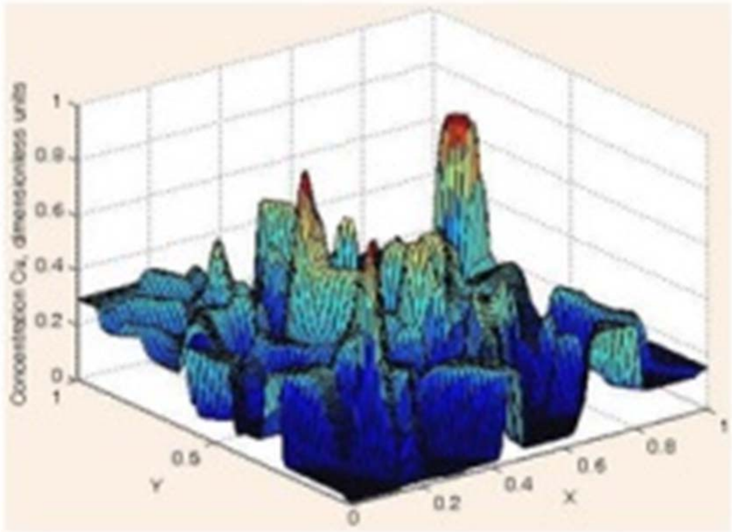
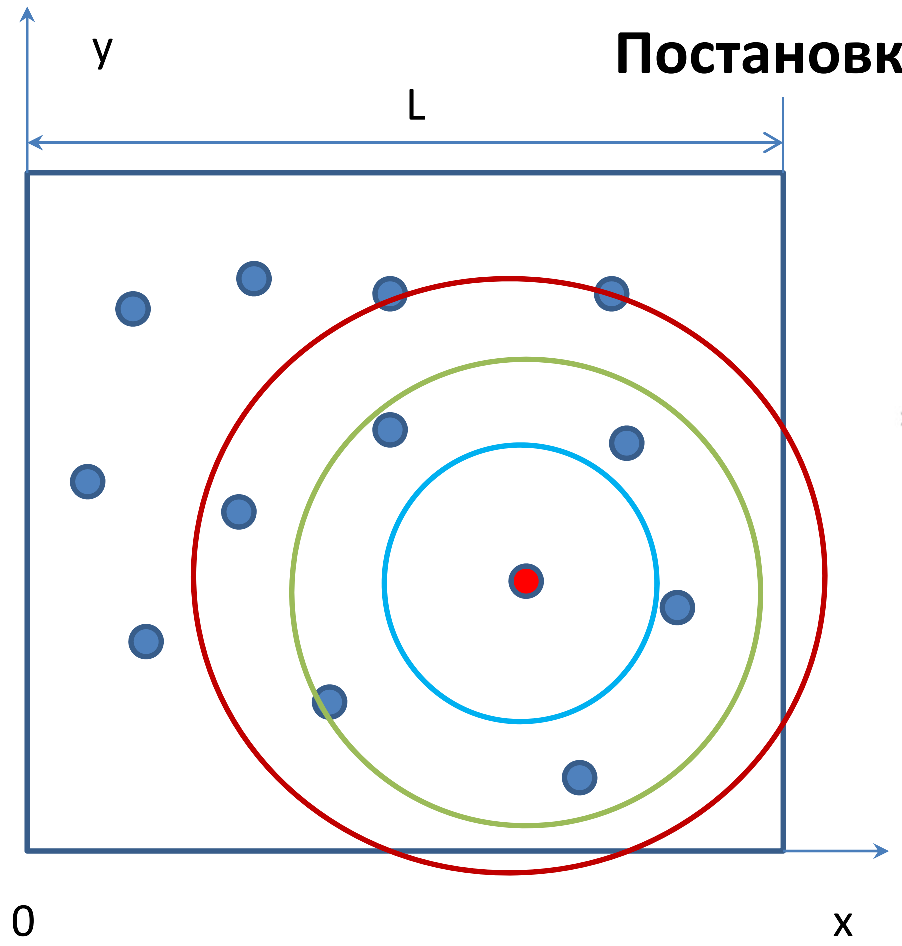


