ריצה על קובץ 2:4 עם PBC

זמן ריצה: 500K צעדי זמן

את הריצה ביצעתי באופן ממוקבל עם 8 threads ואורכה סה"כ 1:18:55 .

צעדי זמן להפוגה בסוף ותחילת הריצה- 2000

צעדי זמן להרצת הפוטנציאל הנוסף על רביעייה נבחרת- 10K

צעדי זמן להפוגה בין הפעלת הפוטנציאל על רביעיות שונות – 400

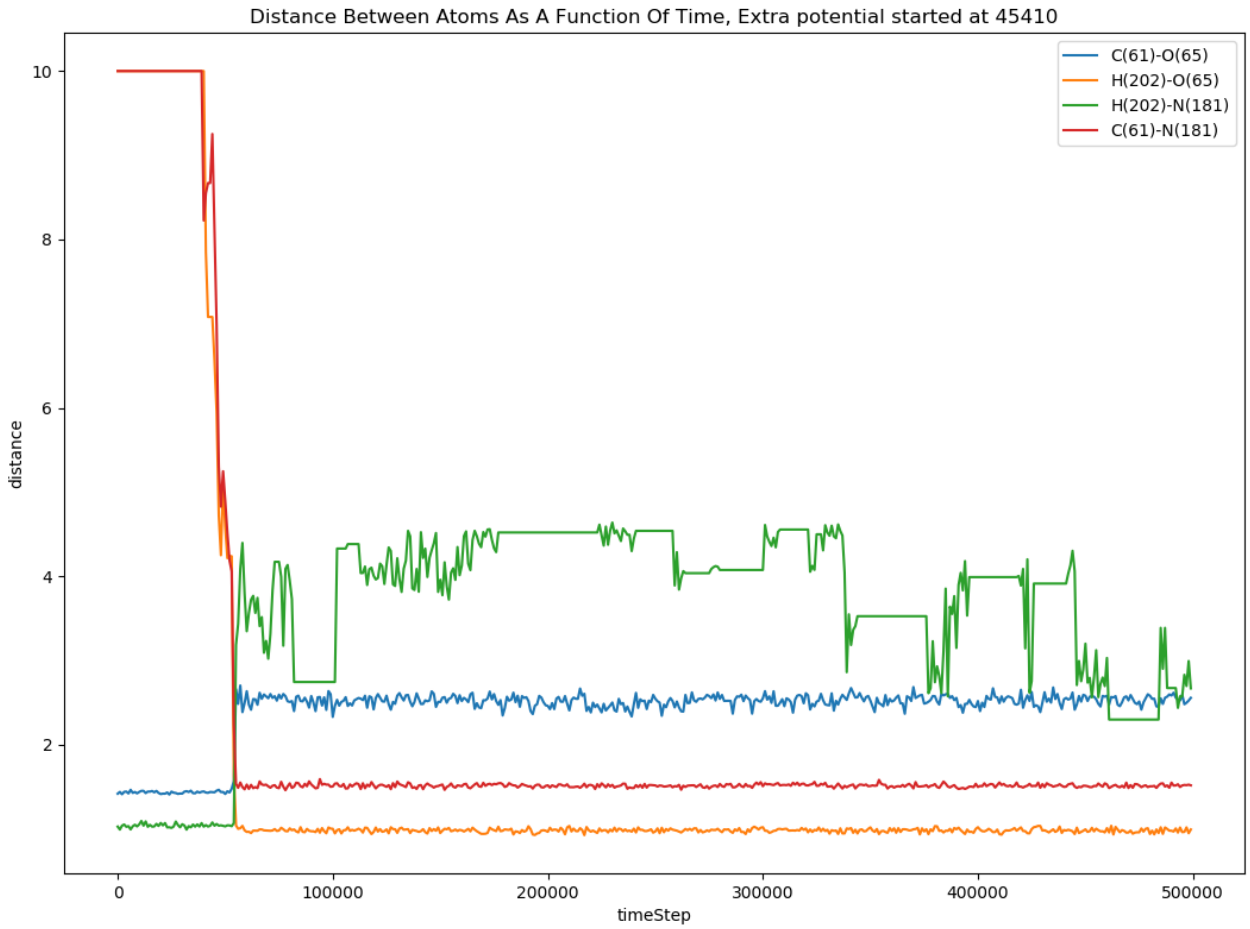
פרמטרים של הפוטנציאל:

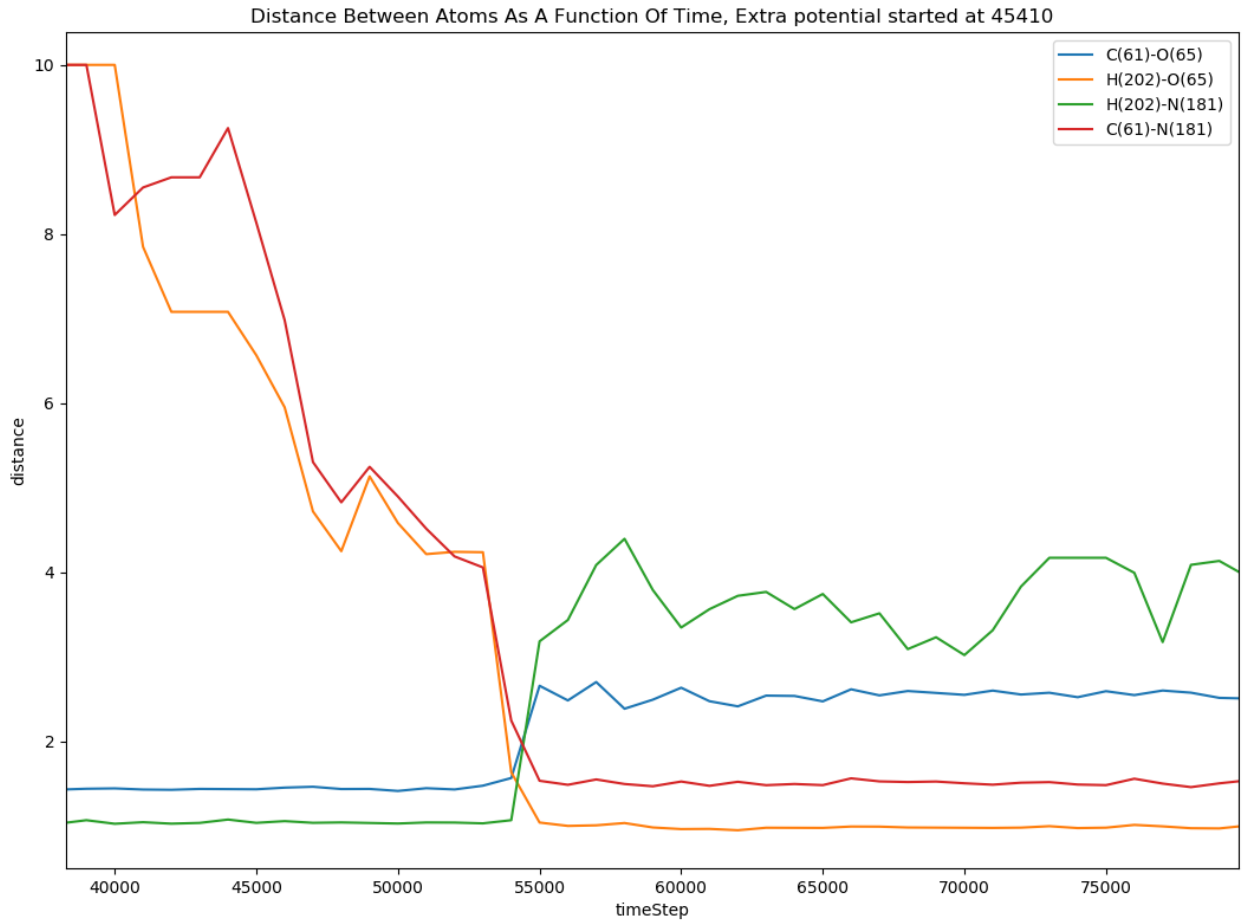
PAIR	O-C	N-C	H-O
F1	60	120	120
F2	0.5	1.0	1.0
R12	3.0	1.5	1.0

