

5 апреля 2021 г.

# МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА

## Задание 2

Стрижак Даниил

### Содержание

1	Аннотация	2
2	Радиальная функция распределения	2
3	Автокоррелятор скорости	2
4	Коэффициент самодиффузии	3
5	Сравнение с невязками	4
6	Влияние термостата	4
7	$\log_{10} D = 0.05 + 0.07 \cdot P - \frac{1.04+0.1 \cdot P}{T}$	5
8	Заключение	5

# 1 Аннотация

Данная работа сделана с помощью lammps. Из-за того, что на то, чтобы разобраться с симулятором, потребовалось много времени, графики будут не лучшего качества. В каждом пункте (кроме 5) расчет производится с шагом  $t = 0.005$  в количестве 10000 шагов.

## 2 Радиальная функция распределения

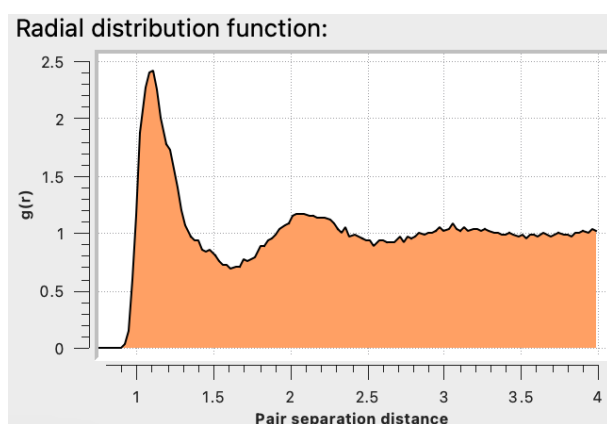
Для 2 параметров плотности и температуры входного файла построим радиальные функции распределения.

$$\rho = 0.7$$

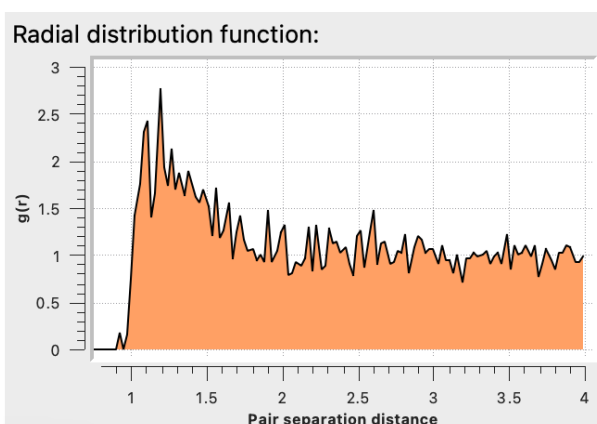
$$T = 1.0$$

$$\rho = 0.01$$

$$T = 1.0$$



Плотная жидкость

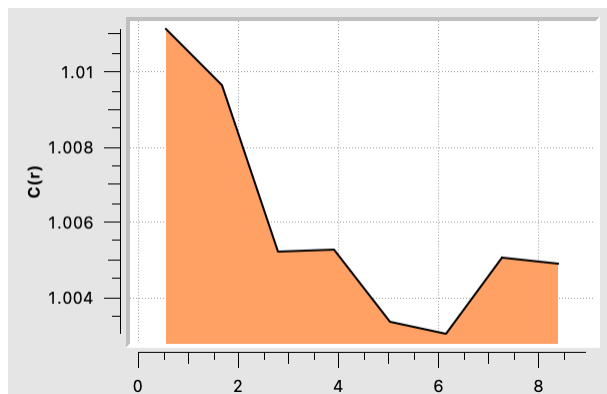


Газ

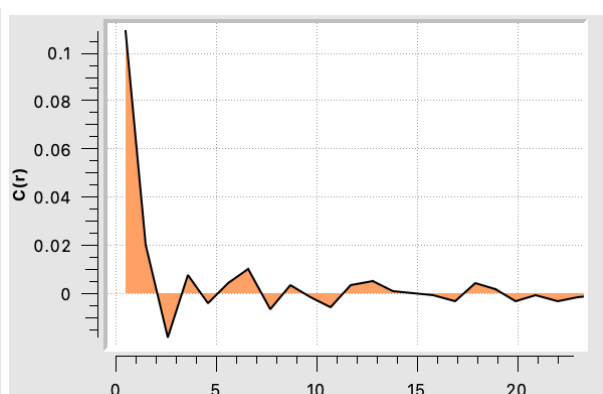
В сравнении с экспериментальной работой Yarnell et al. можно сделать вывод, что данные сходятся. Для жидкостной зависимости все экстремальные характеристики совпадают. В обоих случаях RDF стремится к 1 при больших  $r$ .