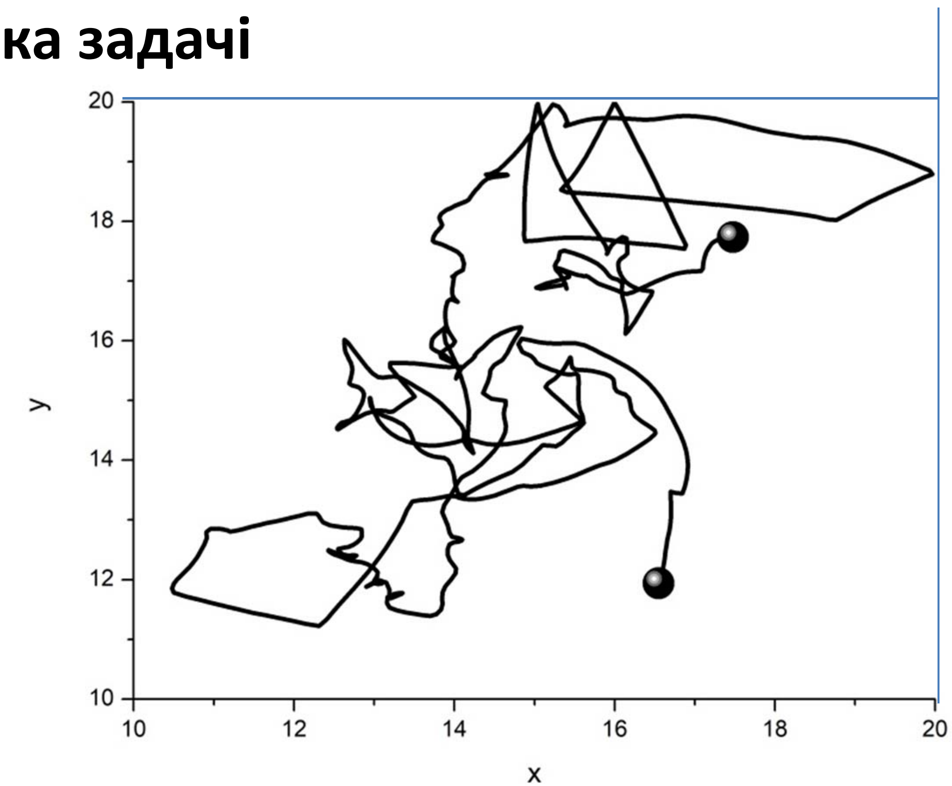
Комп'ютерне моделювання задач прикладної математики

Основи класичної молекулярної динаміки.

Лабораторна робота 2

Постановка задачі





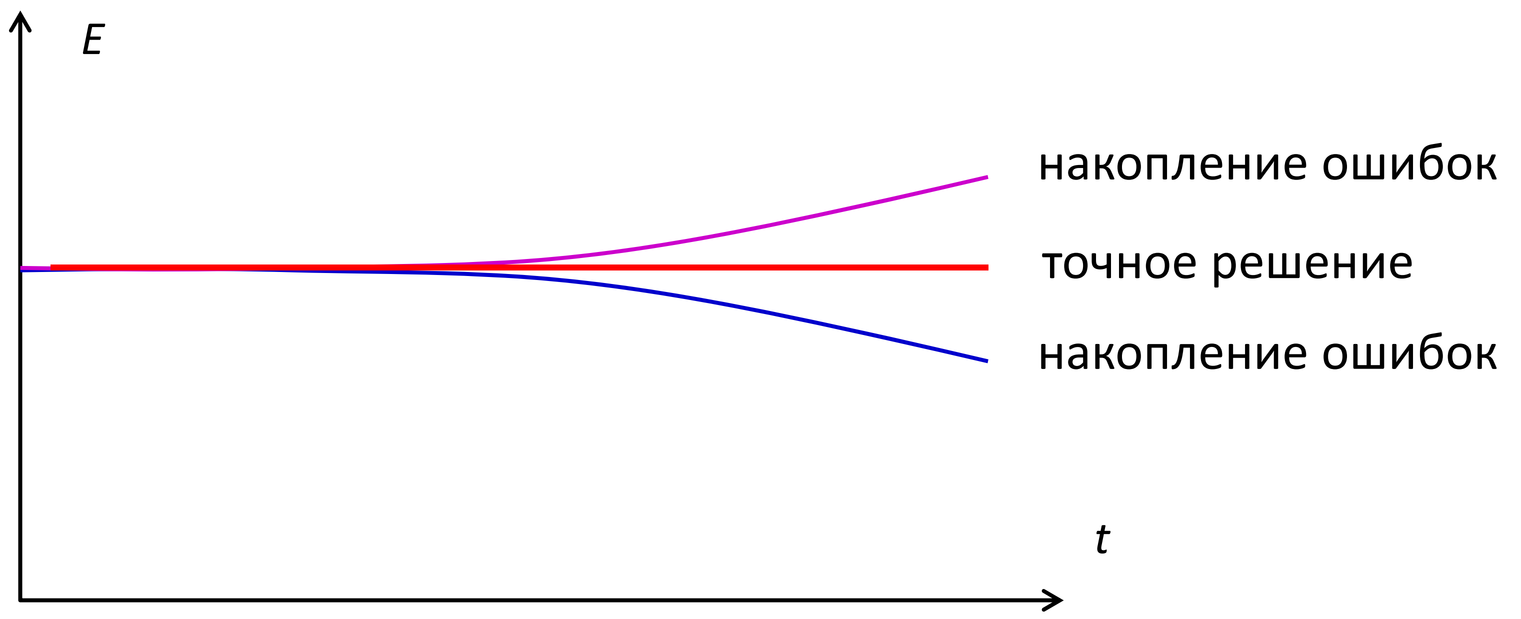
$$\Delta x_i = |x_i - x_{i0}|$$

$$\Delta y_i = |y_i - y_{i0}|$$

```
double randV()
{
  double
ksi=rand_r(&seedp)/(RAND_MAX+1.0);
  return(ksi);
}
```