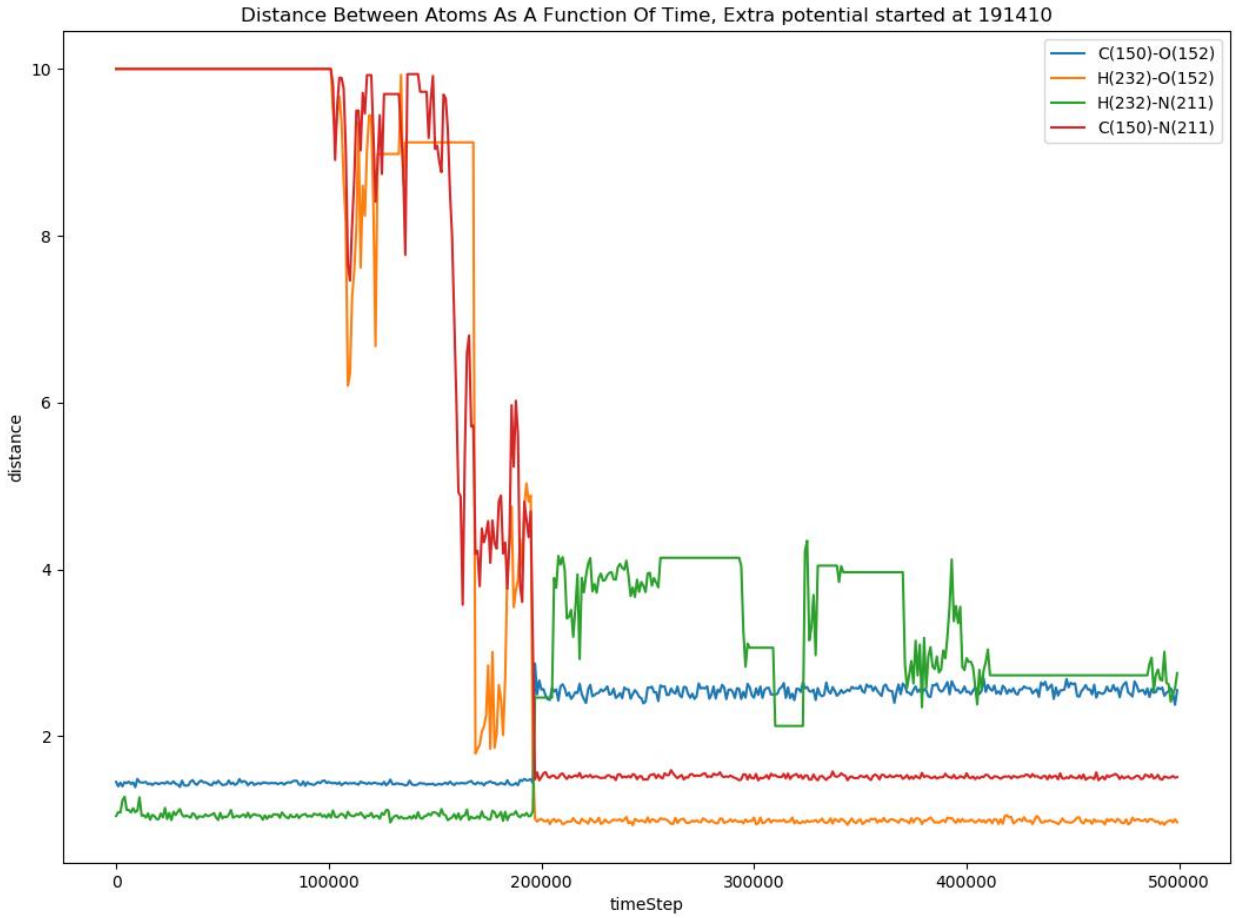
תוצאות:

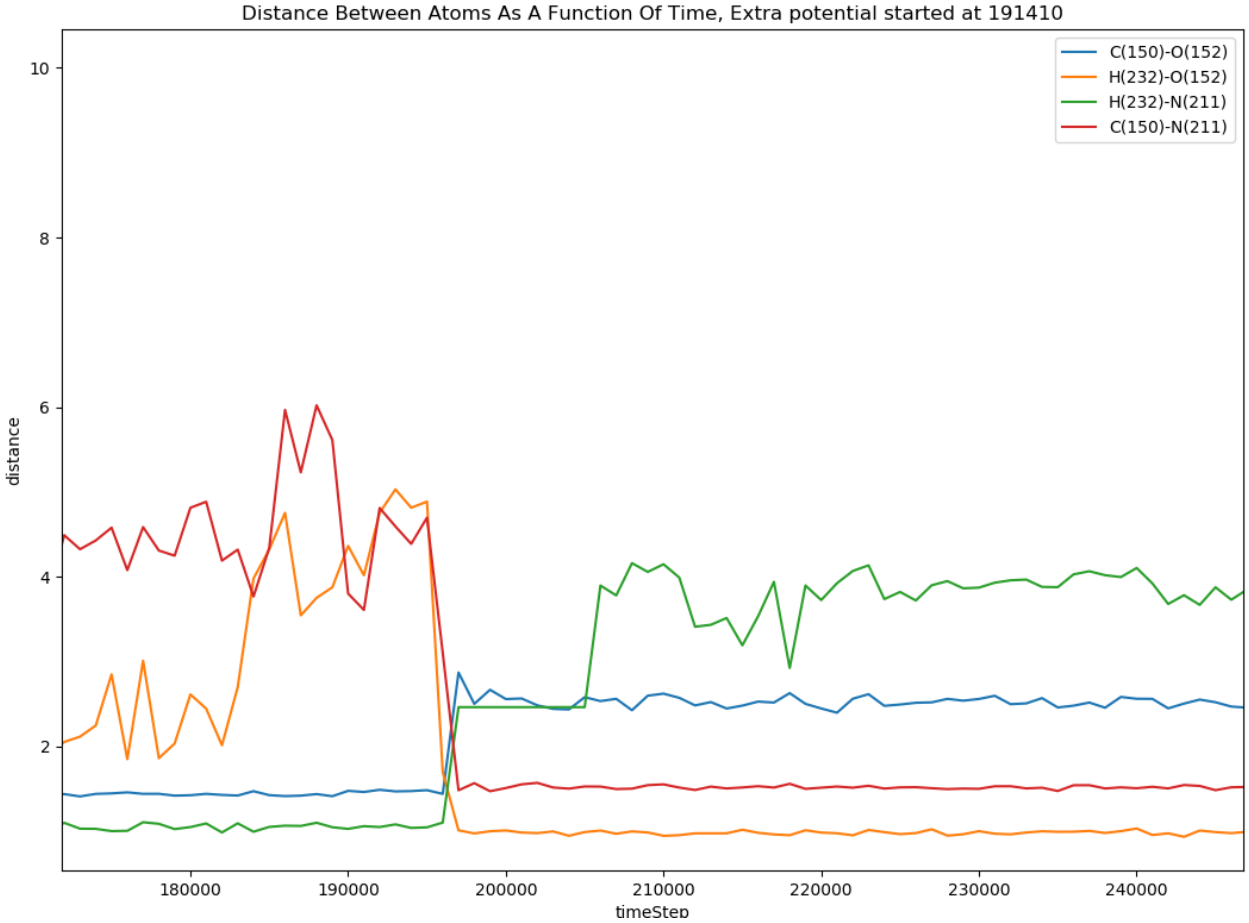
במהלך הריצה הופעל את הפוטנציאל על 42 רביעיות, אציג את הגרפים של ארבעת הרביעיות בהן תהליך הצילוב הושלם ונותר יציב בשני אופנים- לאורך זמן הריצה, וב"זום אין" לזמן ההתרחשות.

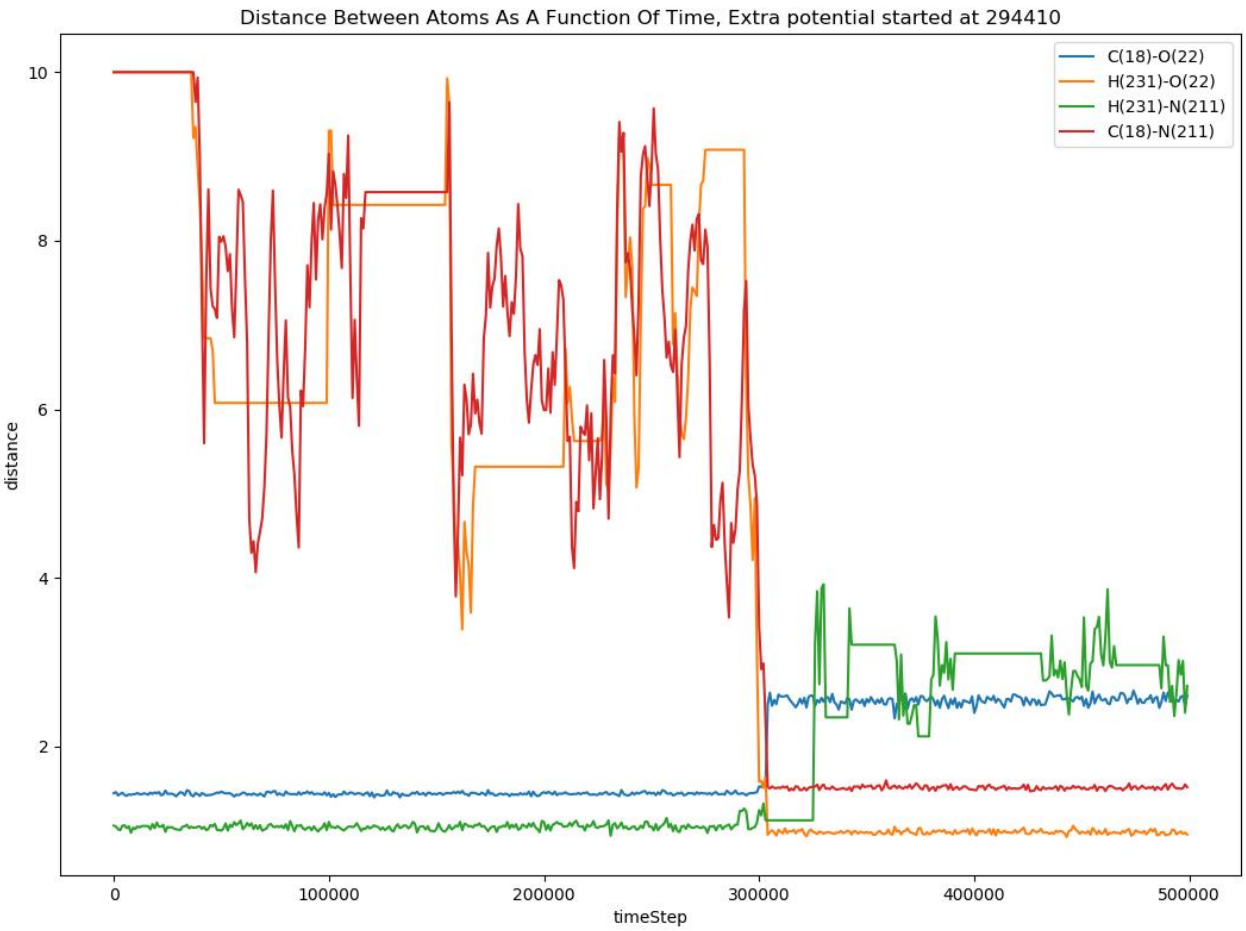
הערה חשובה: בגלל שאני לא מצליחה למצוא דרך אלגנטית בקוד לחישוב המרחקים בין האטומים לקובץ התיעוד תוך התחשבות בPBC אני לוקחת את המרחקים מחישובים שLAMMPS מבצע ברשימות השכנויות bond, far neigh list.
ולכן אני לא עוקבת אחר מרחקים בין אטומים הגדולים מ-10 אנגסטרום. כדי שאוכל בכל זאת להציג אותם בגרף שמתי ערך "דיפולטיבי" ביניהם- 10 אנגסטרום. בנוסף, אם יש קווים ישרים במרחקים בין אטומים ולא ויבראציות, זה כי לא מצאתי את המרחק בין זוג האטומים באחת מהרשימות לאמפס למרות שהוא קטן מ-10 אנגסטרום, ולכן שמתי את המרחק האחרון שמצאתי. הבעיה הזאת מתרחשת בעיקר בתיעוד מרחקים בין זוגות אטומים שלא מחוברים בקשר כימי.

