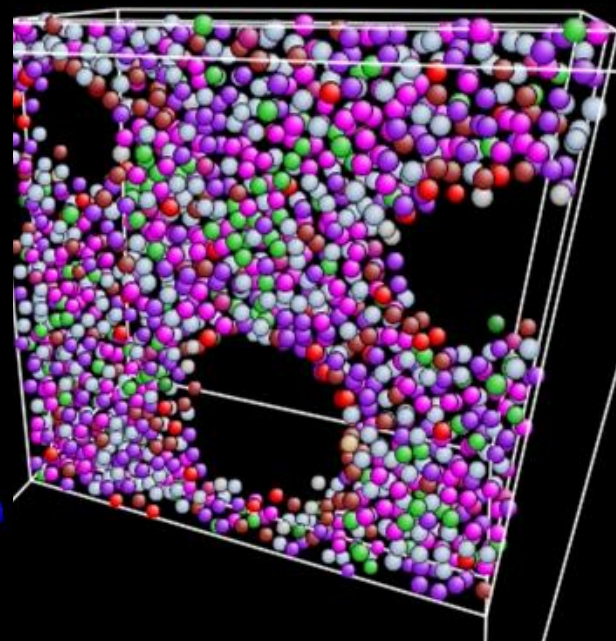
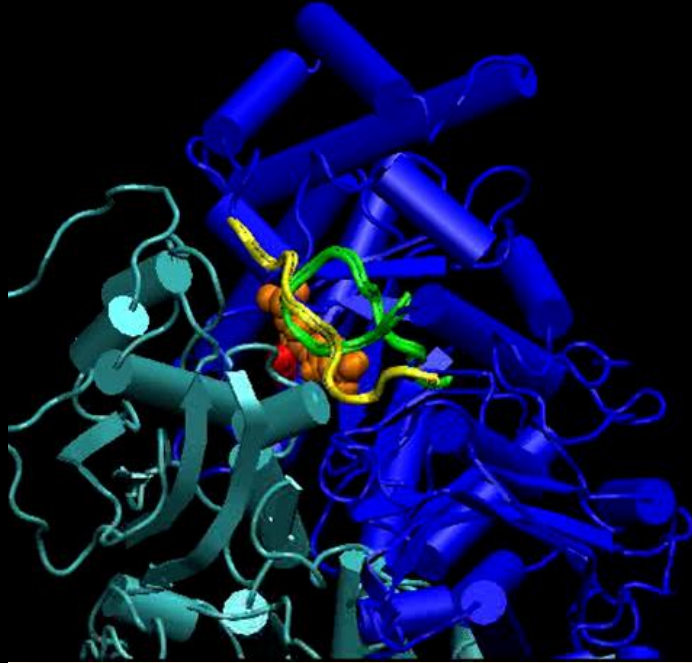
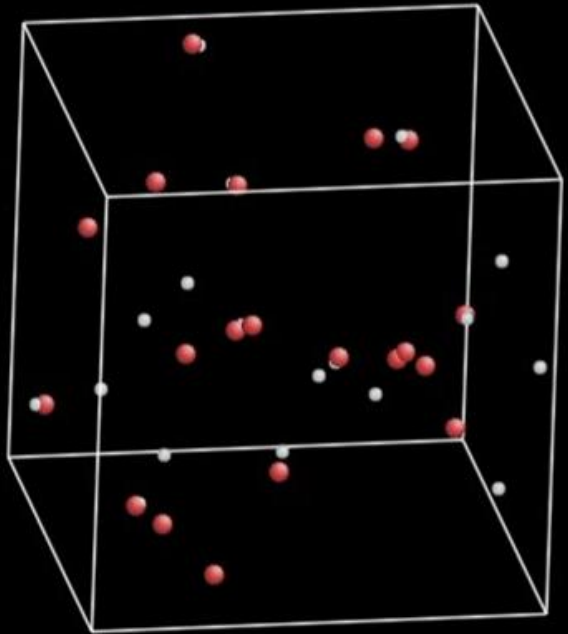


Суперкомпьютерные ТЕХНОЛОГИИ В АТОМИСТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ

Морозов Игорь Владимирович

*Лекция 3. Начальные условия, вывод системы
на равновесие.*



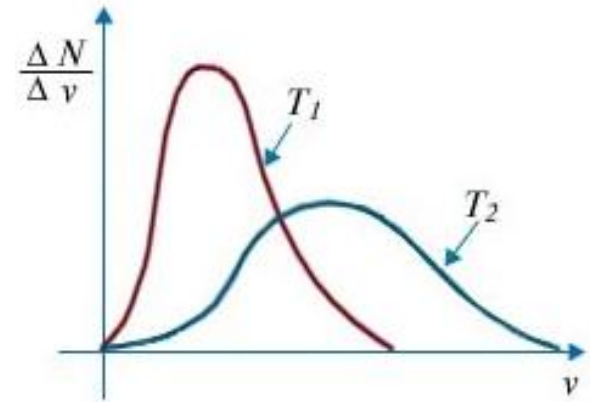
Генерация распределения Максвелла

Если случайные переменные ξ_i распределены равномерно в $[0, 1]$, то распределение величин

