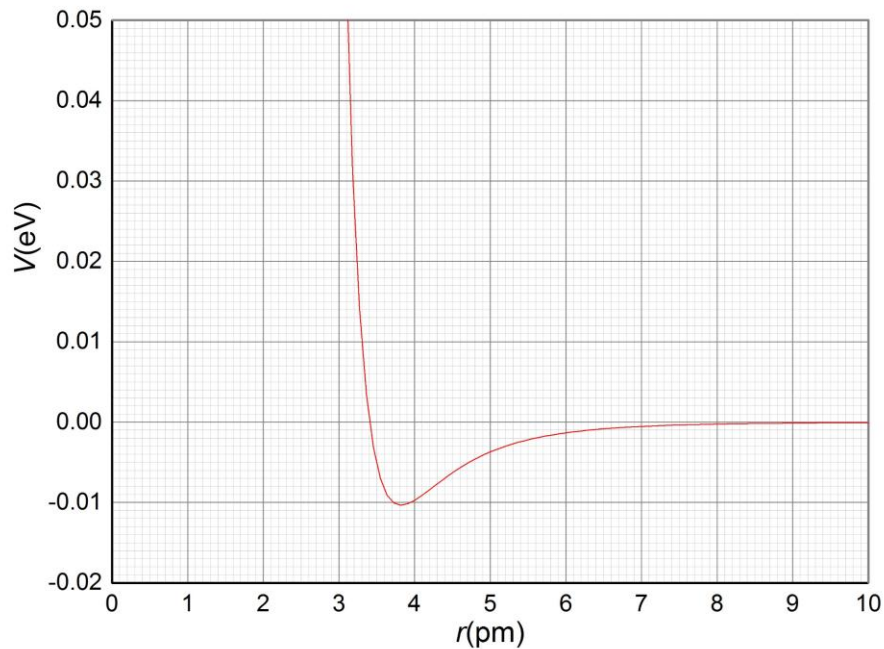


1.src 文件夹下 make serial 或 make mpi.

2.略

3.如下图



4.输入文件:

#Ar 3d Lennard-Jones nvt ensemble

units metal

atom_style atomic

boundary p p p

lattice fcc 5.41229

#不同温度可能需要重新优化

region box1 block 0 8 0 8 0 8 units lattice

create_box 1 box1

create_atoms 1 box

mass 1 39.948

pair_style lj/cut 8.7

pair_coeff * * 0.0103235761 3.405 8.5125

neighbor 2.0 bin

neigh_modify every 2 delay 10 check yes #可能需要优化

timestep 0.001 #可能需要优化

velocity all create 40 1234567 mom yes rot yes dist gaussian

```

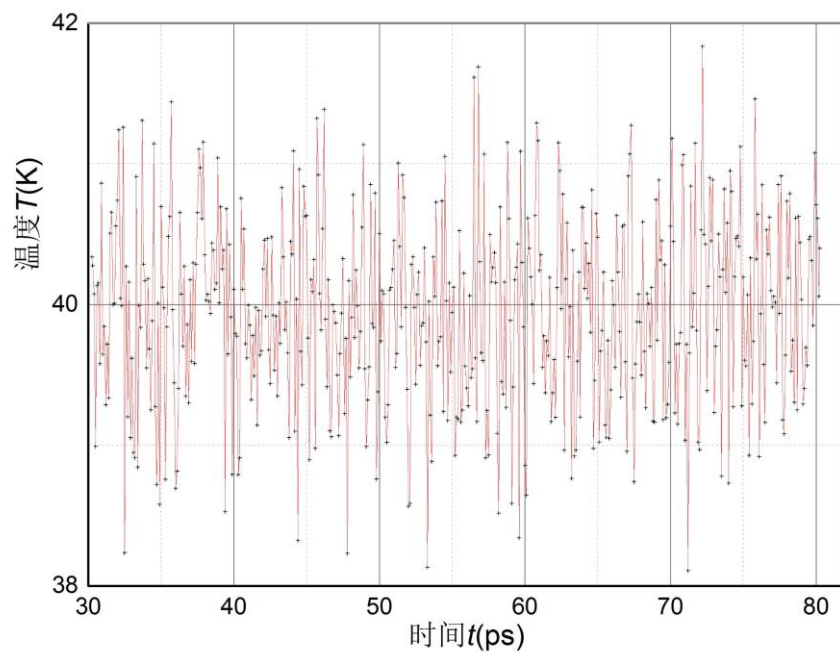