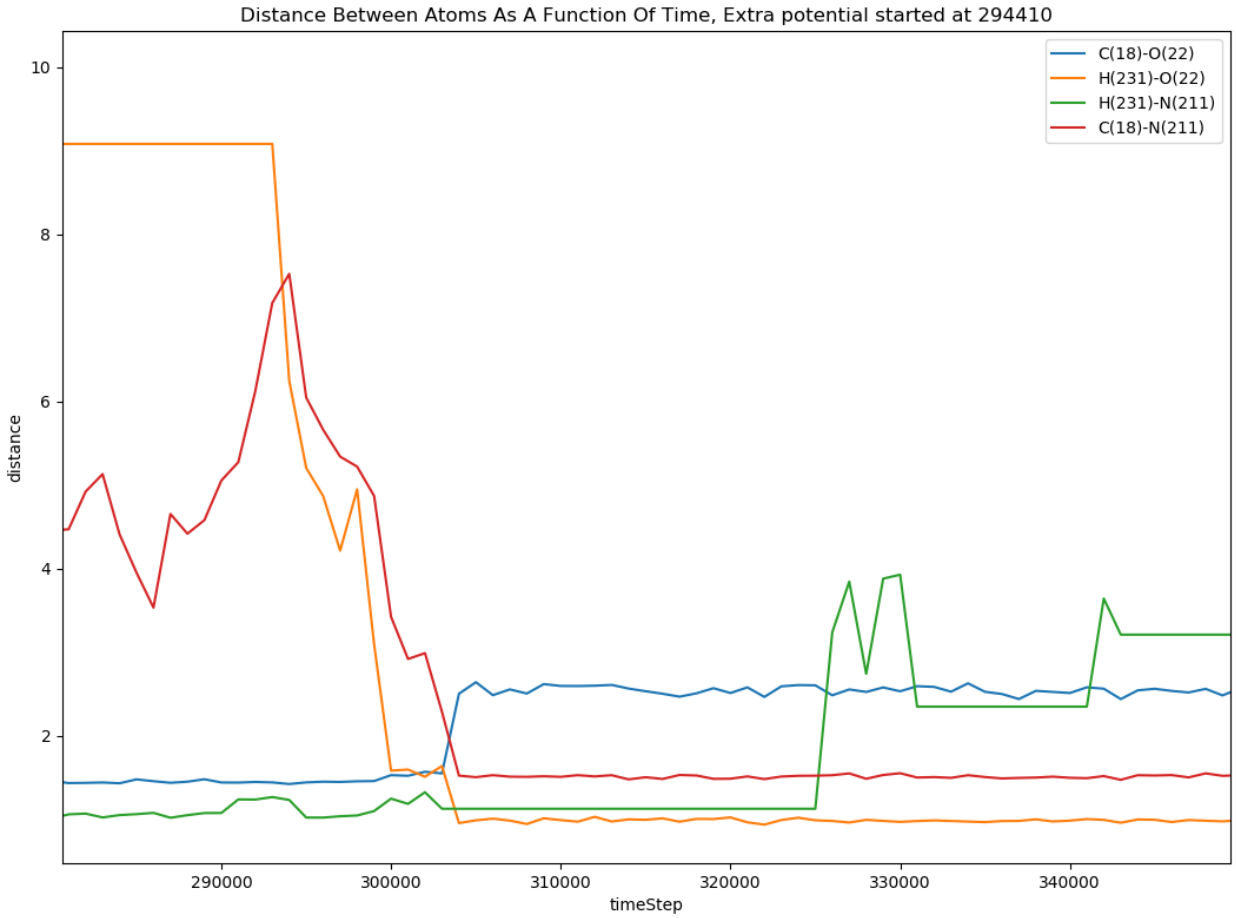

Distance Between Atoms As A Function Of Time, Extra potential started at 45410
C(61)-O(65)
H(202)-O(65)
H(202)-N(181)
C(61)-N(181)
distance
timeStep
10
8
6
4
2
0
100000
200000
300000
400000
500000


Distance Between Atoms As A Function Of Time, Extra potential started at 45410
C(61)-O(65)
H(202)-O(65)
H(202)-N(181)
C(61)-N(181)
distance
timeStep
10
8
6
4
2
40000
45000
50000
55000
60000
65000
70000
75000

