

ISM3 – CODE DE SIMULATION MICROSCOPIQUE

- 1 – Introduire dans votre code l'algorithme de velocity Verlet sans contrôle de la température. Les forces seront calculées pour le système microscopique « particle.xyz » en conditions périodiques et on introduira des vecteurs/tableaux pour les composantes du moment cinétique (p_x^i, p_y^i, p_z^i) de chaque particule (NB : moment cinétique = masse * vitesse). On prendra $dt = 1$ (fs) et on considérera que le facteur de conversion à appliquer aux unités de force pour obtenir des unités de moment cinétique est :

$$\text{CONVERSION_FORCE} = 0.0001 * 4.186.$$

- 2 – Introduire une routine dans votre code qui permet de calculer l'énergie cinétique de votre système microscopique, c'est à dire :

$$\text{ENERGIE_CINETIQUE} = \frac{1}{2 \times \text{CONVERSION_FORCE}} \times \sum_{i=1}^N \frac{(p_x^i \times p_x^i + p_y^i \times p_y^i + p_z^i \times p_z^i)}{m_i}$$

Cette routine donnera également en sortie la température cinétique du système :

$$T = \frac{1}{N_{dl} \times \text{CONSTANTE_R}} \times \text{ENERGIE_CINETIQUE}$$

On prendra comme masse pour toutes les particules $m_i = 18$ et $\text{CONSTANTE_R} = 0.00199$. N_{dl} est le nombre de degrés de libertés du système, pour des conditions périodiques :

$$N_{dl} = 3 \times N_{particules_total} - 3$$

ISM3 – CODE DE SIMULATION MICROSCOPIQUE

3 – Pour lancer une dynamique moléculaire, il faut générer un premier jeu de moments cinétiques aléatoires « recalibrés » pour correspondre à la température de simulation choisie, ici $T_0 = 300$ K :

$c = \text{random}(\text{seed}) ; s = \text{random}(\text{seed}) ; p_x^i = \text{fonction_signe}(1.0, 0.5-s) * c$
 $c = \text{random}(\text{seed}) ; s = \text{random}(\text{seed}) ; p_y^i = \text{fonction_signe}(1.0, 0.5-s) * c$
 $c = \text{random}(\text{seed}) ; s = \text{random}(\text{seed}) ; p_z^i = \text{fonction_signe}(1.0, 0.5-s) * c$

Moments cinétiques recalibrés pour correspondre à la température choisie $T_0 \Rightarrow$ calculer l'énergie cinétique ENERGIE_CINETIQUE_INIT correspondant aux moments cinétiques précédents puis appliquer la correction RAPPORT aux moments cinétiques :

$$\text{RAPPORT} = N_{\text{dl}} \times \text{CONSTANTE_R} \times T_0 / \text{ENERGIE_CINETIQUE_INIT}$$

$$p_x^i = \text{RAPPORT} \times p_x^i$$
$$p_y^i = \text{RAPPORT} \times p_y^i$$
$$p_z^i = \text{RAPPORT} \times p_z^i$$

ISM3 – CODE DE SIMULATION MICROSCOPIQUE

4 – Les équations du mouvements de Newton conservent le moment cinétique ($P_x P_y P_z$) du centre de masse du système microscopique considéré. Il faut donc encore corriger les moments cinétiques précédents afin que le centre de masse ne se déplace pas. Tout d'abord calculer le moment cinétique du centre masse

$$P_x = \sum_{i=1}^{N_particule_total} p_x^i ; P_y = \sum_{i=1}^{N_particule_total} p_y^i ; P_z = \sum_{i=1}^{N_particule_total} p_z^i$$

Puis corriger les moments cinétiques des particules :

$$p_x^i = p_x^i - P_x/N ; p_y^i = p_y^i - P_y/N ; p_z^i = p_z^i - P_z/N$$

Et réitérer le point 3 du slide précédent pour obtenir un jeu de moments cinétiques qui correspond bien à la température de référence choisie T_0 .

5 – Avec ce jeu de moments cinétiques, lancer votre première simulation de dynamique moléculaire. A chaque itération (i.e. à l'issue de la routine velocity-Verlet), calculer l'énergie totale du système, i.e. la somme de son énergie potentielle U et de son énergie cinétique. Vérifier que cette énergie totale est constante. Comment varient les composantes ($P_x P_y P_z$) du moment cinétique du centre de masse du système ? Comme varie la température du système ?

ISM3 – CODE DE SIMULATION MICROSCOPIQUE

6 – Corriger après `m_step` d'itérations de la dynamique moléculaire les moments cinétiques à l'aide du thermostat de Berendsen :

$$p_x^i \rightarrow p_x^i + \gamma \left(\frac{T_0}{T} - 1 \right) p_x^i ; p_y^i \rightarrow p_y^i + \gamma \left(\frac{T_0}{T} - 1 \right) p_y^i ; p_z^i \rightarrow p_z^i + \gamma \left(\frac{T_0}{T} - 1 \right) p_z^i$$

On prendra $\gamma = 0.01$, T_0 est la température cible (ici 300 K) et T est la température cinétique du système après `m_step` itérations. Comment varie maintenant la température T le long de votre simulation ? Même question avec l'énergie totale du système et les composantes du moment cinétique de son centre de masse.