$$v_x = \sqrt{-2\sigma^2 \ln \xi_1} \cos(2\pi\xi_2)$$

$$v_y = \sqrt{-2\sigma^2 \ln \xi_1} \sin(2\pi\xi_2)$$

$$v_z = \sqrt{-2\sigma^2 \ln \xi_3} \cos(2\pi\xi_4)$$

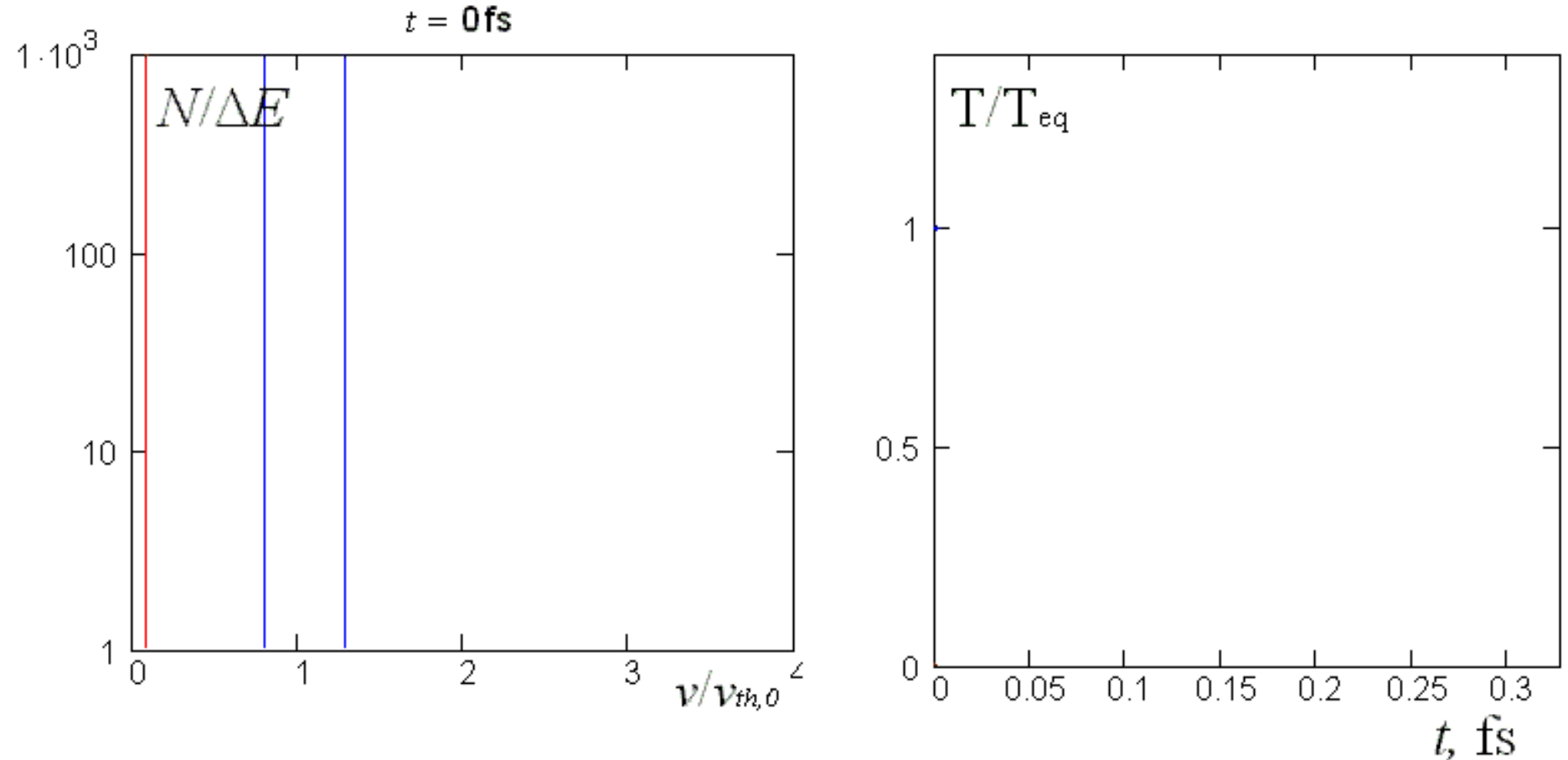


соответствует распределению Максвелла

$$w(v_x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{v_x^2}{2\sigma^2}} \quad w(v) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{v^2}{\sigma^3} e^{-\frac{v^2}{2\sigma^2}}$$