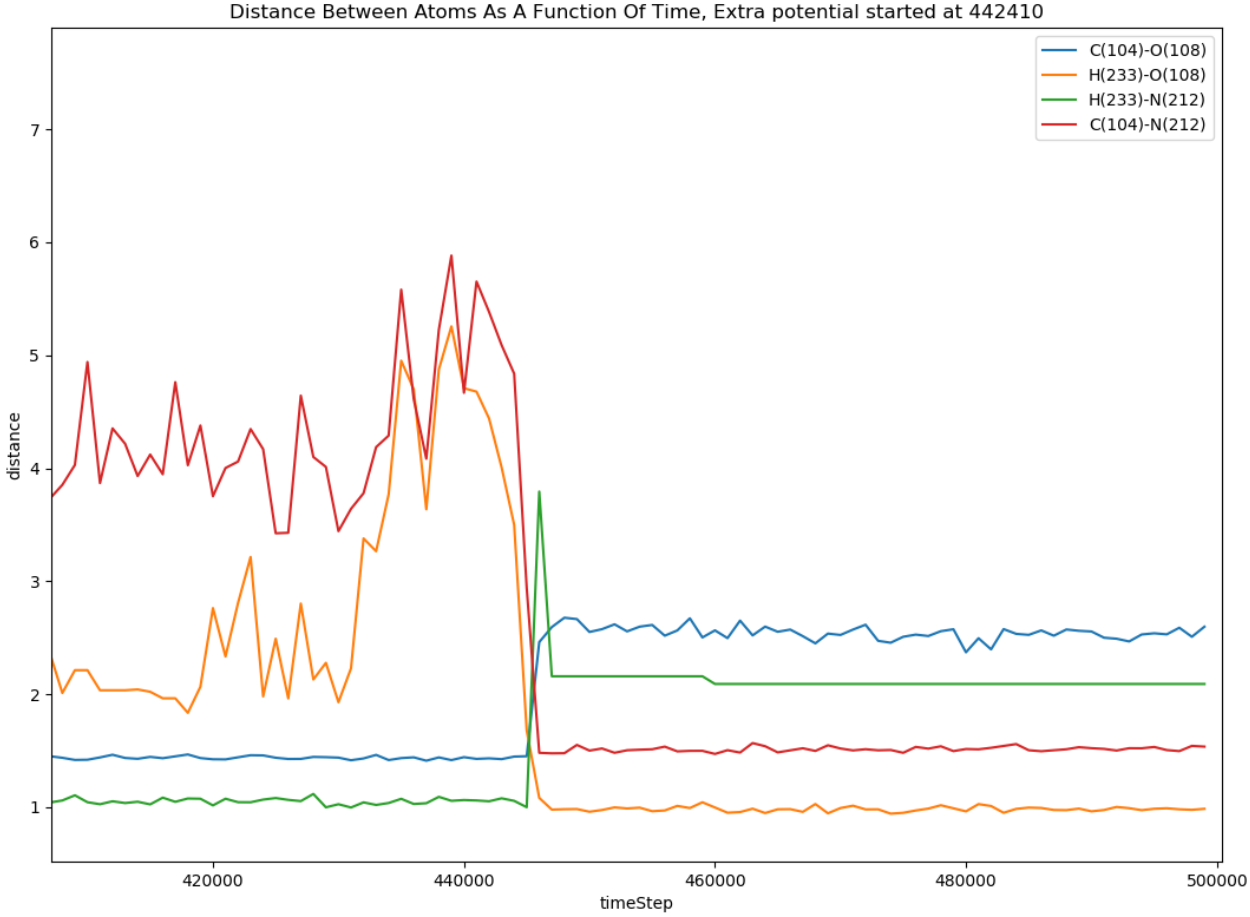

Distance Between Atoms As A Function Of Time, Extra potential started at 191410
C(150)-O(152)
H(232)-O(152)
H(232)-N(211)
C(150)-N(211)
distance
timeStep
10
8
6
4
2
0
100000
200000
300000
400000
500000


Distance Between Atoms As A Function Of Time, Extra potential started at 191410
C(150)-O(152)
H(232)-O(152)
H(232)-N(211)
C(150)-N(211)
distance
timeStep
10
8
6
4
2
180000
190000
200000
210000
220000
230000
240000


Distance Between Atoms As A Function Of Time, Extra potential started at 294410
C(18)-O(22)
H(231)-O(22)
H(231)-N(211)
C(18)-N(211)
distance
timeStep
10
8
6
4
2
0
100000
200000
300000
400000
500000


Distance Between Atoms As A Function Of Time, Extra potential started at 294410
C(18)-O(22)
H(231)-O(22)
H(231)-N(211)
C(18)-N(211)
distance
timeStep
10
8
6
4
2
290000
300000
310000
320000
330000
340000

