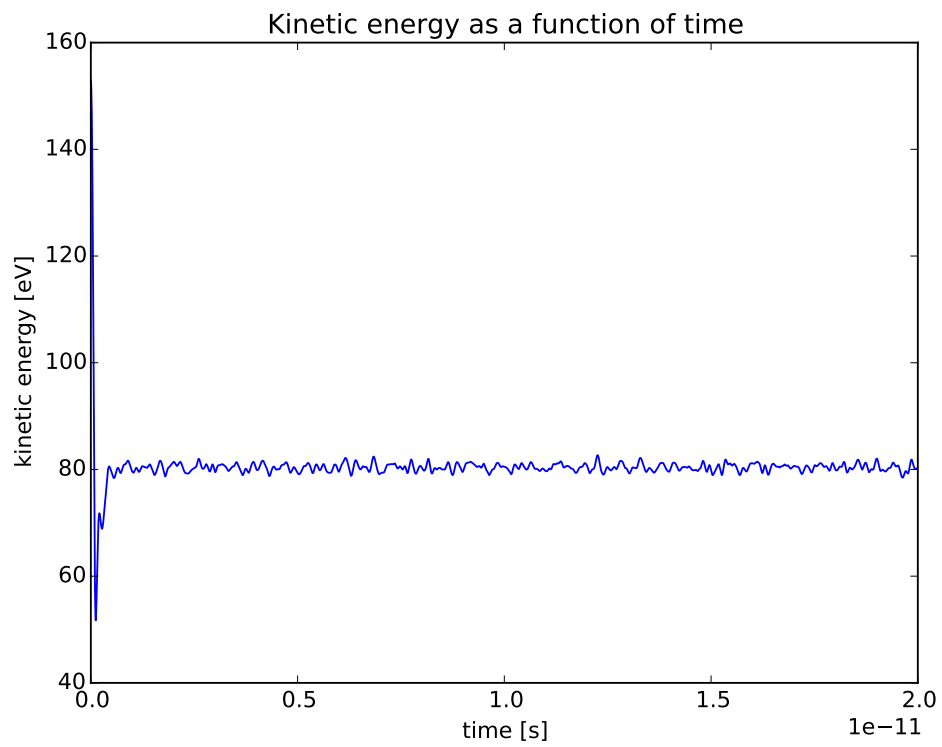


Figur 6: Her har me eit plott som viser korleis temperaturen endrer seg over tid i systemet vårt. Me kan sjå at systemet droppar frå starttemperaturen til ein tredjedel før systemet byrjar å stige mot ein stabil temperatur. Denne er omtrent halvparten av starttemperaturen.