fix 1 all box/relax iso 1.01325 nreset 1
min_style cg
minimize 3e-14 3e-14 1000000 1000000 #第一次优化
minimize 1e-14 1e-14 1000000 1000000 #第二次优化
minimize 3e-15 3e-15 1000000 1000000 #第三次优化,连续多次minimize,防止出现非最优
结果
#优化完成,最低势能结构
unfix 1
fix          p1 all npt temp 40.0 40.0 0.001 iso 1.01325 1.01325 0.1
thermo_style      custom step temp etotal press lx ly lz
thermo      1000
run          30000
unfix          p1
#由大气压决定体积

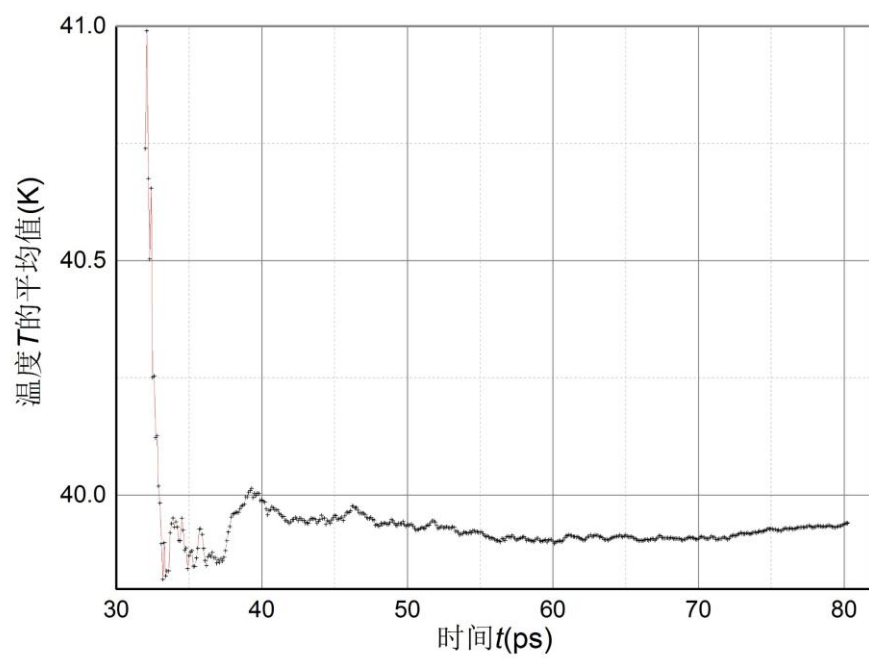