Для заданной температуры: $\sigma^2 = kT / m$

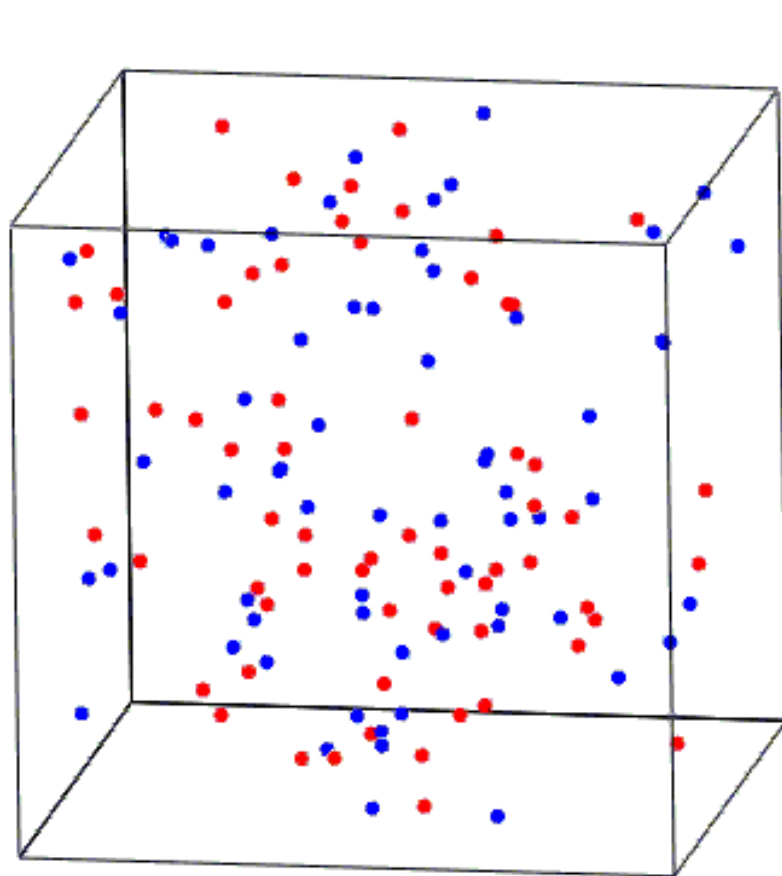
Релаксация функции распределения электронов по скоростям в неидеальной плазме



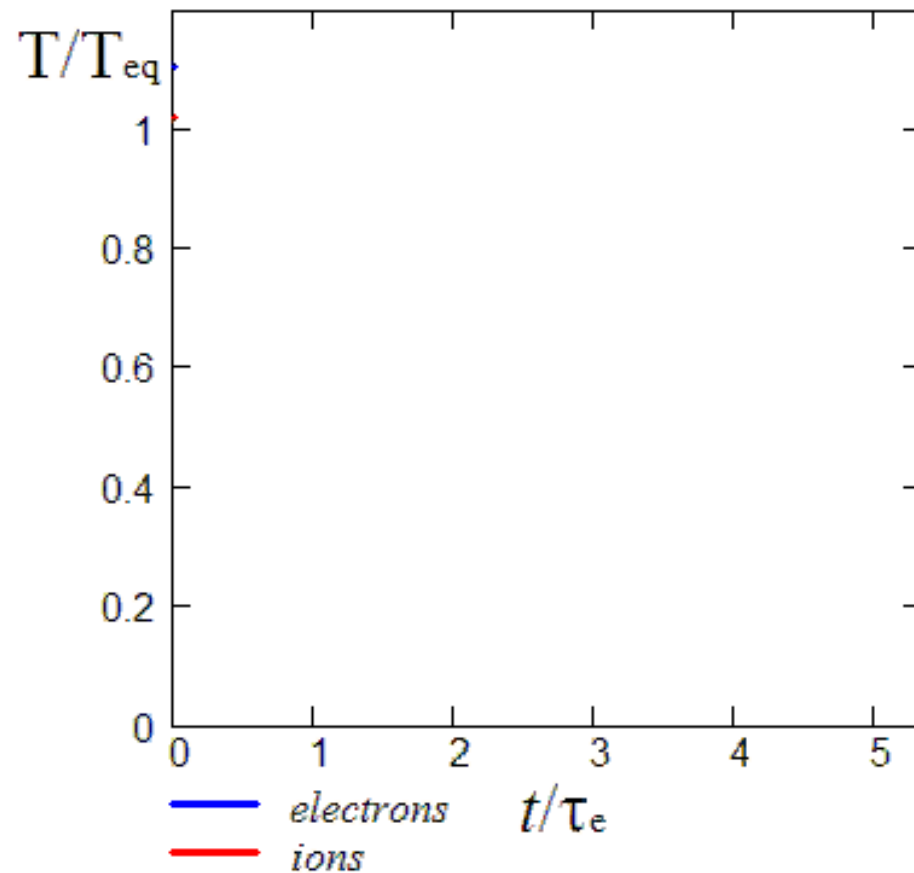
Начальные условия:

Средняя энергия электронов $T_e(0) = 14 \text{ eV}$ ($1.6 \cdot 10^5 \text{ K}$), **ионы неподвижны**