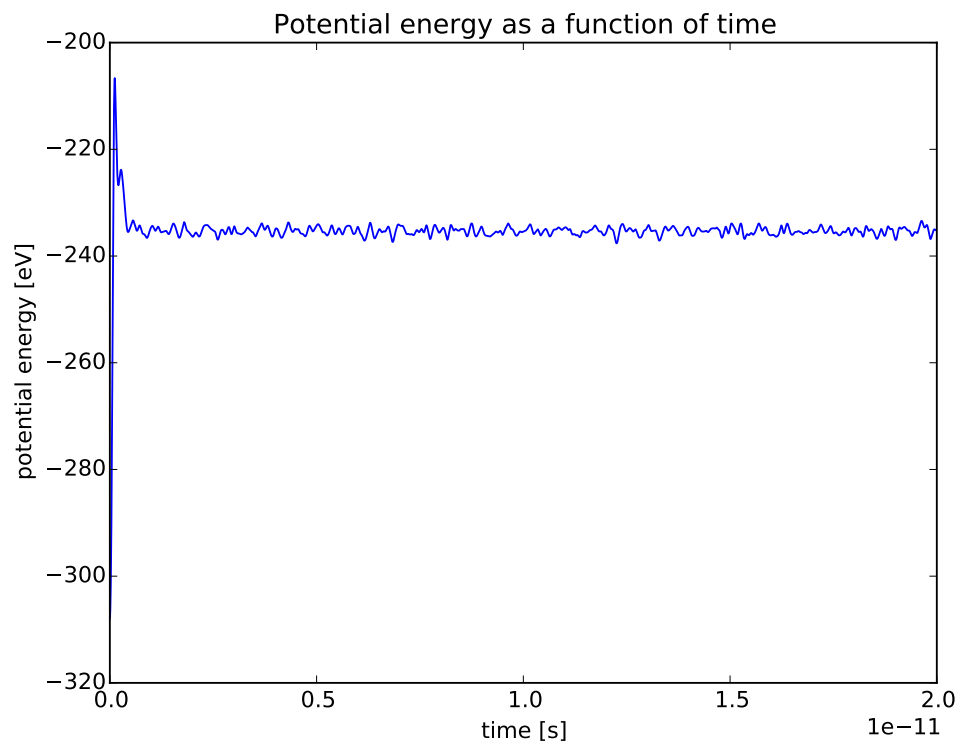
Atoma er gjevne hastigheitar frå Maxwell-Boltzmann distribusjon i byrjinga. Då $T \propto E_k \propto v^2$, kor v vil vere gjeven frå ein tilfeldig distribusjon vil systemet motvirke denne effekten ved å senke temperaturen slik at det vert stabilt. Etterkvart vil systemet nå ein relativt stabil verdi for temperatur. Me veit i tillegg at $T \propto \frac{1}{N}$. Jo fleire atom me har jo mindre fluktuasjonar (mindre amplitude) vil me få for temperaturen. Me vil difor, ved bruk av termostat, la systemet få hjelp til å nå den ynskja temperaturen. Når me då slår av termostaten vil me la systemet bruke litt på å stabilisere seg.



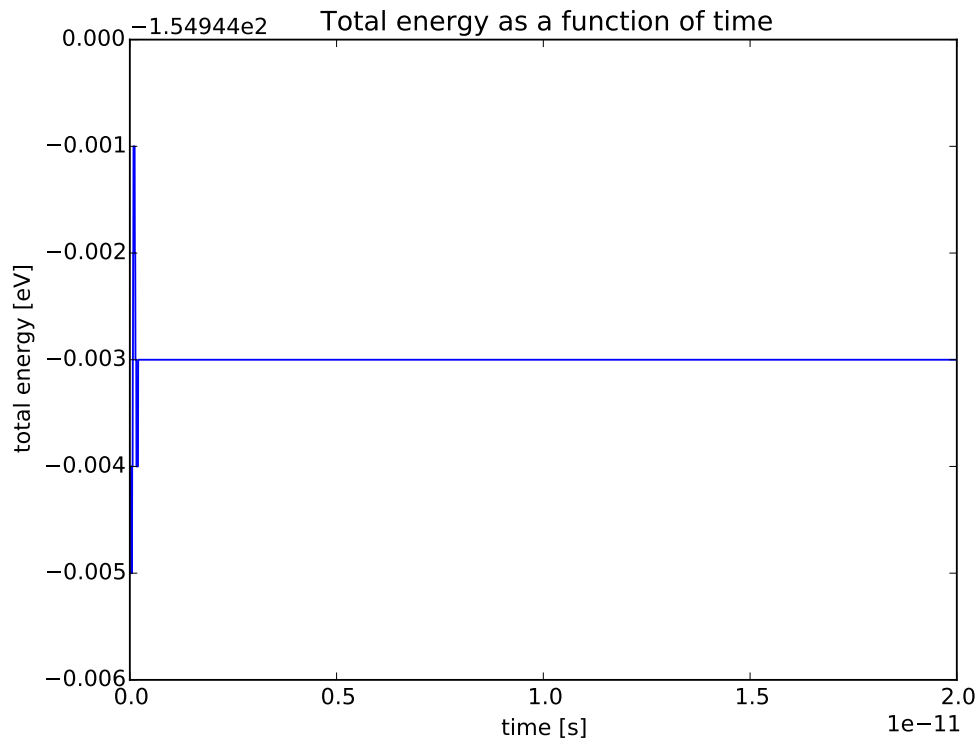
Figur 7: Ikkje overraskande nok vil trykket fylgje ei liknande rørsle som temperaturen då $P \propto T$



Figur 8: D  $T \propto E_k$ vil dette og gjere at me kjenner igjen fluktuasjonane fr  temperaturplottet.