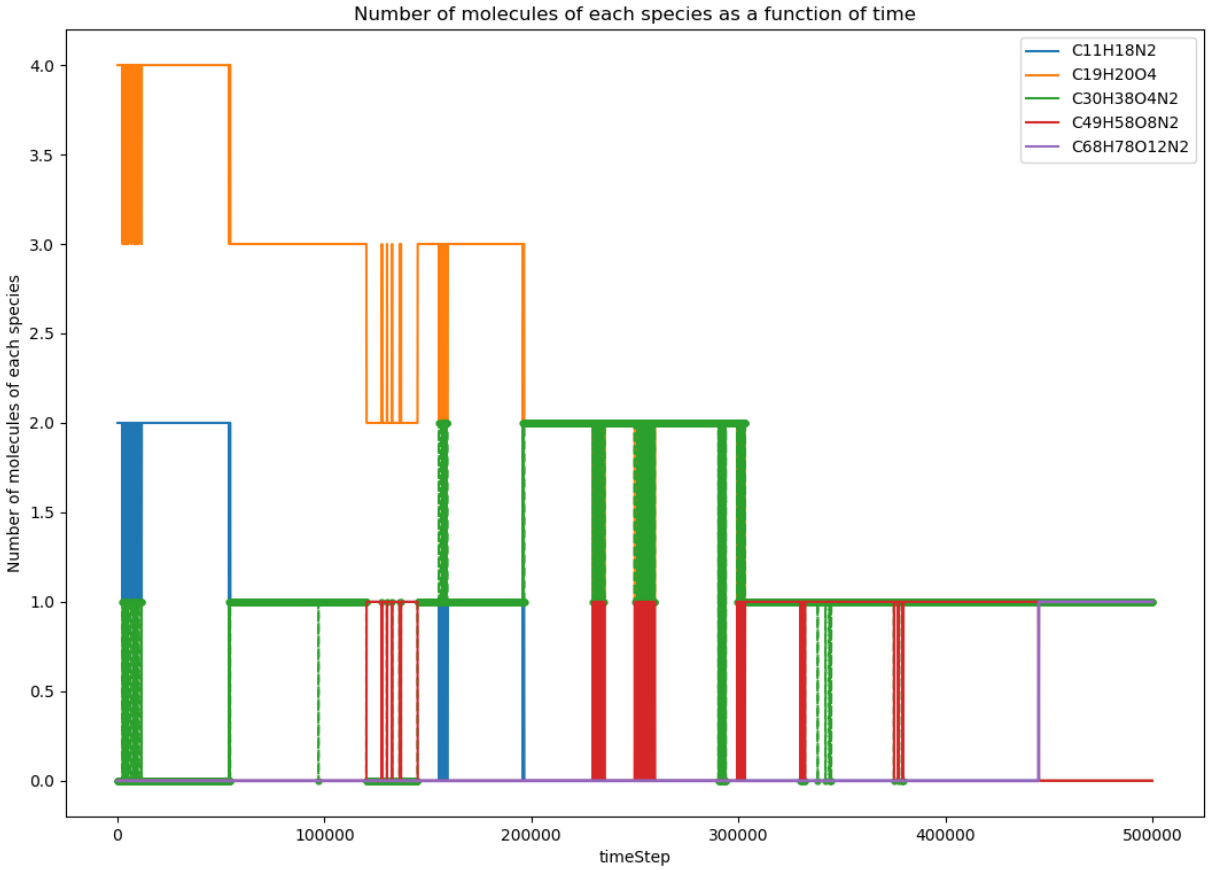
Distance Between Atoms As A Function Of Time, Extra potential started at 442410
C(104)-O(108)
H(233)-O(108)
H(233)-N(212)
C(104)-N(212)
distance
timeStep
10
8
6
4
2
0
100000
200000
300000
400000
500000


Distance Between Atoms As A Function Of Time, Extra potential started at 442410
C(104)-O(108)
H(233)-O(108)
H(233)-N(212)
C(104)-N(212)
distance
timeStep
7
6
5
4
3
2
1
420000
440000
460000
480000
500000

Species.out:

אציג רק צעדי זמן בהם התרחשו שינויים יציבים

```
# Timestep    No_Moles    No_Specs    C19H20O4        C11H18N2
100        6        2        4        2
# Timestep    No_Moles    No_Specs    C19H20O4        C30H38O4N2    C11H18N2
54600        5        3        3        1        1
# Timestep    No_Moles    No_Specs    C49H58O8N2      C19H20O4      C11H18N2
120400       4        3        1        2        1
# Timestep    No_Moles    No_Specs    C19H20O4        C30H38O4N2    C11H18N2
145700       5        3        3        1        1
# Timestep    No_Moles    No_Specs    C19H20O4        C30H38O4N2
196700       4        2        2        2
# Timestep    No_Moles    No_Specs    C49H58O8N2      C30H38O4N2    C19H20O4
299500       3        3        1        1        1
# Timestep    No_Moles    No_Specs    C68H78O12N2     C30H38O4N2
445200       2        2        1        1
# Timestep    No_Moles    No_Specs    C68H78O12N2     C30H38O4N2
500000       2        2        1        1
```



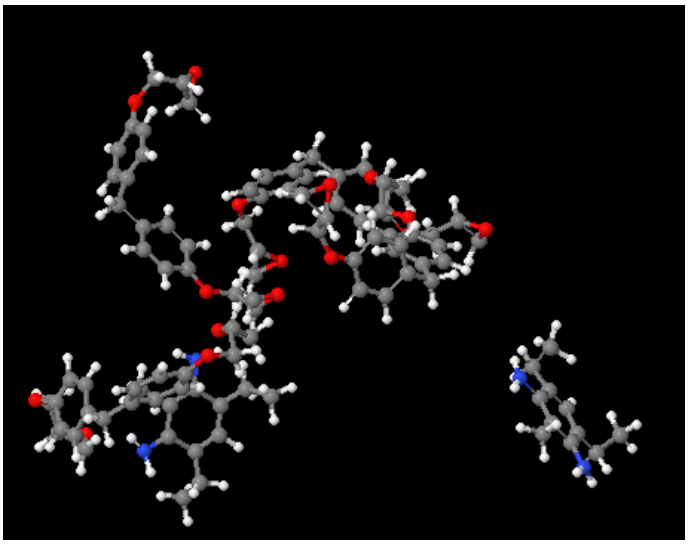
C68H78O12N2 – נוצר כתוצאה מצילוב בין שלוש מולקולות C19H20O4 ומולקולה אחת של C11H18N2

C30H38O4N2– נוצר כתוצאה מצילוב בין מולקולה אחת של C19H20O4 ומולקולה אחת של C11H18N2

C49H58O8N2– נוצר כתוצאה מצילוב בין שתי מולקולות של C19H20O4 ומולקולה אחת של C11H18N2