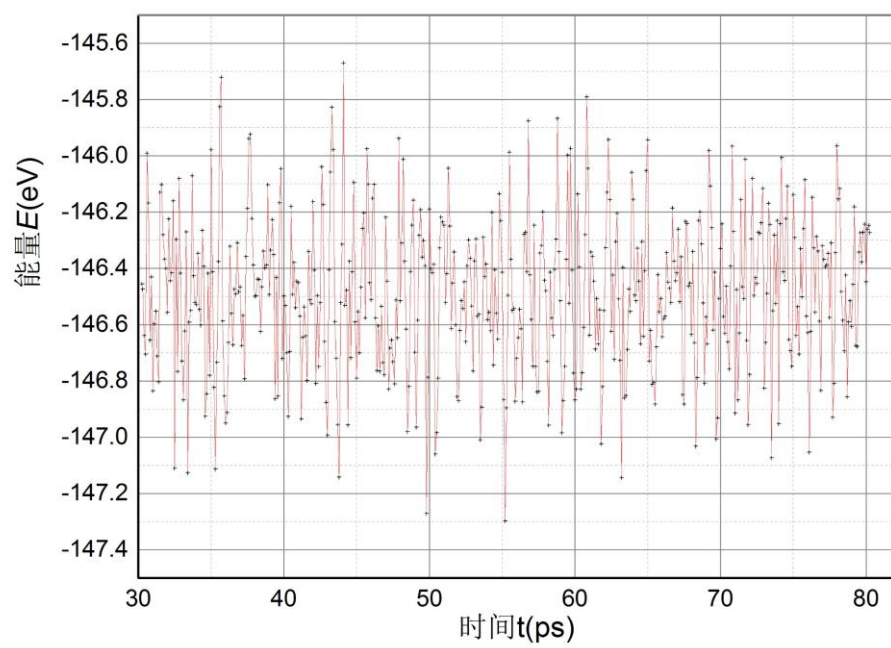
fix      nvt1 all nvt temp 40.0 40.0 0.001      #Tdamp可能需要优化
fix      1 all ave/time 2 50 100 c_thermo_temp c_thermo_pe file ave.Ar

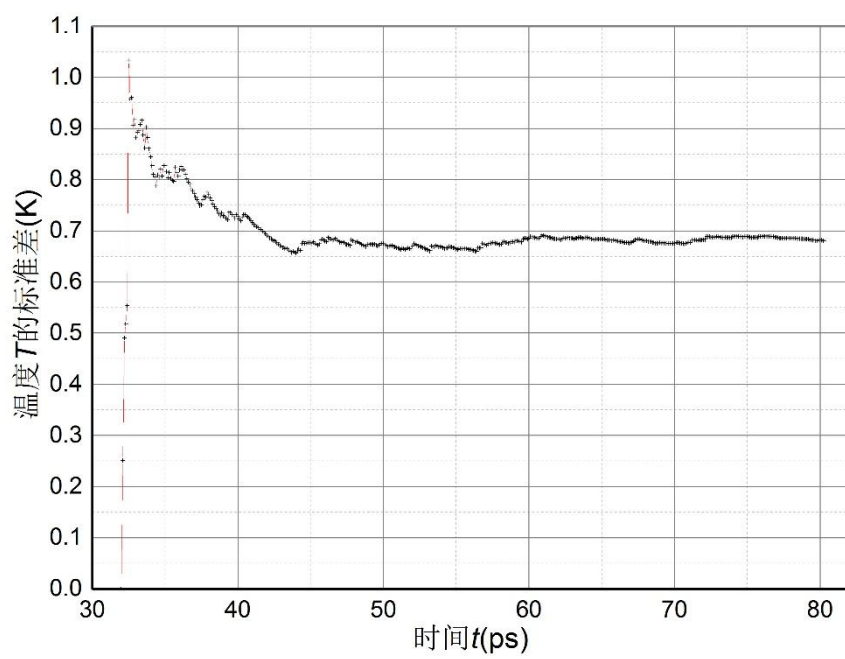
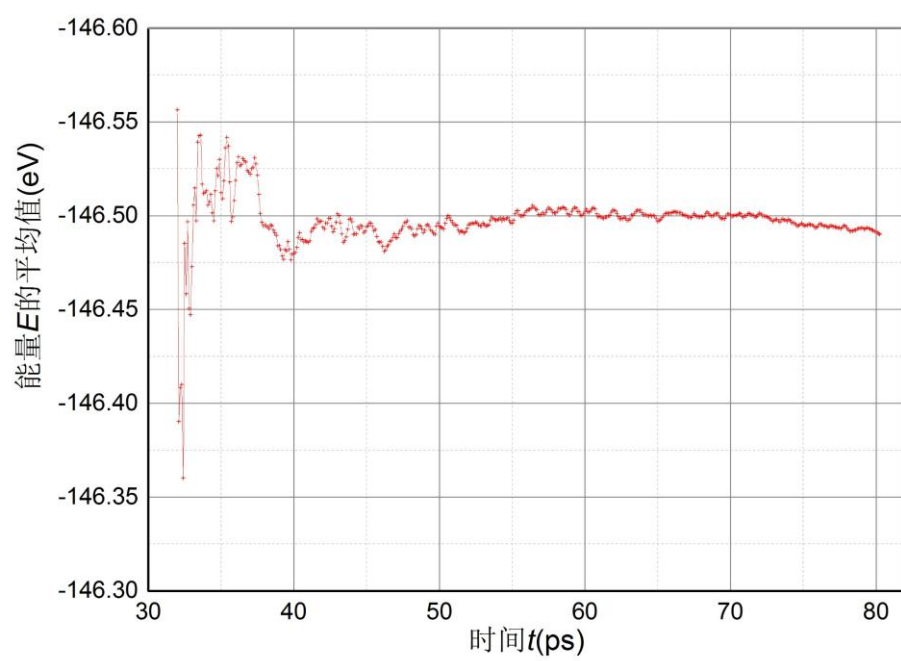
#dump      dump_xyz all custom 100 md.custom id xs ys zs vx vy vz
#dump_modify      dump_xyz element Ar
#dump      dump_atom all atom 100 md.atom
thermo      100

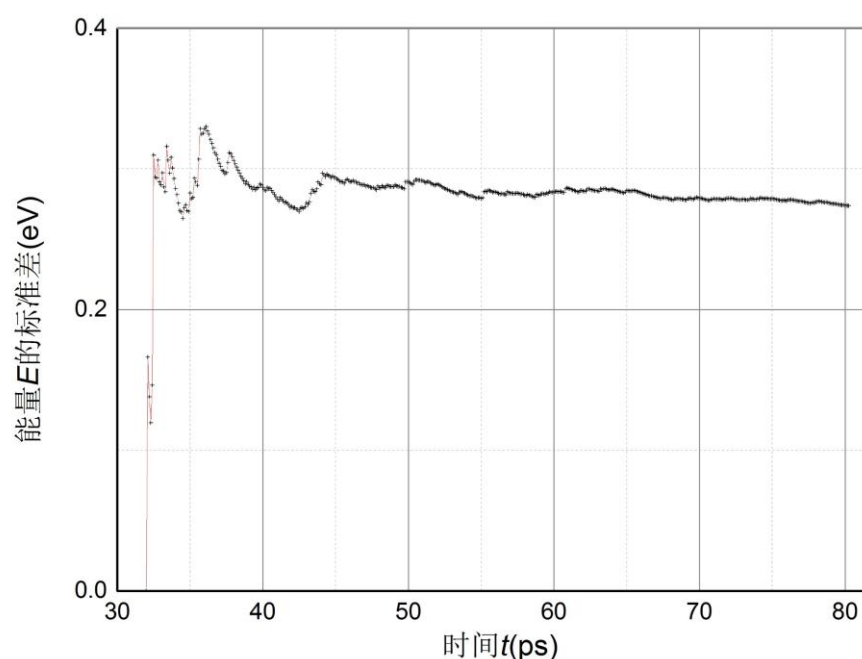
run 50000
作图结果:

```









注：考虑到一开始温度变化相对剧烈，在计算平均值和标准差时从 32ps 之后开始统计。

温度：(39.94 ± 0.68)K

能量：(-146.49 ± 0.27)eV

5.麦克斯韦速度分布

分合速度和 x 方向分速度两种讨论。

选定 1 标准大气压。每个温度下被用于作图的粒子速度数据共计 1.0592e+08 个。

拟合曲线直接用该温度下麦克斯韦速率分布理论曲线。

输入文件：

```
#Ar 3d Lennard-Jones nvt ensemble
```

```
units metal
```

```
atom_style atomic
```

```
boundary p p p
```

```
lattice fcc 5.41229
```

#不同温度可能需要重新优化

```
region box1 block 0 20 0 20 0 20 units lattice
```

```
create_box 1 box1
```

```
create_atoms 1 box
```

```
mass 1 39.948
```

```
variable T equal 200.0
```

```
pair_style lj/cut 8.7
```

```
pair_coeff * * 0.0103235761 3.405 8.5125
```

```
neighbor 2.0 bin
```

```
neigh_modify every 2 delay 10 check yes #可能需要优化
```

```

timestep 0.001      #可能需要优化

velocity all create $T 1234567 mom yes rot yes dist gaussian
fix 1 all box/relax iso 1.01325 nreset 1
min_style cg
minimize 3e-14 3e-14 1000000 1000000  #第一次优化
minimize 1e-14 1e-14 1000000 1000000  #第二次优化
minimize 3e-15 3e-15 1000000 1000000  #第三次优化, 连续多次minimize, 防止出现非最优
结果
#优化完成, 最低势能结构
unfix 1
fix          p1 all npt temp $T $T 0.001 iso 1.01325 1.01325 0.1
thermo_style      custom step temp etotal press lx ly lz
thermo      200
run          30000
unfix          p1
#由大气压决定体积

fix          nvt1 all nvt temp $T $T 0.001          #Tdamp可能需要优化
run 3000
variable velo atom sqrt(vx*vx+vy*vy+vz*vz)
fix          maxwell1 all ave/histo 10 3500 36000 0 8 200 v_velo mode vector file
histo_v.txt
fix          maxwell2 all ave/histo 10 3500 36000 -6 6 300 vx mode vector file
histo_vx.txt

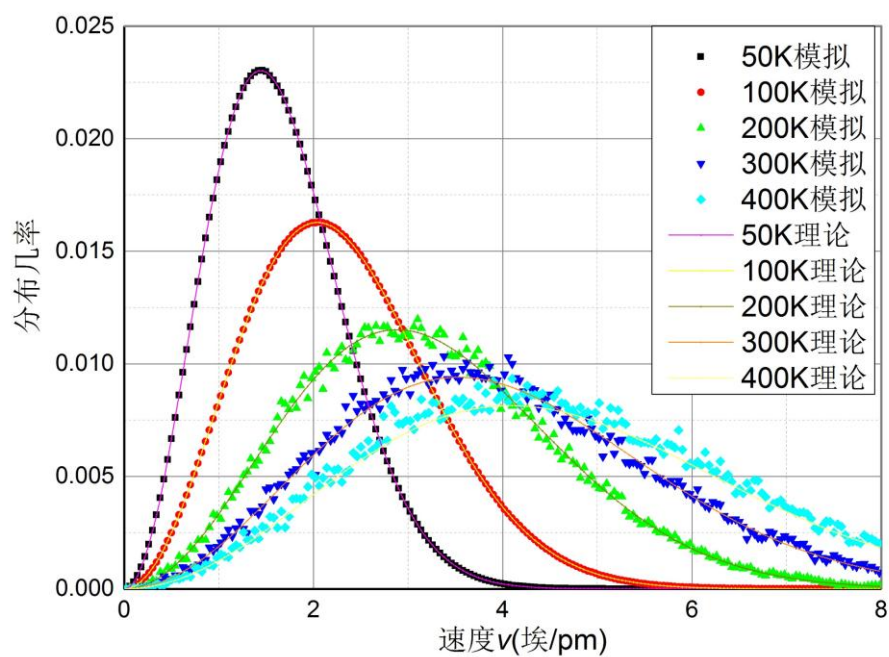
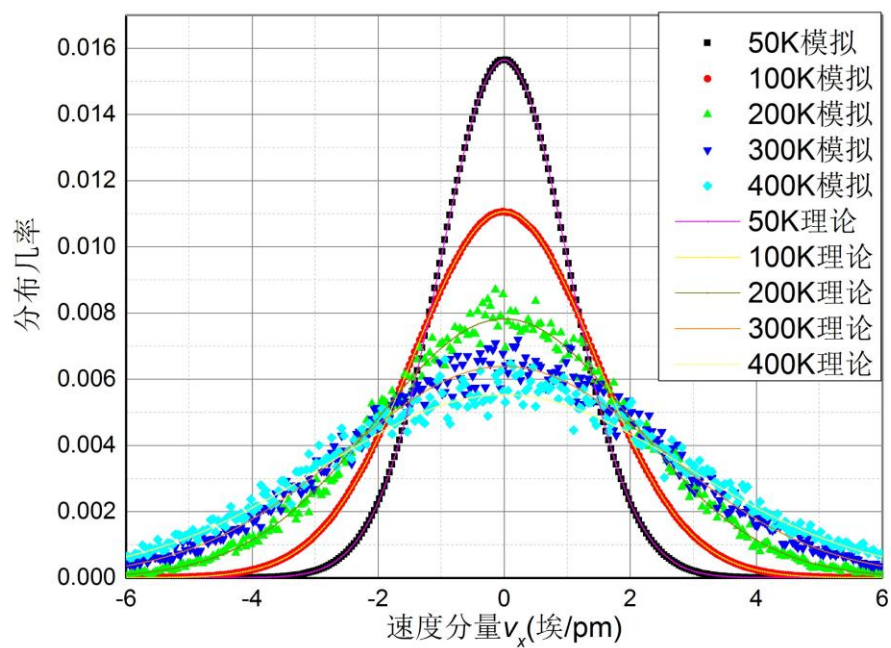
#dump      dump_xyz all custom 100 md.custom id xs ys zs vx vy vz
#dump_modify      dump_xyz element Ar
#dump      dump_atom all atom 100 md.atom
thermo      100

run 40000