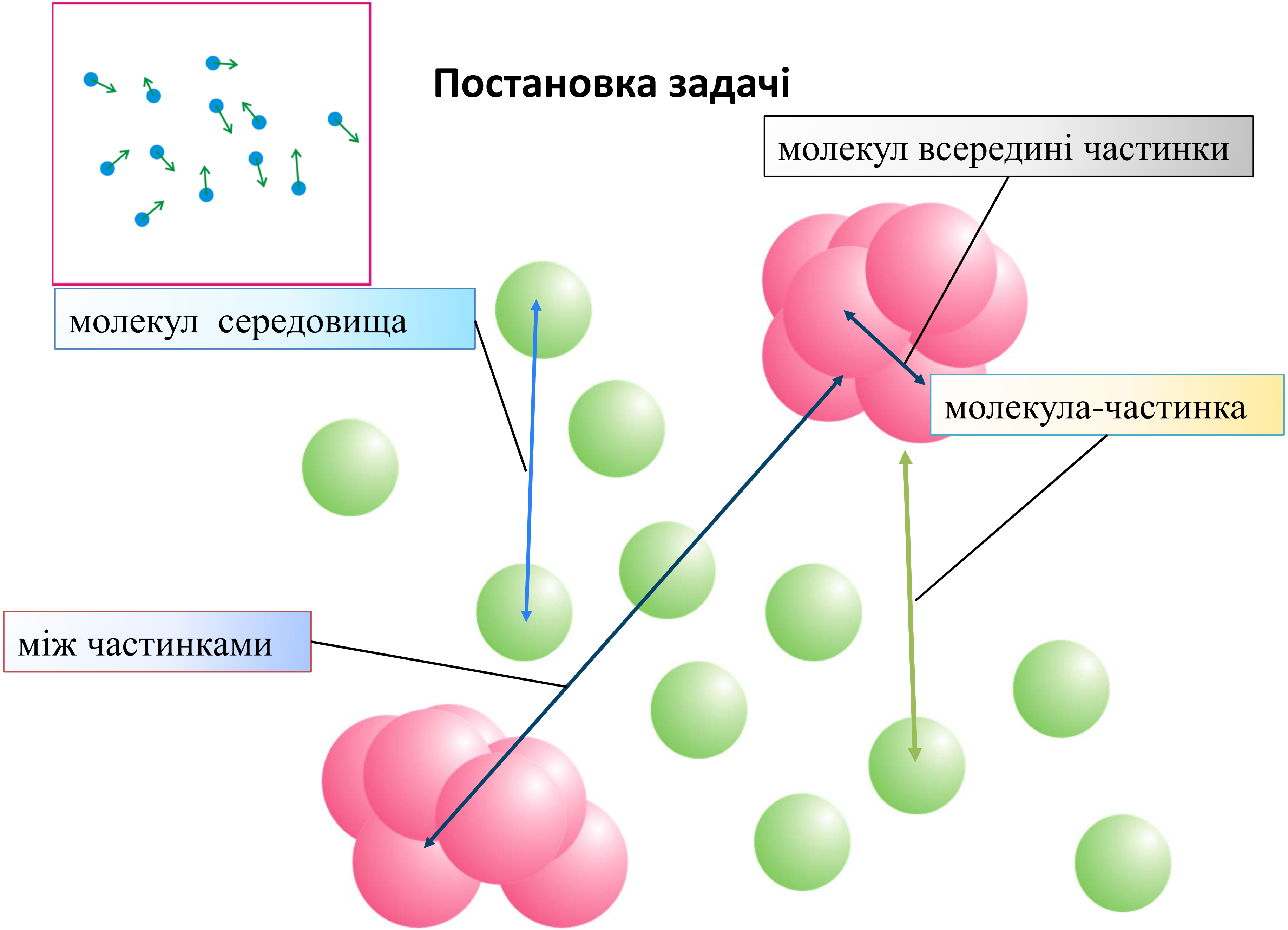
```
for (i=0; i<N; i++)
 {
   x[i]=randV()*Lx;
   y[i]=randV()*Ly;
   vx[i]=vmax*(2.0*randV()-1.0);
   vy[i]=vmax*(2.0*randV()-1.0);
 };
```