Релаксация электронов и ионов из состояния «холодной» плазмы

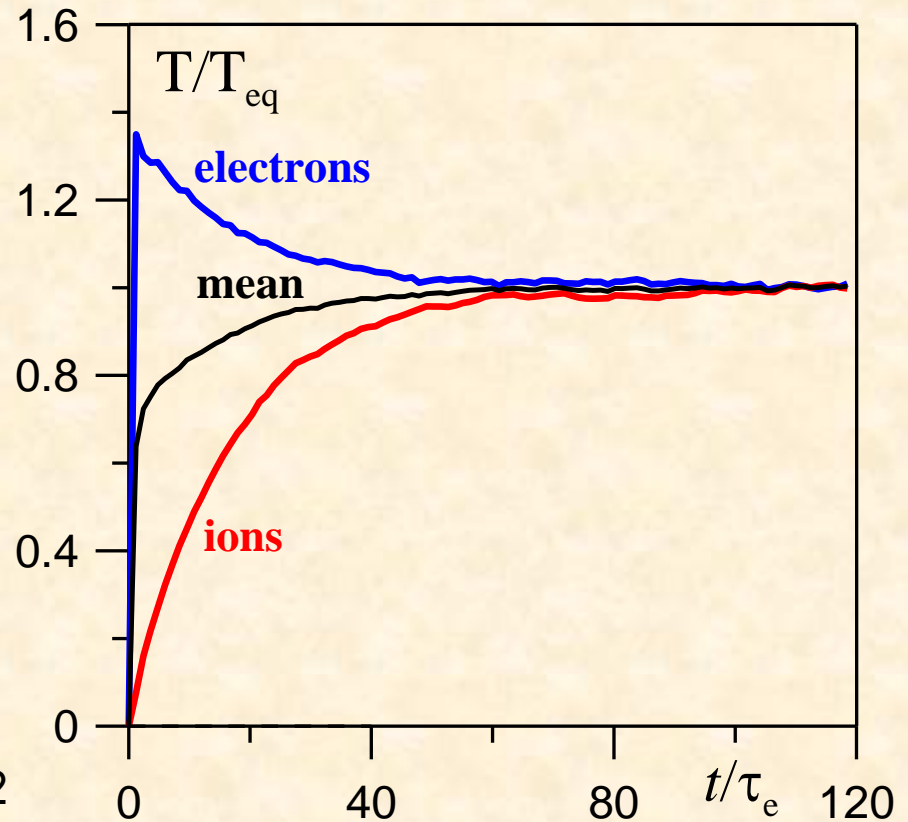
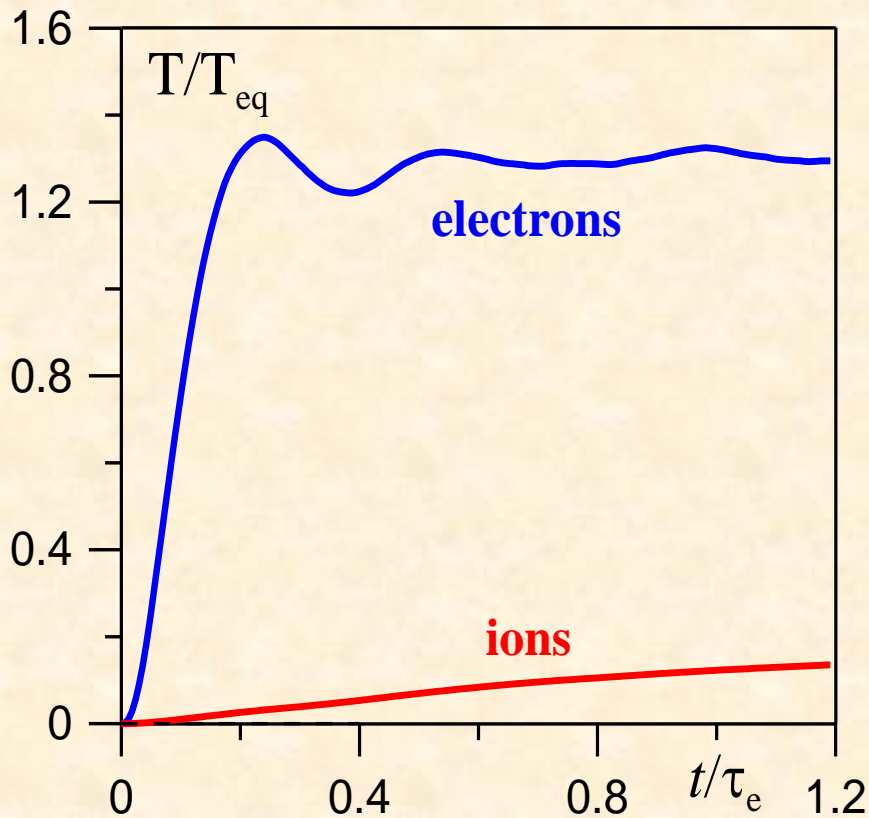