```

其中 Variable T 的取值为 50.0, 100.0, 200.0, 300.0, 400.0。共运行 5 次。

图象见下页。



6. 标准差随粒子数的变化

选定 273K, 1 标准大气压。

输入文件:

```
#Ar 3d Lennard-Jones nvt ensemble
```

```
units      metal
```

```
atom_style atomic
```

```

boundary      p p p
lattice fcc 5.41229                                     #不同温度可能需要重新优化
variable N equal 14
variable T equal 273

region box1 block 0 $N 0 $N 0 $N units lattice
create_box      1 box1
create_atoms     1 box
mass            1 39.948

pair_style       lj/cut 8.7
pair_coeff       * * 0.0103235761 3.405 8.5125

neighbor 2.0 bin
neigh_modify     every 2 delay 10 check yes   #可能需要优化

timestep 0.001   #可能需要优化

velocity all create $T 1234567 mom yes rot yes dist gaussian
fix 1 all box/relax iso 1.01325 nreset 1
min_style cg
minimize 3e-14 3e-14 1000000 1000000   #第一次优化
minimize 1e-14 1e-14 1000000 1000000   #第二次优化
minimize 3e-15 3e-15 1000000 1000000   #第三次优化, 连续多次minimize, 防止出现非最优
结果
#优化完成, 最低势能结构
unfix 1
fix              p1 all npt temp $T $T 0.001 iso 1.01325 1.01325 0.1
thermo_style     custom step temp etotal press lx ly lz
thermo          200
run              10000
unfix            p1
#由大气压决定体积(run已适当减小, 以提高运行速度)

fix             nvt1 all nvt temp $T $T 0.001          #Tdamp可能需要优化
run             10000
unfix nvt1
#刚开始运行时, 不计入标准差
fix             nvt2 all nvt temp $T $T 0.001          #Tdamp可能需要优化

#fix           1 all ave/time 2 50 100 c_thermo_temp c_thermo_pe file ave.Ar

#dump           dump_xyz all custom 100 md.custom id xs ys zs vx vy vz