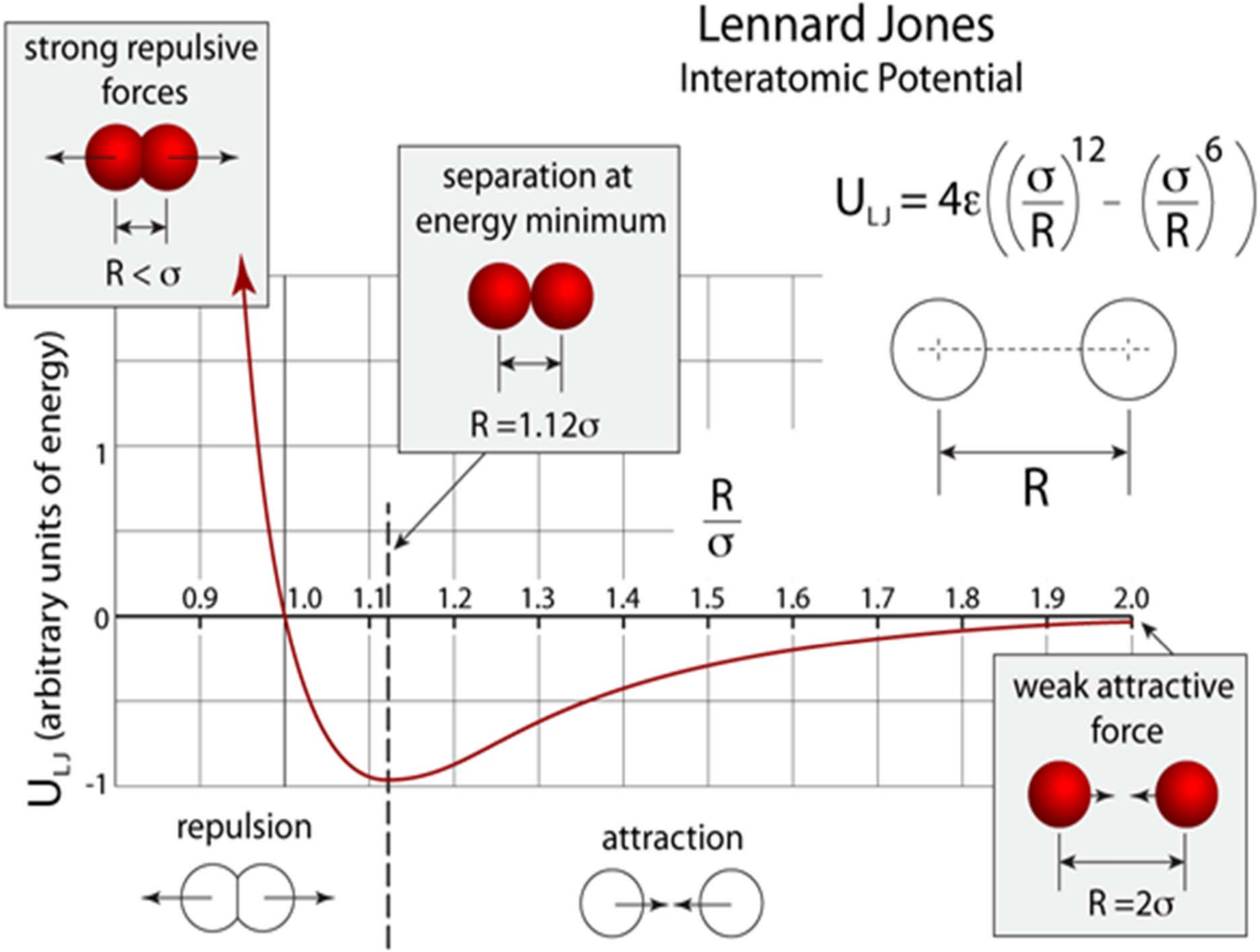
Поведение полной энергии при моделировании



За счет накопления ошибок полная энергия в процессе моделирования может постепенно изменяться. Тогда необходимо повысить точность расчетов путем уменьшения шага времени.