$t = 0$



$$M/m = 10; \quad \Gamma_e = 1.28; \quad Z = 1; \quad N = 128$$

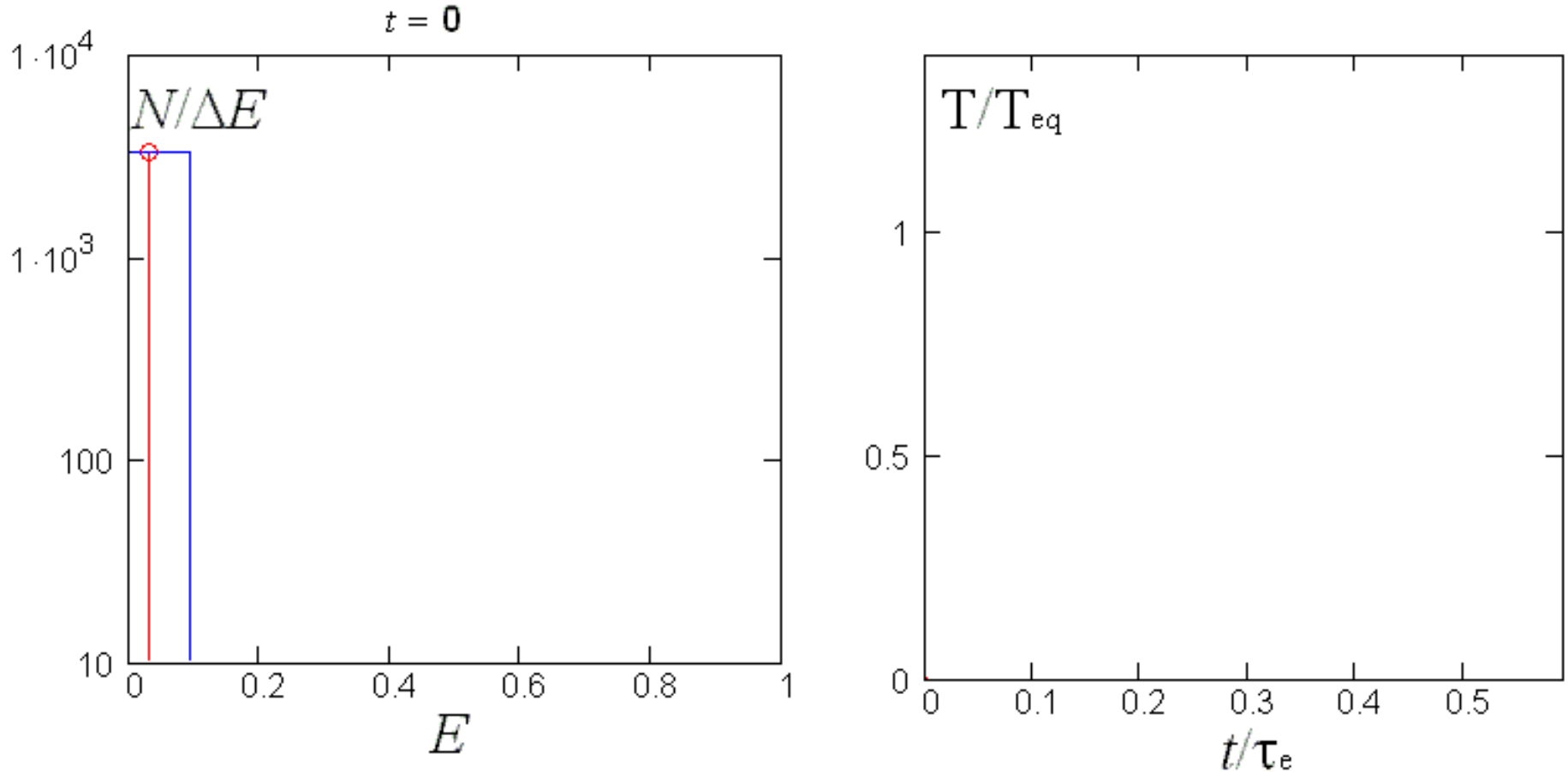
Релаксация электронов и ионов из состояния «холодной» плазмы