```

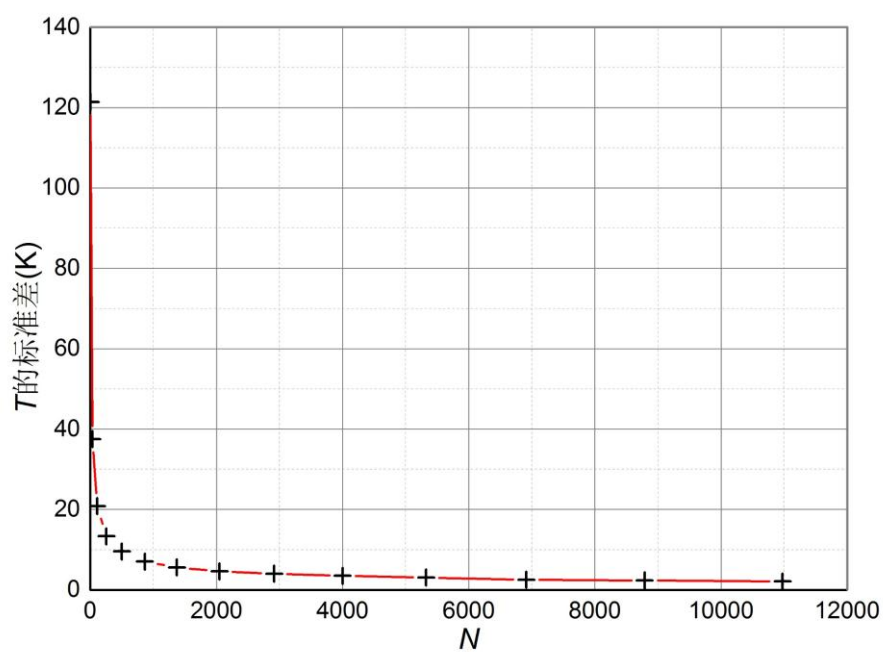


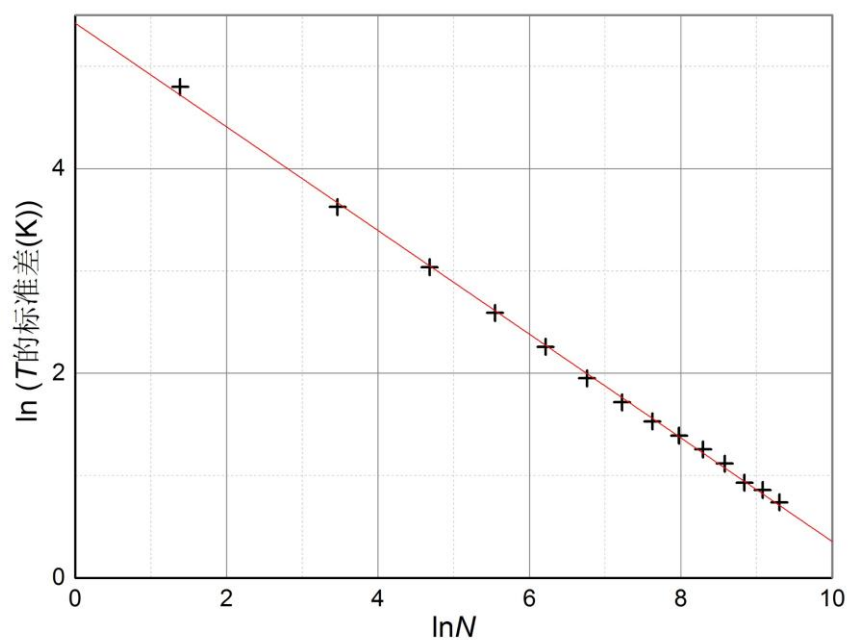
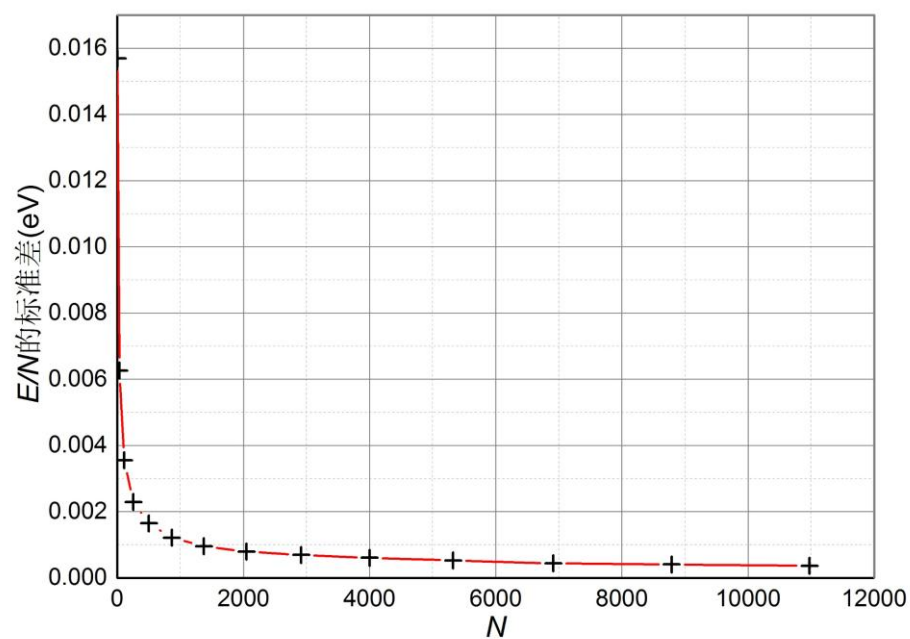
```
#dump_modify      dump_xyz element Ar
#dump      dump_atom all atom 100 md.atom
thermo      50
```