Постановка задачі





$$R_i = \sqrt{(x_i - x_{i0})^2 + (y_i - y_{i0})^2}$$

$$U_{LJ} = 4\varepsilon\left(\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R}\right)^{6}\right)$$

$$m_i\vec{a}_i = \vec{F}_i = -\frac{\partial U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)}{\partial \vec{r}_i} \quad (i = 1,2,\dots,N)$$

$$a_{xi} = \frac{F(x_i, y_i)}{m_i} = -\frac{1}{m_i}\frac{\partial}{\partial x_i}U(x_i, y_i)$$

$$a_{yi} = \frac{F(x_i, y_i)}{m_i} = -\frac{1}{m_i}\frac{\partial}{\partial y_i}U(x_i, y_i)$$

```
double Phi(double r)
{
  double sr6=pow(sigma/r,6);
  double u=4.0*epsilon*(sr6*sr6-sr6);
  return(u);
}

double F(double r)
{
  double sr6=pow(sigma/r,6);
  double u=24*epsilon*sigma/r*sr6*(2*sr6-1);
  return(u);
}
```

Алгоритм Ейлера

$$a_{xi} = \frac{F(x_i, y_i)}{m_i} = -\frac{1}{m_i}\frac{\partial}{\partial x_i}U(x_i, y_i)$$
$$a_{yi} = \frac{F(x_i, y_i)}{m_i} = -\frac{1}{m_i}\frac{\partial}{\partial y_i}U(x_i, y_i)$$

$$x_i(t + \Delta t) = x_i(t) + v_{xi}(t)\Delta t$$
$$y(t + \Delta t) = y_i(t) + v_{yi}(t)\Delta t$$

$$v_{xi}(t + \Delta t) = v_{xi}(t) + a_{xi}(t)\Delta t$$
$$v_{yi}(t + \Delta t) = v_{yi}(t) + a_{yi}(t)\Delta t$$

$$a = \frac{dv}{dt} = \frac{d^2x}{dt^2}$$
$$\frac{dx}{dt} = v$$
$$\frac{dv}{dt} = a$$

Алгоритм Верле

$$a_{xi} = \frac{F(x_i, y_i)}{m_i} = -\frac{1}{m_i}\frac{\partial}{\partial x_i}U(x_i, y_i)$$

$$a_{yi} = \frac{F(x_i, y_i)}{m_i} = -\frac{1}{m_i}\frac{\partial}{\partial y_i}U(x_i, y_i)$$

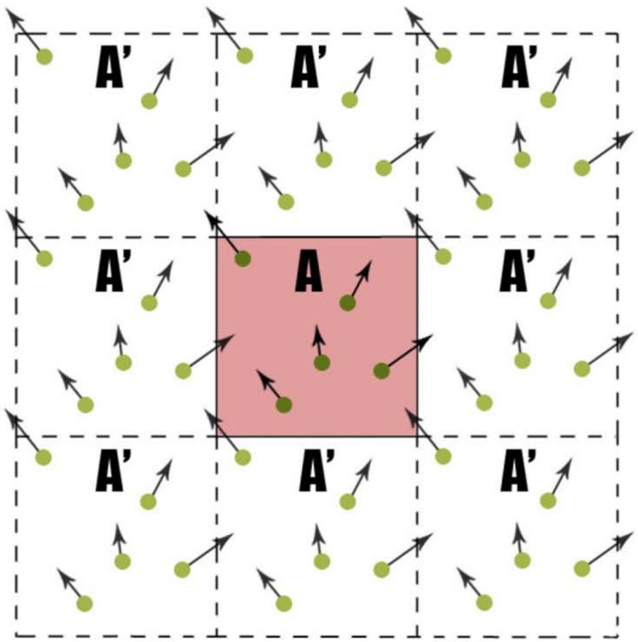
$$x_i(t + \Delta t) = x_i(t) + v_{xi}(t)\Delta t + \frac{1}{2}a_{xi}(t)(\Delta t)^2$$

$$y_i(t - \Delta t) = y_i(t) - v_{yi}(t)\Delta t + \frac{1}{2}a_{yi}(t)(\Delta t)^2$$

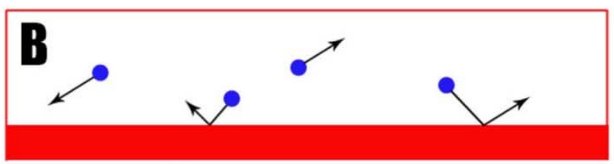
$$v_{xi}(t) = \frac{1}{2\Delta t}[x_i(t + \Delta t) + x_i(t - \Delta t)] = \frac{1}{2}\left[\frac{x_i(t + \Delta t)}{\Delta t} + \frac{x_i(t - \Delta t)}{\Delta t}\right]$$