ציור באמצעות MOLVIEWER

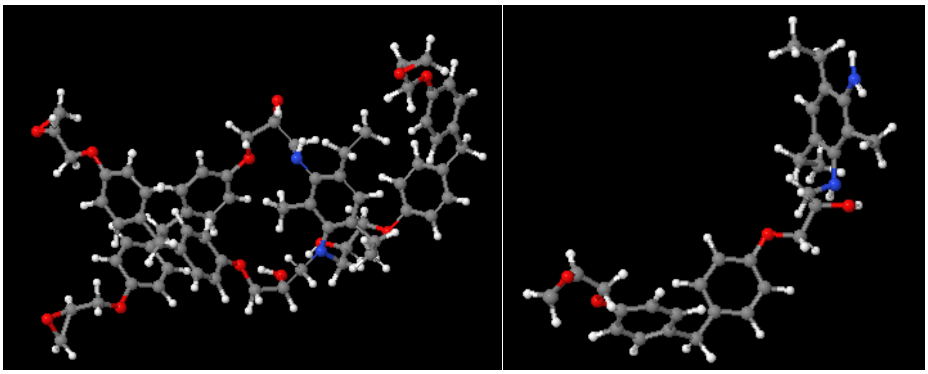
צעד זמן ראשון



צעד זמן אחרון-

כדי להציג תמונה ברורה ציירתי כל אחת מהמולקולות שנוצרו בנפרד

C68H78O12N2 C30H38O4N2

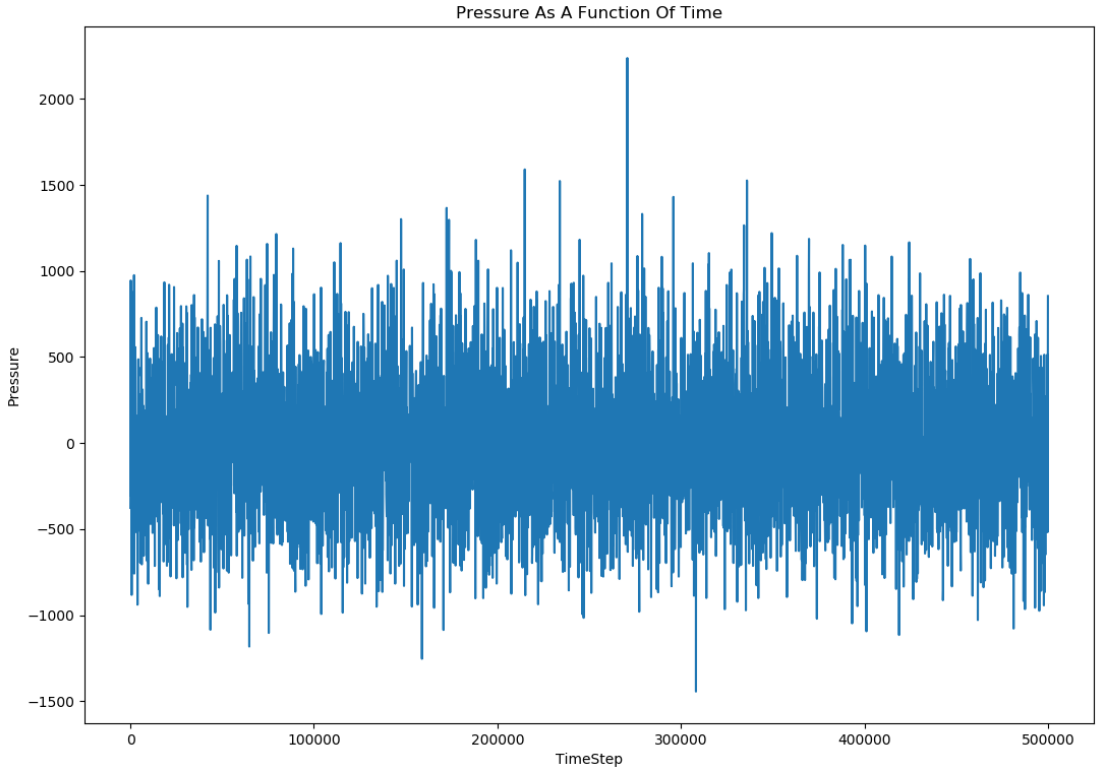


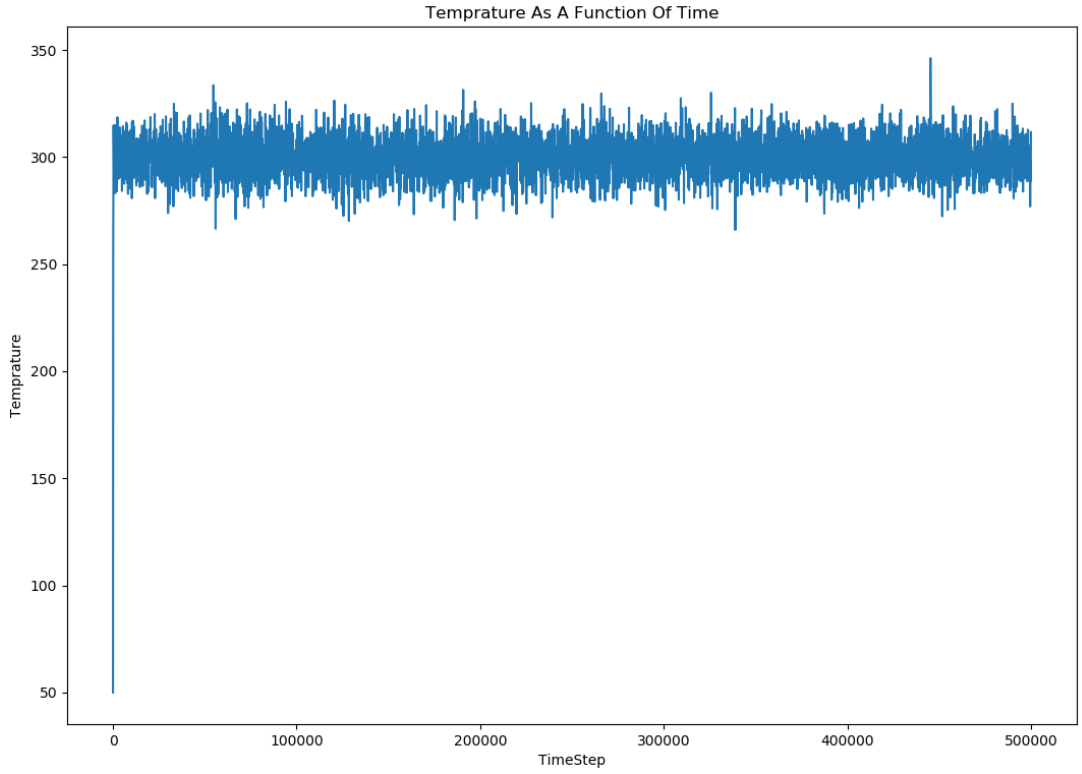
חישוב אחוז צילוב

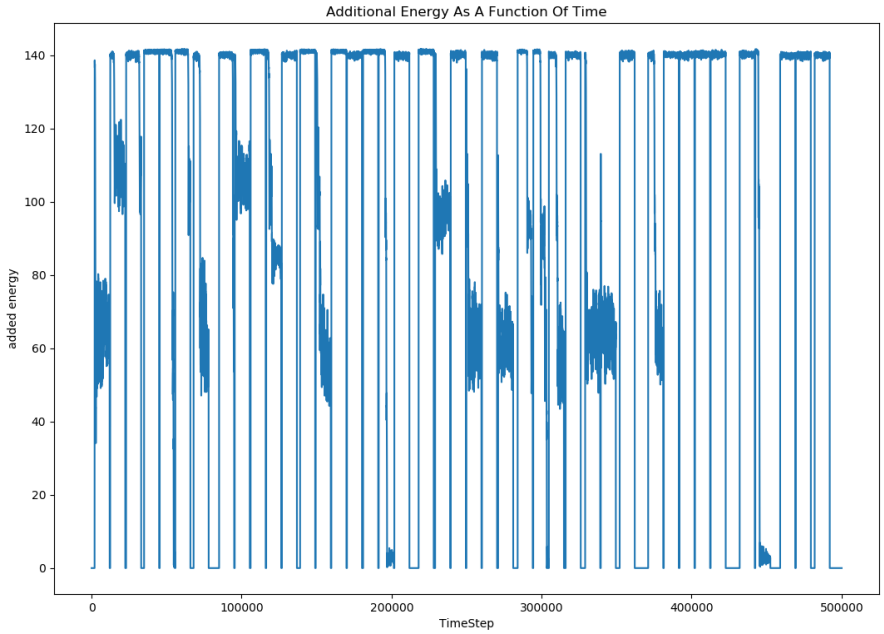
num of N-C bond at timestep 500,000: 8
num of N-C bond in DETDA: 4
num of N-C created bonds: 4
num of DETDA molecules: 2

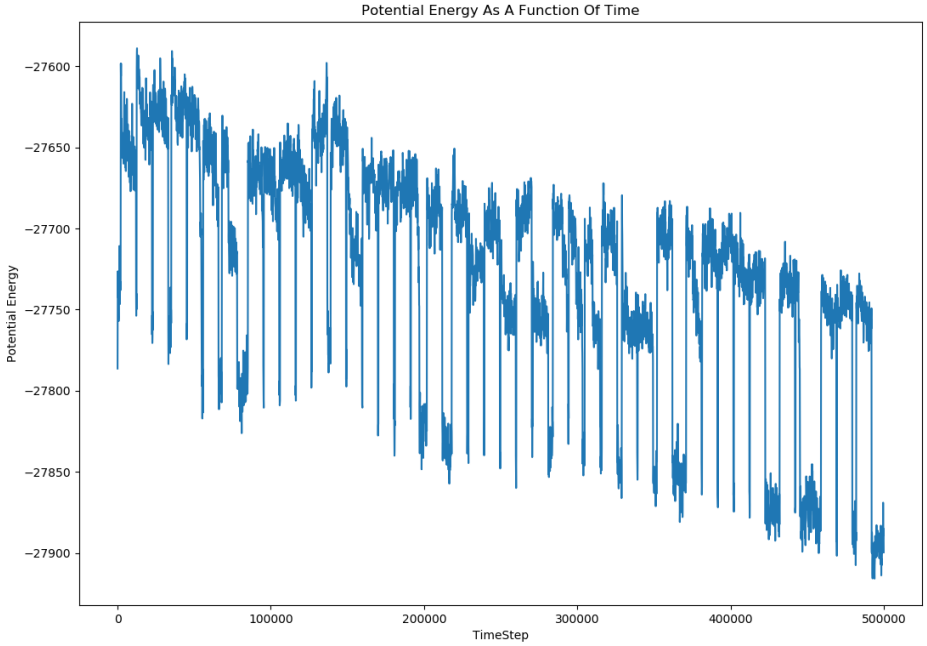
RESULT-cross linking percent: 0.5

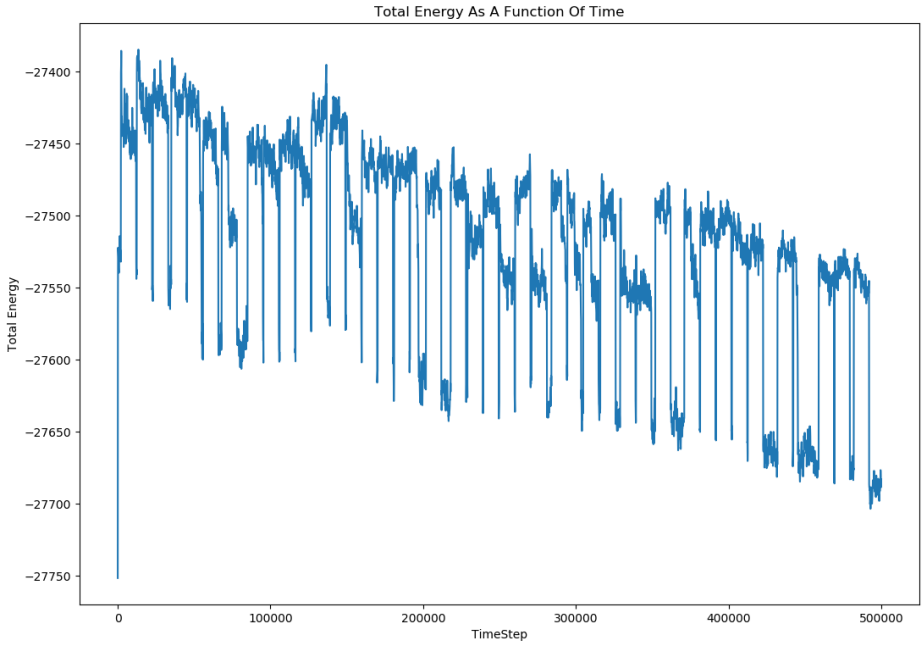
גרפים של לחץ, טמפרטורה, אנרגיה שהפוטנציאל מוסיף, אנרגיה פוטנציאלית, סך האנרגיה כתלות בזמן






Additional Energy As A Function Of Time
added energy
TimeStep
0
20
40
60
80
100
120
140
0
100000
200000
300000
400000
500000


Potential Energy As A Function Of Time
Potential Energy
TimeStep
−27600
−27650
−27700
−27750
−27800
−27850
−27900
0
100000
200000
300000
400000
500000


Total Energy As A Function Of Time
Total Energy
TimeStep
−27400
−27450
−27500
−27550
−27600
−27650
−27700
−27750
0
100000
200000
300000
400000
500000