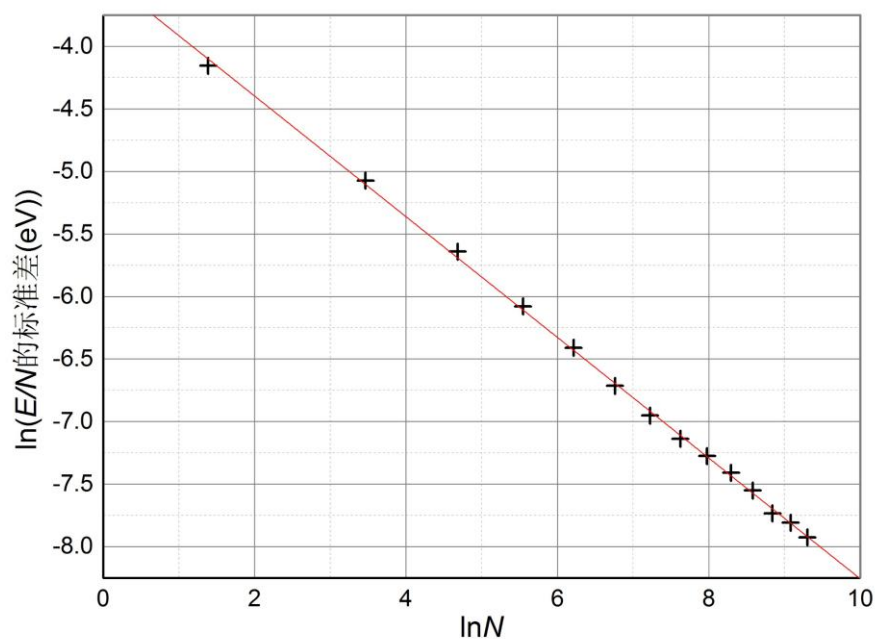
```
run 20000
```

其中变量 N 为整数，从 1 取到 14。粒子数为 $4N^2$ 。

所得图象：







取 \ln 值后作图，线性较好。温度和平均能量所对应的两条直线拟合数据如下：

(1) 温度： $y = (-0.507 \pm 0.005)x + (5.42 \pm 0.03)$. R Value=0.99946.

(2) 平均能量： $y = (-0.483 \pm 0.004)x + (-3.43 \pm 0.03)$. R Value=0.99962.

二者斜率均约为-0.5，说明对 N 平均的统计值的标准差近似反比于 \sqrt{N} .