Начальные условия: $T_e(0) = 0$, $T_i(0) = 0$

$$M/m = 100; \quad \Gamma_e = 1.28; \quad Z = 1$$

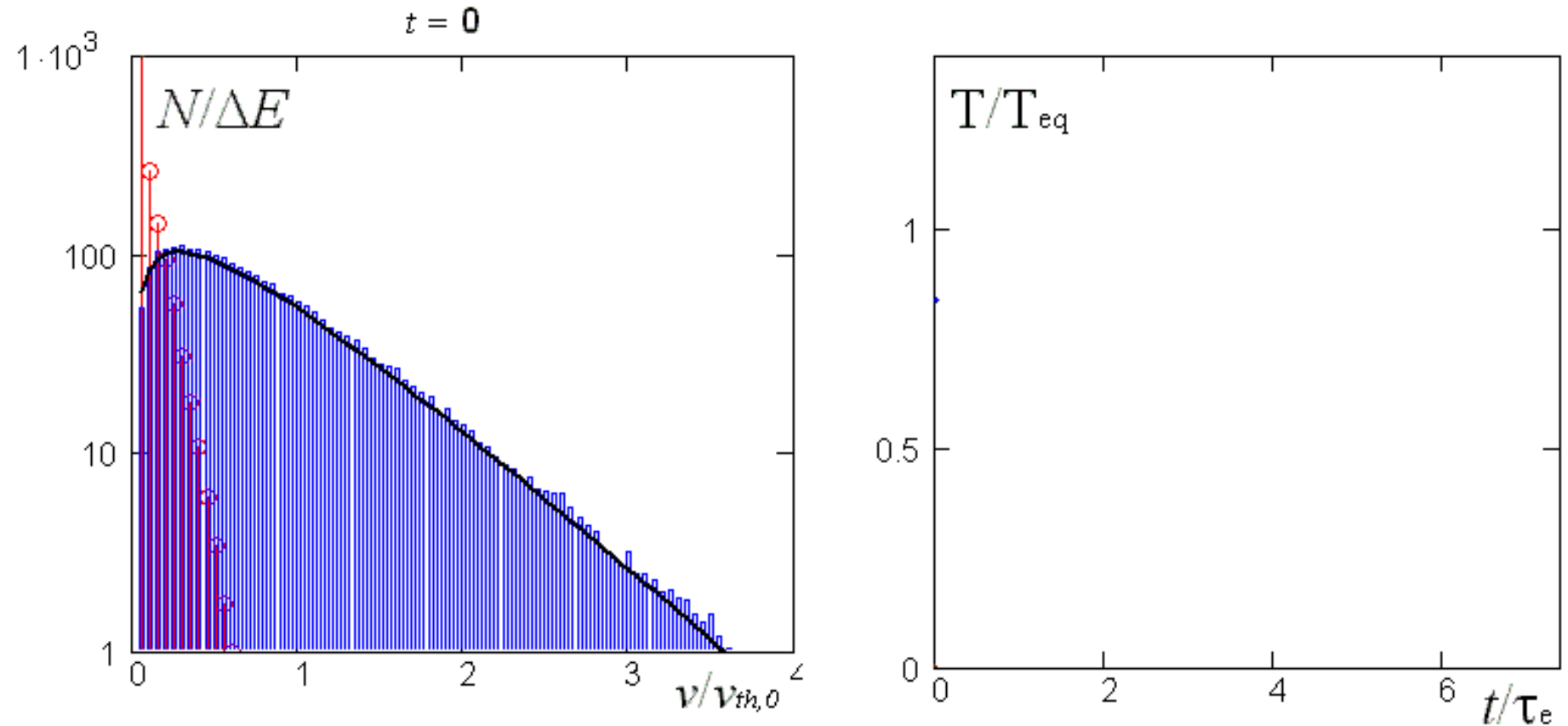
Эволюция функций распределения электронов и ионов по скоростям



$M/m = 100$; $\Gamma_e = 1.28$ ($N_D = 0.13$); $N = 128$

Начальные условия: $T_e(0) = 0$, $T_i(0) = 0$

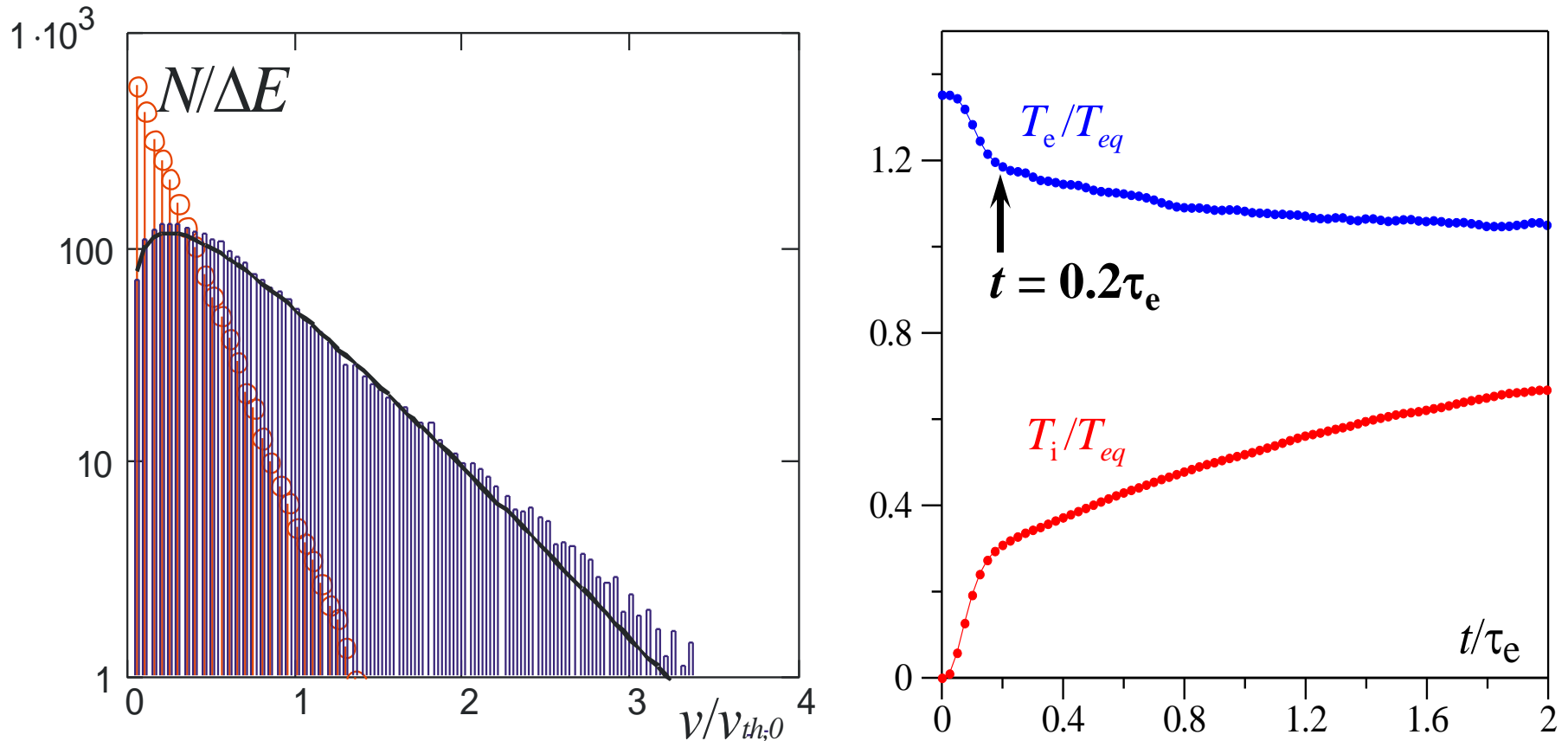
Эволюция функций распределения электронов и **ионов** по скоростям