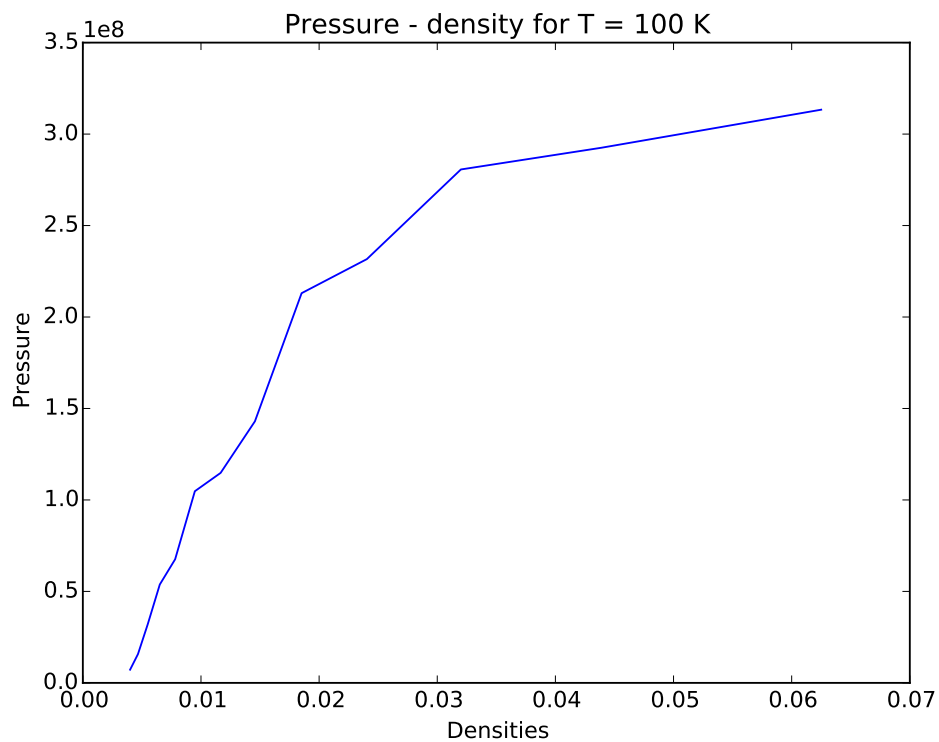
Figur 9: Siden total energien skal vere bevart må den potensielle energien fluktuere mot den kinetiske energien.



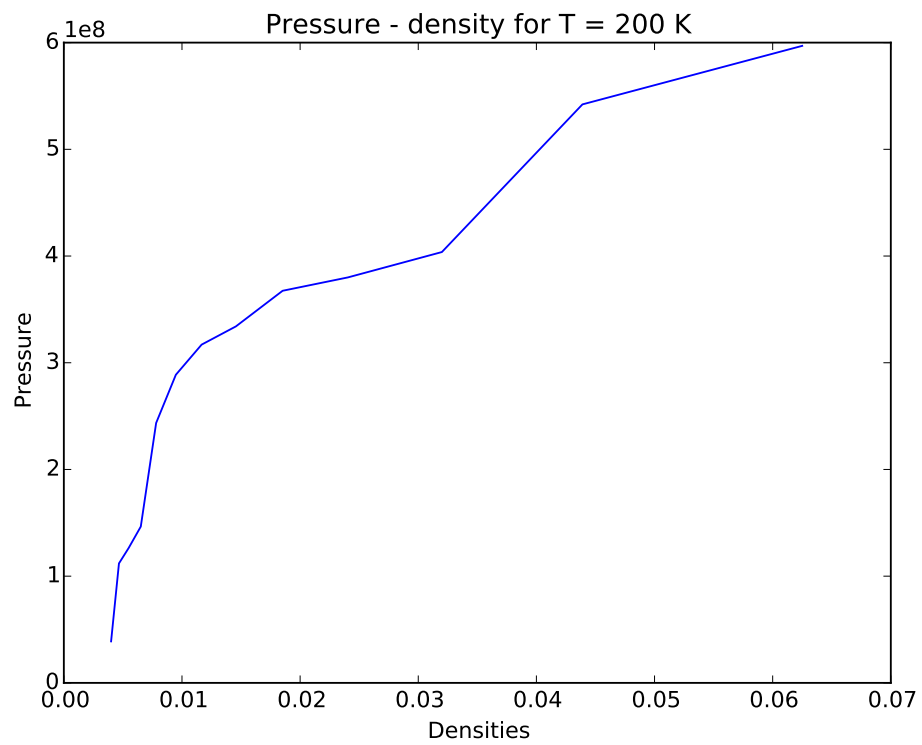
Figur 10: Her kan me sjå at for nokre få startverdiar vil total energien fluktuere i ein magnitude på 1.0×10^{-3} . Etterkvart får me ein veldig stabil verdi, slik me ynskjer.