$$v_{yi}(t) = \frac{1}{2\Delta t}[y_i(t + \Delta t) + y_i(t - \Delta t)]$$

Граничні умови



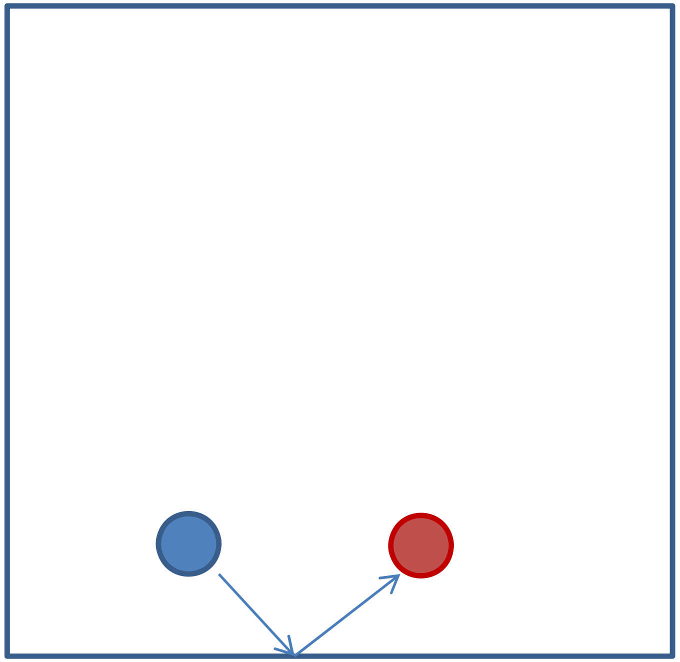
Периодические ГУ



Жесткая стенка

1. Периодические граничные условия (ГУ): каждый атом взаимодействует со своим периодическим образом. A - ячейка моделирования, A' - периодический образ ячейки моделирования;
2. Жесткая стенка (фиксированные ГУ): одна или несколько из стенок ячейки моделирования B закреплена и является жесткой, то есть при столкновении с ней атомы будут отталкиваться;
3. Комбинированные ГУ могу сочетать периодические ГУ в одном/двух направлениях и жестко закрепленные стенки в других/третьем направлении.

Жорсткі граничні умови



```
void Test3(double *x, double *y, double *vx,
double *vy)
{
  if (*x<0)  {*x=-*x; *vx=-*vx;}
  if (*x>Lx) {*x=Lx-(*x-Lx); *vx=-*vx;}
  if (*y<0)  {*y=-*y; *vy=-*vy;}
  if (*y>Ly) {*y=Ly-(*y-Ly); *vy=-*vy;}
};
```

Моделювання руху систем взаємодіючих частинок

- Побудуйте траєкторії руху *N* матеріальних частинок з масами $m_i = 1$ (i = 1..*N*), що взаємодіють між собою із силами $F_{ij} = F_{ij}(r_{ij})$ (r_{ij} — відстань між частинками *i* та *j*) у силовому полі $F_i = F(x_i)$ при заданих початкових координатах $x_i(t = 0)$ та швидкостях $v_i(t = 0)$.
- Визначте внутрішню енергію (або температуру) системи у рівноважному стані.
- Використовуючи відому формулу Ейнштейна, розрахуйте коефіцієнт самодифузії:

$$D = \frac{R(t)^2}{2dt}, \qquad t \to \infty$$

де *d* — вимірність простору; $R(t)^2$ — середній квадрат зсуву, розрахований за формулою

$$R(t)^2 = \langle |r_i(t_2) - r_i(t_1)|^2 \rangle$$

де r_i — координата *i*-ї частинки; <> — оператор усереднення за всіма частинками.

- *Теоретичний матеріал: theory_lab2.pdf*
- *Алгоритм реалізації: code_lab2.pdf*

Task 1

Термодинамічні величини

$$A(t) = f(\vec{r}_1(t),\ldots,\vec{r}_N(t),\vec{v}_1(t),\ldots,\vec{v}_N(t)) \qquad < A > \frac{1}{N_T}\sum_{t=1}^{N_T} A(t)$$

$$R(t)^2 = \langle |r_i(t_2) - r_i(t_1)|^2 \rangle \qquad r_i = \sqrt{(x_i - x_{i0})^2 + (y_i - y_{i0})^2}$$

$$D = \frac{R(t)^2}{2dt}, \qquad t \to \infty$$

– Середньоквадратичне зміщення

$$U = \left\langle \sum_i \sum_{j>i} \varphi(|\vec{r}_i(t) - \vec{r}_j(t)|) \right\rangle$$