## 3 Автокоррелятор скорости

Аналогично предыдущему пункту построим автокорреляционные функции для жидкости и газа при тех же начальных параметрах, видно, что характер автокорреляционной функции проявляется, однако качество оставляет желать лучшего.



Плотная жидкость



Газ

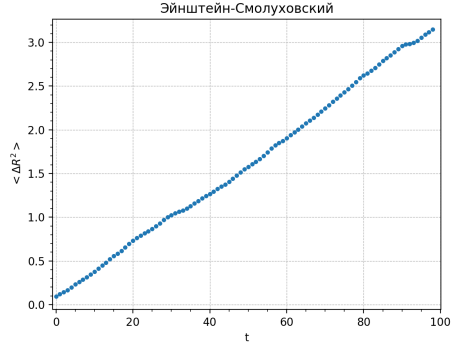
## 4 Коэффициент самодиффузии

Рассчитаем коэффициент самодиффузии через формулы Эйнштейна-Смолуховского и Грина-Кубо для  $T = 1.0, 1.5, 2.0$  и плотности 0.7.

### Метод Эйнштейна-Смолуховского

$$D = \frac{1}{6} \frac{\langle \mathbf{r}^2 \rangle}{t}$$

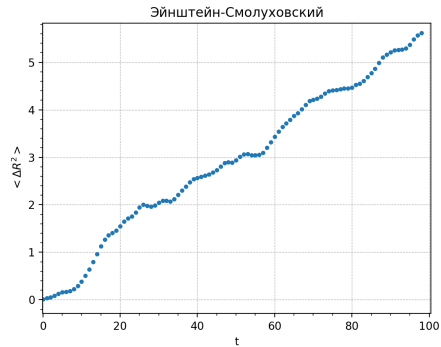
- $T = 1.0$



- $T = 1.5$



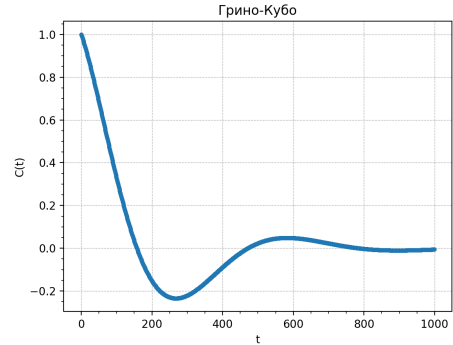
- $T = 2.0$



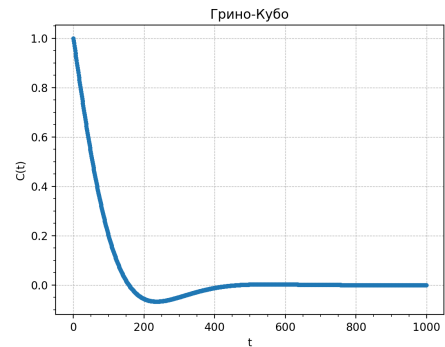
### Метод Грина-Кубо

$$D = \frac{1}{3} \int_0^\infty \langle \mathbf{v}_i(t) \cdot \mathbf{v}_i(0) \rangle dt = \frac{1}{3} S$$

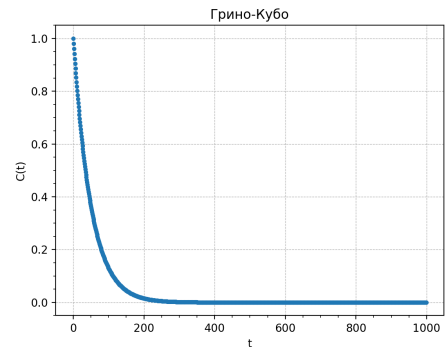
- $T = 1.0$



- $T = 1.5$



- $T = 2.0$



Сведем полученные результаты в таблицу. Можно сделать вывод, что значения коэффициентов диффузии отличаются, но не более чем на 10%. Значения, полученные методом Грина-Кубо получились немного заниженными.