$$M/m = 5; \Gamma_e = 1.28 (N_D = 0.13); Z = 1$$

Начальные условия: $T_i(0) = 0$

Эволюция функций распределения электронов и ионов по скоростям



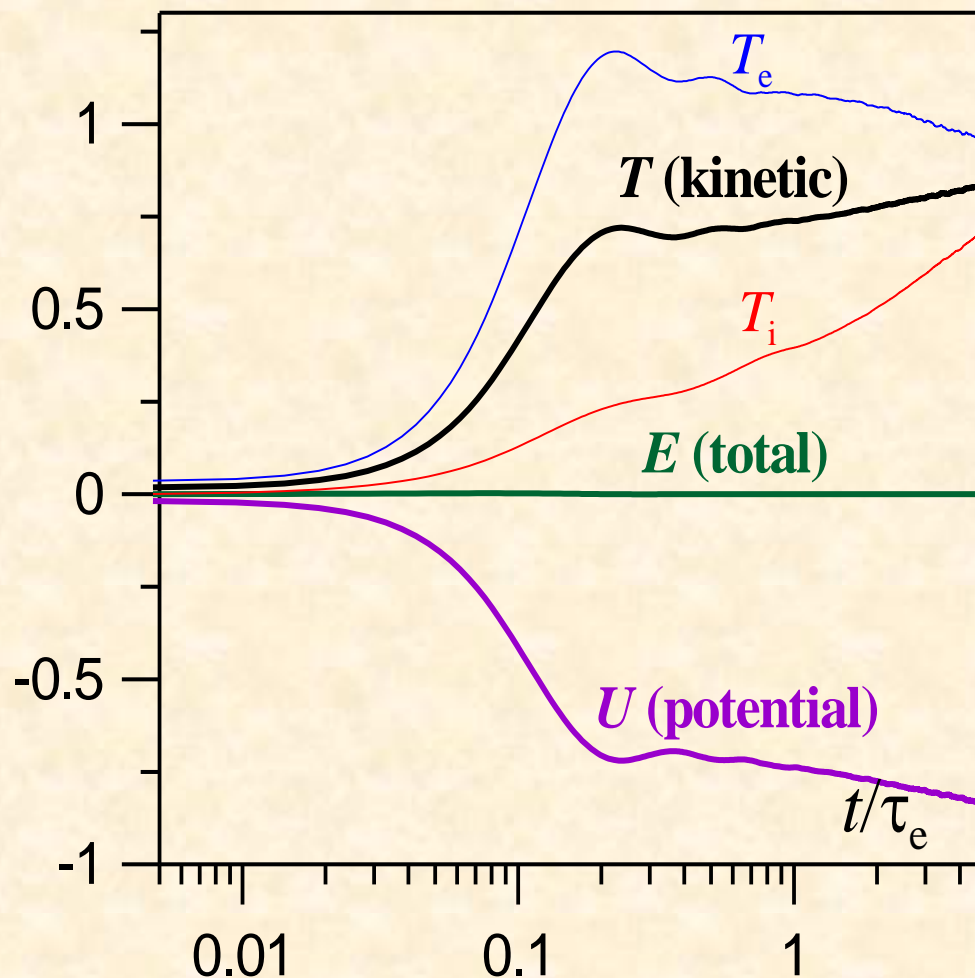
$$M/m = 5; \Gamma_e = 1.28 (N_D = 0.13); Z = 1$$

Начальные условия: $T_i(0) = 0$

Релаксация электронов и ионов из состояния «холодной» плазмы

Начальное состояние: $T_e(0) = 0$, $T_i(0) = 0$, случайное распределение электронов и ионов в пространстве.