– Средня потенціальна енергія

$$K =< K(t) >= \left\langle \frac{1}{2}\sum_i m_i v_i^2(t) \right\rangle$$

– Средня кінетична енергія

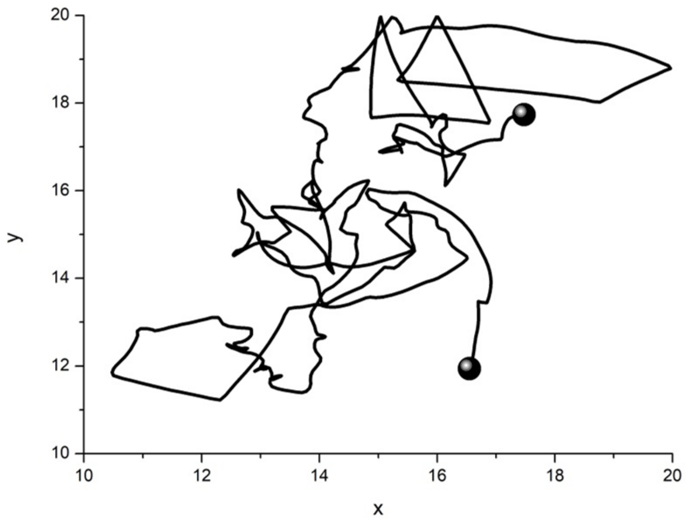
$$E = K + U$$

– Повна енергія

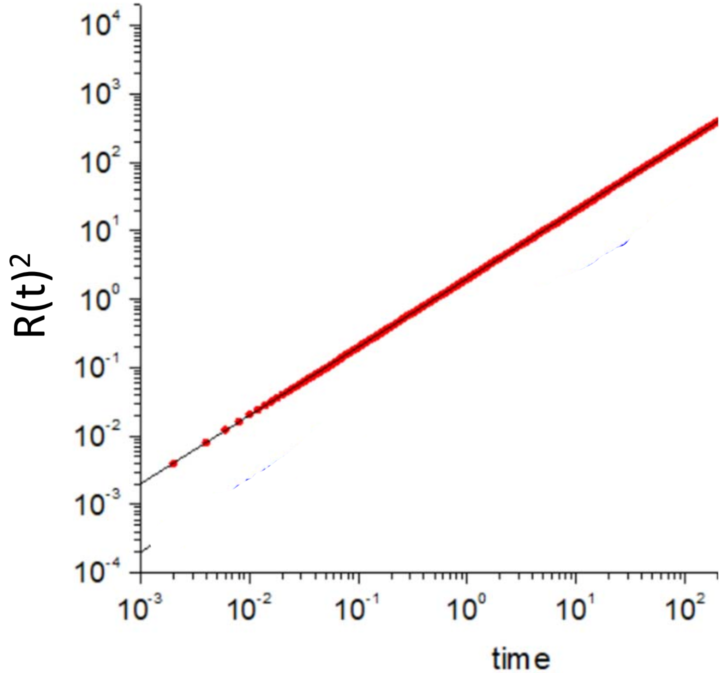
Task 1

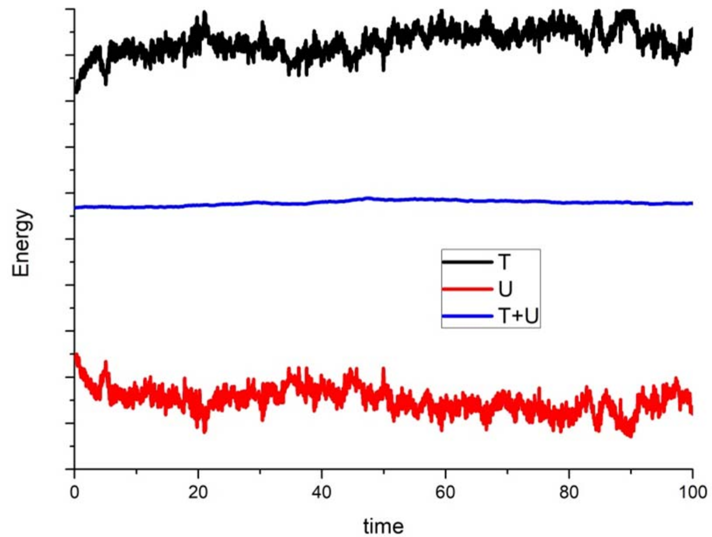
Приклад

- $m_i = 1$, $\varepsilon = 1$ та $\sigma = 1$.