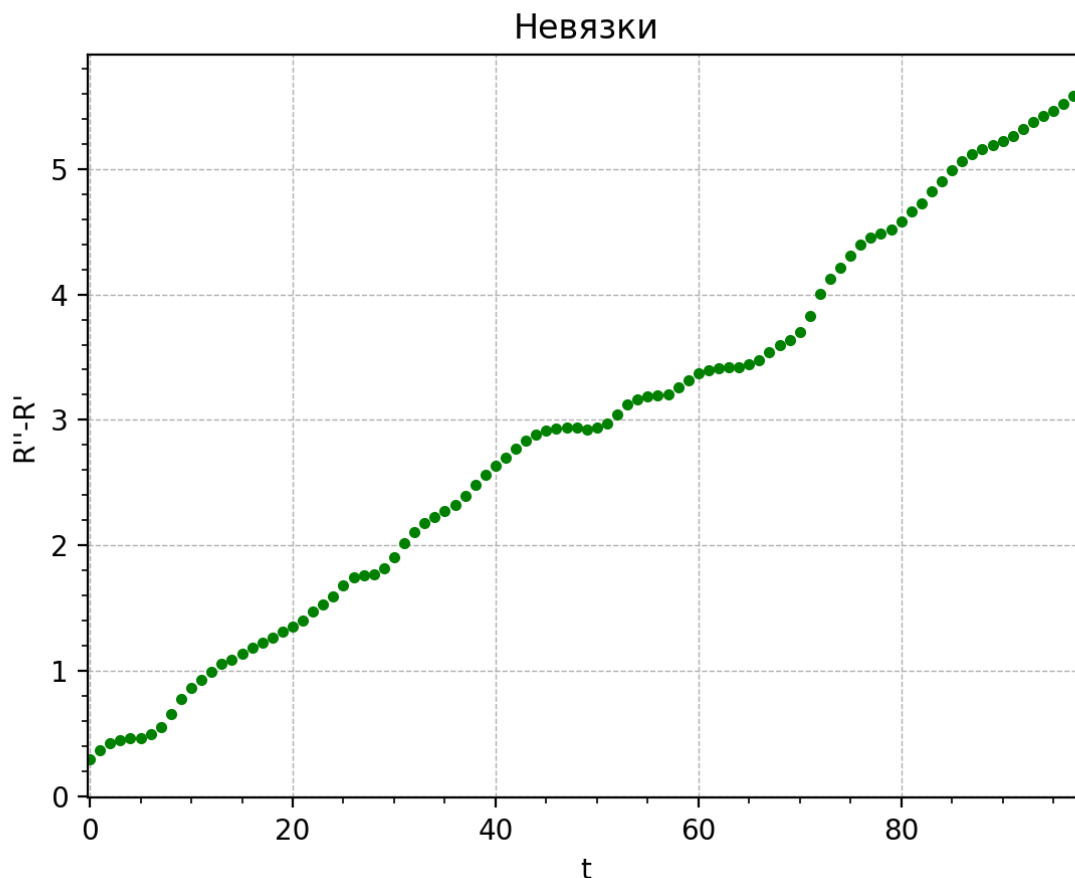
T	Reference	E-S	G-K
1.0	0.105	0.095	0.93
1.5	0.156	0.149	0.141
2.0	0.202	0.198	0.192

## 5 Сравнение с невязками

Рассчитаем невязки для двух разных времен расчета  $t = 0.005$  и  $t = 0.05$  и отнормируем на линейный участок. Можно сделать вывод, что значения совпадают с референсной статьей.

$$\langle (R'' - R')^2 \rangle = 12Dt$$

$$D = 1.023$$



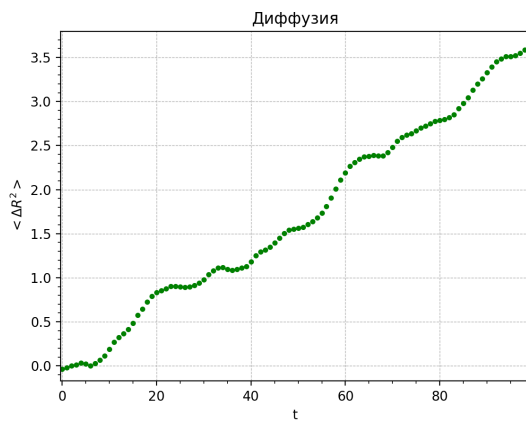
## 6 Влияние термостата

Добавим условие термостата в lammps:

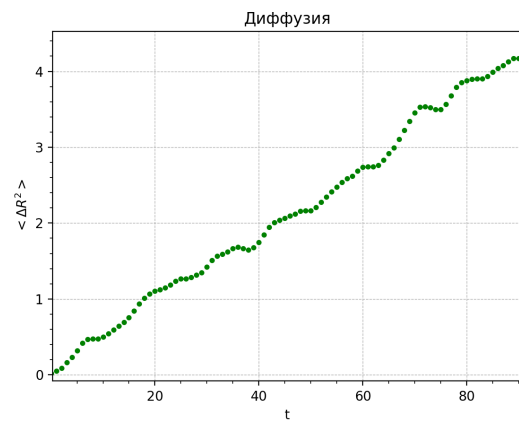
```
"fix ID group-ID nvt keyword _value Tstart Tstop Tdamp".
```

Проверим коэффициенты диффузии с такой поправкой.

Из полученных результатов можно сделать вывод, что значения коэффициентов диффузии слабо отличаются от тех, что были получены ранее. ( $D_{1.0} = 0.098$   $D_{2.0} = 0.193$ )



$T = 1.0$



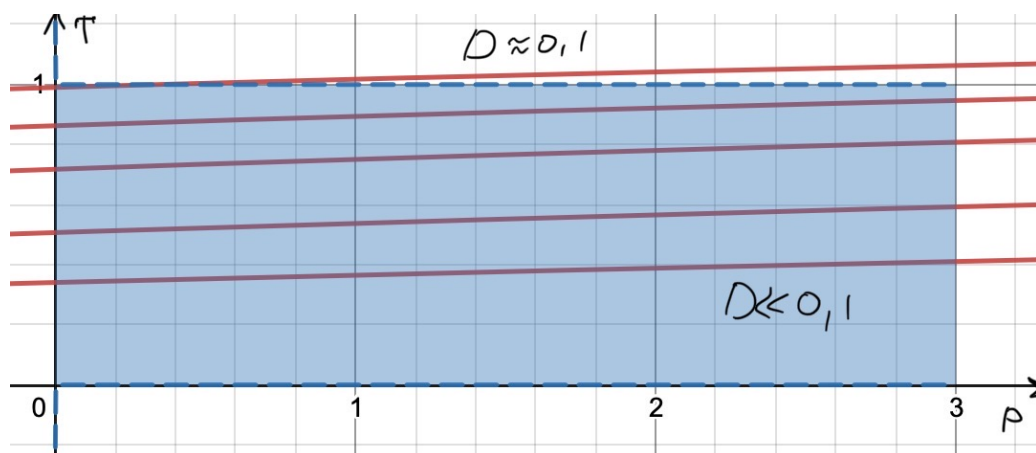
$T = 2.0$

$$7 \quad \log_{10} D = 0.05 + 0.07 \cdot P - \frac{1.04 + 0.1 \cdot P}{T}$$

Проверим формулу  $\log_{10} D = 0.05 + 0.07 \cdot P - \frac{1.04 + 0.1 \cdot P}{T}$ . Для удобства, обозначим величину справа от знака равно за  $f(T, P)$ .

T	$\rho$	P	D	$\log_{10} D$	$f(T, P)$	$\Delta\%$
0.8	0.50	0.352	0.143	-0.844	-1.269	38.6%
0.8	0.60	0.672	0.122	-0.869	-1.289	27.5%
0.8	0.70	1.226	0.087	-1.117	-1.317	15.4%
0.8	0.80	3.521	0.048	-1.319	-1.444	8.6%
0.8	0.85	3.856	0.035	-1.455	-1.462	1.6%

Формула частично верна, что неудивительно, ведь возможность того, чтобы равенство соблюдалось, достигается только при значениях  $D \ll 0.1$ , иначе, по данной формуле, давление при температуре, равной 0.8, должно быть отрицательным, что нефизично.



Допустимые значения коэффициента D

## 8 Заключение

Код нужно переписать так, чтобы с ним было удобно работать и разбираться стороннему пользователю, однако все поставленные задачи выполнить удалось; полученные данные и зависимости схожи теоретическим, а так же полученным в других работах. Github – <https://github.com/Striz-lab/modelling/>.