Variasjon i trykk mot tettheten

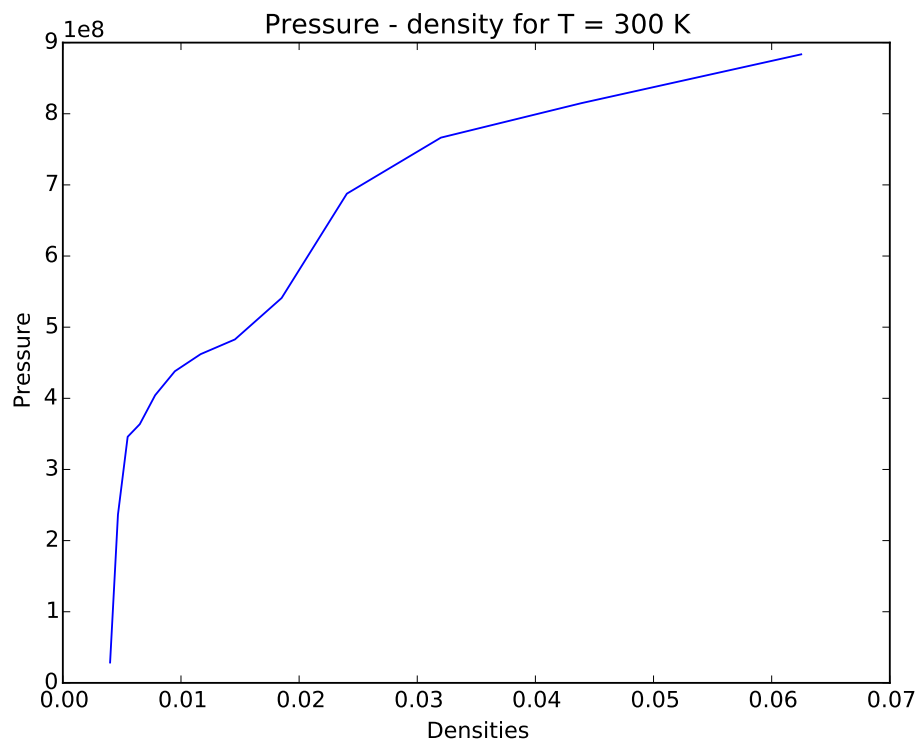
Til slutt i prosjektet har me sett på korleis trykket varierer som ein funksjon av temperatur og tetthet. Eg har då køyrd programmet for $T \in [100, 300]$ og $\rho_N \in [4, 10]$.



Figur 11: Ein kan tydeleg sjå korleis trykket stig når tettheten aukar. Eit stort høgare tall for ρ_N vert ustabilt.



Figur 12: For høgare temperatur vil trykket nærmast doblast.



Figur 13: Her kan me og sjå korleis trykket nærmast er tre gonger trykket me fekk for $T = 100$.