Фазовий портрет однієї частинки



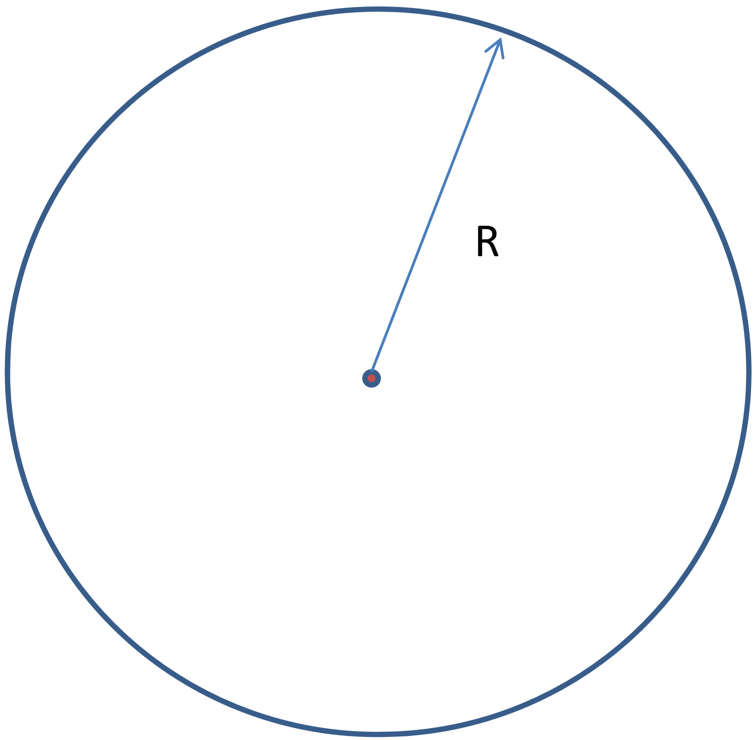


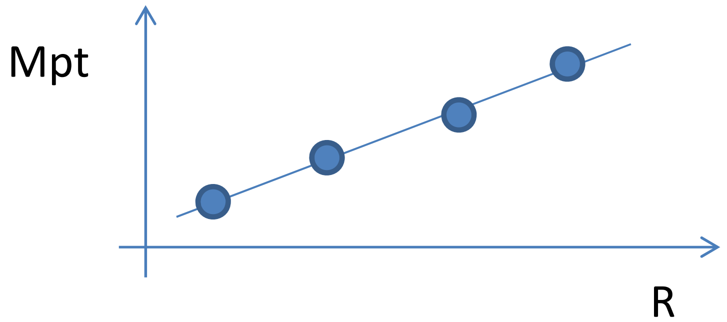
Залежності енергій від часу

Середній час досягання цілі

Task 2

$m_i = 1$, $\varepsilon = 1$ та $\sigma = 1$.





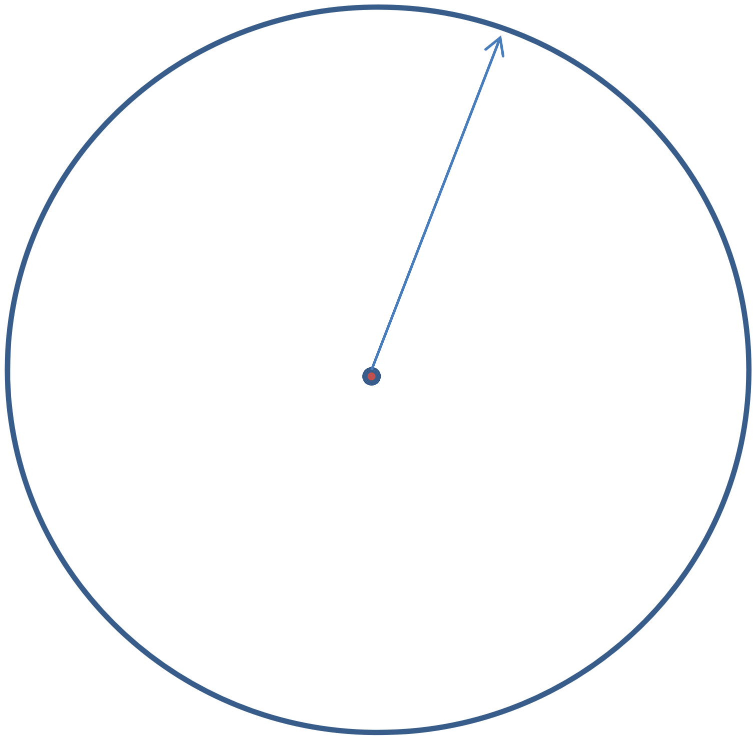
?

$$R_i = \sqrt{(x_i - x_{i0})^2 + (y_i - y_{i0})^2}$$

Середній час досягання цілі

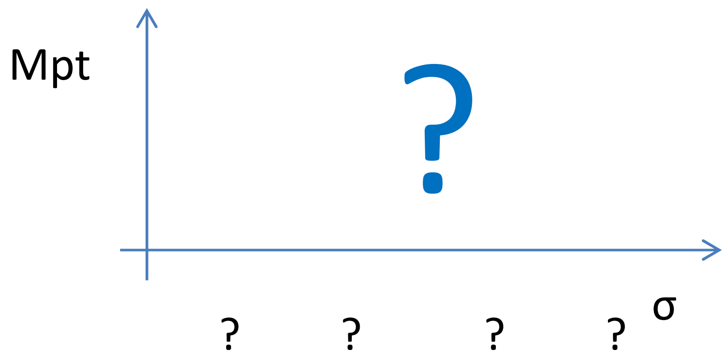
Task 3

$m_i = 1$



R= const = 3

ε = 1



$m_i = 1$ σ = 1.