

- Трећа рачунарска вежба из рачунарских метода у Статистичкој термодинамици -

### III. Молекулска динамика аргона у микроканонском ансамблу

Молекулска динамика је нумеричка метода за одређивање термодинамичких величина и транспортних особина система. У случају класичног система честица, решавају се Њутнове једначине кретања и за разлику од Монте Карло методе која испитује конфигурациони простор у насумично одабраним тачкама молекулска динамика даје увид у временску еволуцију система од задатих почетних услова. Молекулска динамика је специјална дисциплина молекулског моделирања и рачунарске симулације, базирана на статистичкој механици. Ергодска хипотеза омогућава коришћење методе молекулске динамике с обзиром да по овој хипотези не постоји разлика између усредњености по ансамблу и усредњености по времену. Са друге стране, дужа симулација молекулском динамиком је математички лоше условљена. Начињене грешке у нумеричкој интеграцији могу бити минимизиране одговарајућим одабиром алгоритама и параметара, али не могу бити потпуно уклоњене. Постојеће потенцијалне функције су у многим случајевима недовољно тачне за приказ динамике молекулских система. Молекулска динамика омогућава „реалистичнији“ увид у конфигурациони простор од Монте Карло методе. Циљ ове вежбе је упознавање студената са молекулском динамиком система честица (атома аргона) који интереагују Ленард-Џонсоновим потенцијалом и могућностима које ова метода пружа.

#### Упутство:

У овој вежби се користи програм **MDargon\_NVE.m** који симулира систем честица аргона применом молекулске динамике при том користећи ограничени и померен Ленард-Џонсонов потенцијал као модел интеракције између атома аргона. Као интеграциони алгоритам за Њутнове једначине кретања се користи Верлеов алгоритам као и периодични гранични услови.

Извршењем програма добијају се следећи параметри: средња кинетичка, потенцијална и укупна енергија по честици; средња температура и притисак у симулацији; средњи релативни померај укупне енергије; компоненте средњег импулса на крају симулације.

Извршењем програма добијају се следеће графичке зависности: зависност средње кинетичке, потенцијалне и укупне енергије по честици у функцији редног броја симулационог корака; радијалну дистрибуциону функцију расподеле; потенцијал средње силе; расподелу  $x$ -компоненте брзине атома.

### *Задаци вежбе:*

- Упознати се са кодом и објаснити које променљиве је неопходно дефинисати на самом почетку како би програм могао успешно да се покрене.
- Испитати на који начин временски корак ( $dt$ ) за нумеричко решавање Њутнових једначина кретања помоћу Верлеовог алгоритма утиче на симулацију. Покренути програм користећи следеће вредности временског корака: 0,02; 0,01; 0,005 и 0,0005. За остале параметре симулације користити:

```
NParticles = 50
ro = 0,7
T = 1,0
Nsteps = 8000
Nsampel = 6000
```

Посматрајући зависност средње кинетичке, потенцијалне и укупне енергије по честици у функцији редног броја симулационог корака закључити да ли је укупна енергија очувана за све вредности временског корака.

- Покренути програм за различите честичне густине: 0,008; 0,8 и 2,0. За остале параметре симулације користити:

```
NParticles = 200
T = 1,0
dt = 0,005
Nsteps = 20000
Nsampel = 10000
```

Продискутовати радијалне функције расподеле и потенцијале средње силе из ових симулација. Шта се може рећи о уређености система из радијалних функција расподеле? При којим условима је потенцијал средње силе јако сличан Ленард-Џонсоновом потенцијалу?

- Откоментарисати део у коду који се односи на прављење анимације:

```
%%% Deo za pravljenje filma simulacije
```

Након извршења програма сачекати да се анимација молекула у кутији заврши (или је прекинути) па онда поново покренути програм са новим параметрима. Променити назив добијеног .avi фајла (или га обрисати уколико није потребан) пре покретања нове симулације. Покренути програм са параметрима симулације из претходног задатка. Упоредити добијене симулације. Да ли се јасно виде разлике између агрегатних стања при различитим параметрима симулације?

- Коментарисати део у коду који се односи на прављење анимације:

%%% Deo za pravljenje filma simulacije

- Покренути програм са следећим параметрима:

```
NParticles = 100  
ro = 1,2  
T = 0,8 и 2,5  
dt = 0,006  
Nsteps = 10000  
Nsampel = 6000
```

Упоредити две добијене симулације. Упоредити флуктуације средње кинетичке, потенцијалне и укупне енергије по честици као и расподелу  $x$ -компоненте брзине из обе симулације. У чему се оне разликују?

- На који начин се систем доводи у термодинамичку равнотежу?
- На који начин је одабрана почетна конфигурација атома?
- На која два начина се може израчунати притисак и потенцијала енергија система у овом случају?
- Како се постиже да центар масе система мирује?
- Како се може препознати део за уравнотежење са графика зависности средње кинетичке, потенцијалне и укупне енергије по честици у функцији редног броја симулационог корака?
- На који начин се прорачунава укупна кинетичка енергија у оваквом систему?
- Како се дефинише тренутна температура у систему?
- Ако  $x$ -компонента брзине атома аргона одговара Максвеловој расподели да ли ће расподела уи  $z$ -компоненте брзине атома аргона такође одговарати? Објаснити.
- Да ли Верлеов алгоритам очувава константну укупну енергију? Објаснити.
- Зашто Верлеов алгоритам није погодан за дугачке временске кораке у симулацији?
- Како се потенцијал средње силе рачуна? Како се интуитивно може тумачити?

## Упутство за извештај са вежби:

- Извештај се припрема у слободној форми на рачунару.
- Рок за предају срећених вежби је 22.1.2021.
- Срећене вежбе се предају у електронској форми (**.pdf**) на e-mail адресу [branislavm@ffh.bg.ac.rs](mailto:branislavm@ffh.bg.ac.rs).

Извештај треба да садржи:

- Кратак теоријски увод о молекулској динамици и Верлеовом алгоритму за нумеричко интеграње Њутнових једначина кретања и радијалној функцији расподеле.
- Срећене податке (графици, табеле, нумерички подаци ...) са одговорима на питања.

Вежба се оцењује у процентима и заједно са остале две вежбе носи максимално 10 поена.