

运行说明

代码思路

(3)微正则系综的分子动力学模拟

取 *Lenard – Jones* 势: $U(r) = 4\epsilon[(\frac{\sigma}{r})^{12} - (\frac{\sigma}{r})^6]$

$$F_i, x = 48(\frac{\epsilon}{\sigma^2})\sum_{j=1, j \neq i} (x_i - x_j)[(\frac{\sigma}{r_{ij}})^{14} - \frac{1}{2}(\frac{\sigma}{r_{ij}})^8]$$
$$F_i, y = 48(\frac{\epsilon}{\sigma^2})\sum_{j=1, j \neq i} (y_i - y_j)[(\frac{\sigma}{r_{ij}})^{14} - \frac{1}{2}(\frac{\sigma}{r_{ij}})^8]$$
$$F_i, z = 48(\frac{\epsilon}{\sigma^2})\sum_{j=1, j \neq i} (z_i - z_j)[(\frac{\sigma}{r_{ij}})^{14} - \frac{1}{2}(\frac{\sigma}{r_{ij}})^8]$$

代入 $\epsilon = \sigma = m = 1$,

$$F_i, x = 48\sum_{j=1, j \neq i} (x_i - x_j)[(\frac{1}{r_{ij}})^{14} - \frac{1}{2}(\frac{1}{r_{ij}})^8]$$
$$F_i, y = 48\sum_{j=1, j \neq i} (y_i - y_j)[(\frac{1}{r_{ij}})^{14} - \frac{1}{2}(\frac{1}{r_{ij}})^8]$$
$$F_i, z = 48\sum_{j=1, j \neq i} (z_i - z_j)[(\frac{1}{r_{ij}})^{14} - \frac{1}{2}(\frac{1}{r_{ij}})^8]$$

从 $9 \times 9 \times 9$ 个内点中随机抽样 64 个点, 作为 x 个点的初始位置。

取 α, β 为 0 到 π 随机均匀分布, 表示初始速度。

有 $v_x = v \cos(\alpha)$

有 $v_y = v \sin(\alpha) \cos(\beta)$

有 $v_z = v \sin(\alpha) \sin(\beta)$

作图展示初态分布。

考虑演化过程, 依题意 $h = 0.02s$,

使用 *verlet* 算法,

$$x_i^{n+1} = x_i^n + hv_{i,x}^n + F_{i,x}^n h^2 / 2$$

$$y_i^{n+1} = y_i^n + hv_{i,y}^n + F_{i,y}^n h^2 / 2$$

$$z_i^{n+1} = z_i^n + hv_{i,z}^n + F_{i,z}^n h^2 / 2$$

$$v_{i,x}^{n+1} = v_{i,x}^n + h(F_{i,x}^{n+1} + F_{i,x}^n) / 2$$

$$v_{i,y}^{n+1} = v_{i,y}^n + h(F_{i,y}^{n+1} + F_{i,y}^n) / 2$$

$$v_{i,z}^{n+1} = v_{i,z}^n + h(F_{i,z}^{n+1} + F_{i,z}^n) / 2$$

$t = 0$ 时使用随机生成的位置和速度。注意每个循环结束后 v 比 x 慢一步, 故所有循环结束后需单独计算最后一步 v 。

循环内求解顺序为 $F \rightarrow v \rightarrow x$

迭代 200 次并作图和视频。

(4)正则系综的分子动力学模拟

Lenard – Jones 势, 受力 F 公式同上, 仅限二维

取 α 为 0 到 π 随机均匀分布, 表示初始速度。

有 $v_x = v \cos(\alpha)$

有 $v_y = v \sin(\alpha)$

作图展示初态分布。

考虑演化过程, 依题意 $h = 0.02s$,

使用 *verlet* 算法,

$$x_i^{n+1} = x_i^n + hv_{i,x}^n + F_{i,x}^n h^2 / 2$$

$$y_i^{n+1} = y_i^n + hv_{i,y}^n + F_{i,y}^n h^2 / 2$$

$$z_i^{n+1} = x_i^n + hv_{i,z}^n + F_{i,z}^n h^2 / 2$$

$$\beta = \frac{(3N - 4)kT}{\sum m v_i^2}$$

$$v_{i,x}^{n+1} = v_{i,x}^n + h(F_{i,x}^{n+1} + F_{i,x}^n) / 2$$

$$v_{i,y}^{n+1} = v_{i,y}^n + h(F_{i,y}^{n+1} + F_{i,y}^n) / 2$$

$t = 0$ 时使用随机生成的位置和速度。

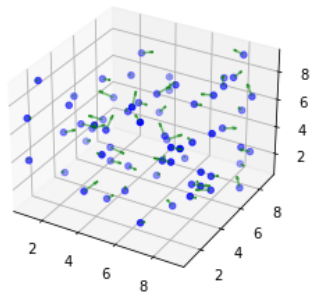
迭代 200 次并作图和视频。注意每个循环结束后 v 比 x 慢一步, 故所有循环结束后需单独计算最后一步 v 。

循环内求解顺序为 $F \rightarrow v \rightarrow x$

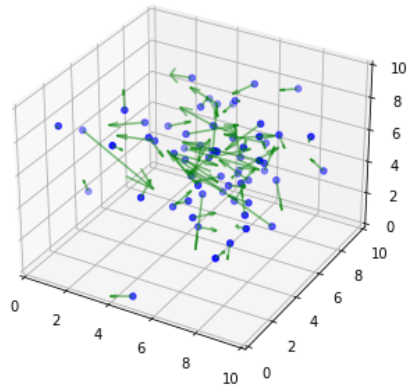
运行结果

(3)初

从 9×9 个内点中随机抽样 64 个点, 作为 x 个点的初

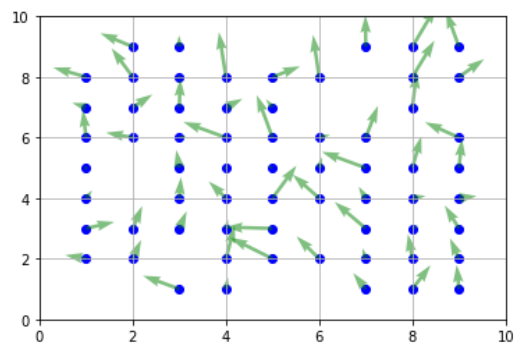


末

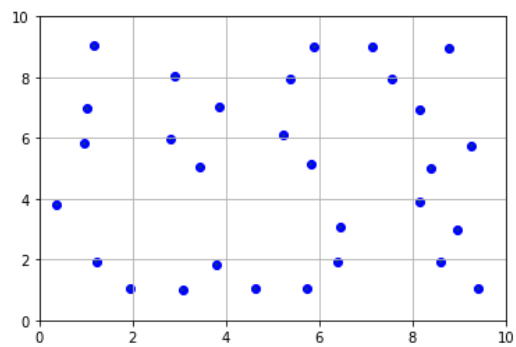


动画见HW6_3.gif

(4)初



末



动画见HW6_4.gif