$$E_0 = 0$$



$$\Gamma = 1.48$$
$$(N_D = 0.1)$$
$$M/m = 10$$

Термостат Гаусса

Модифицированные уравнения движения:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathbf{q}_i}{\partial t} &= \mathbf{p}_i \\ \frac{\partial \mathbf{p}_i}{\partial t} &= -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}_i} - \zeta \mathbf{p}_i \\ \zeta &= -\frac{\sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} \frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}_i}}{\sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{m_i}}\end{aligned}$$

Распределение частиц по координатам и импульсам:

$$\rho(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \delta(T - T_0) e^{-\beta U(\mathbf{q})}$$

Термостат Берендсена

После каждого шага по времени производится масштабирование скоростей:

$$v_{n+1} \rightarrow \lambda v_{n+1} \quad \text{где} \quad \lambda = \sqrt{1 + \frac{\Delta t}{\tau} \left(\frac{T_0}{T_n} - 1 \right)}$$

В этом случае средняя кинетическая энергия изменяется согласно

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{T - T_0}{\tau}$$

Распределение частиц по координатам и импульсам:

$$\rho(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = f(\mathbf{p}) e^{-\beta(U(\mathbf{q}) - \alpha\beta\delta U(\mathbf{q})^2/3N)}$$

Термостат Ланжевена

Модифицированные уравнения движения:

$$\frac{\partial \mathbf{q}_i}{\partial t} = \mathbf{p}_i$$

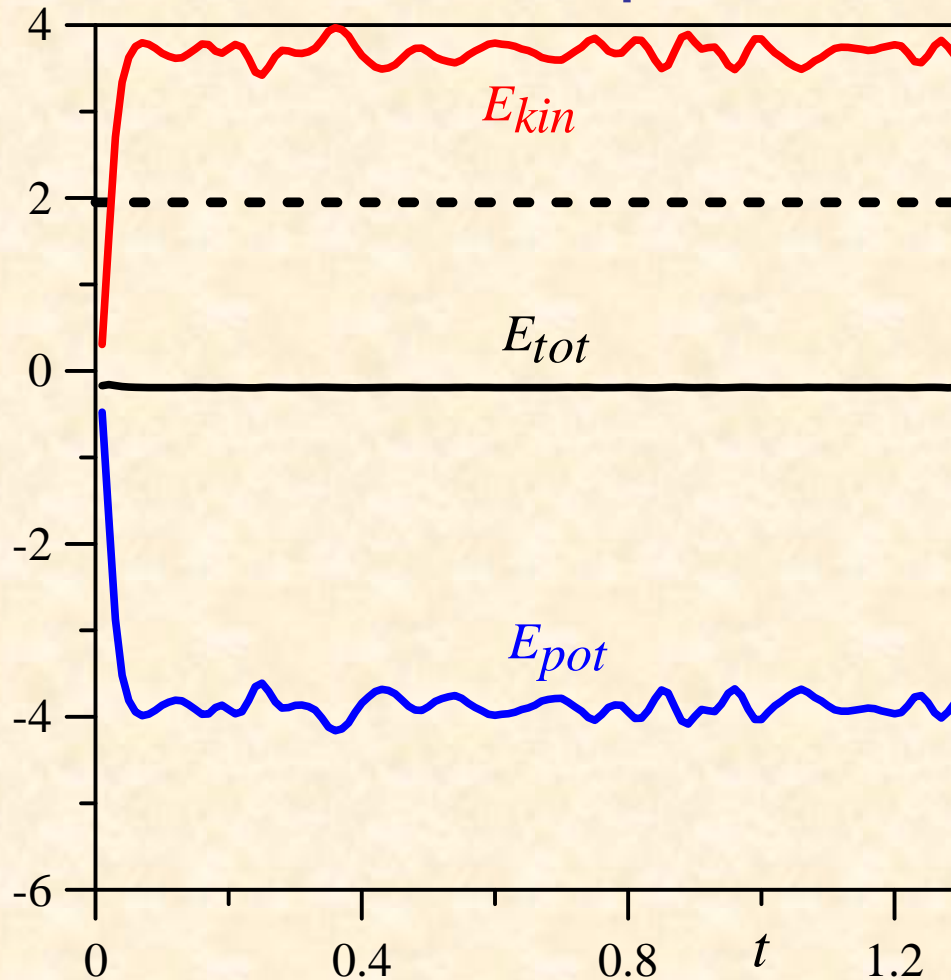
$$\frac{\partial \mathbf{p}_i}{\partial t} = -\frac{\partial U}{\partial \mathbf{q}_i} - \gamma \mathbf{p}_i + \mathbf{F}^+$$

Амплитуда случайной силы и силы трения связаны по флуктуационно-диссипационной теореме

$$\langle \mathbf{F}_i^+(t_1) \mathbf{F}_j^+(t_2) \rangle = 2\gamma k_B T \delta_{ij} \delta(t_1 - t_2)$$

Применение термостатов для выхода на равновесие в МД

Поведение системы без термостата с нулевыми начальными скоростями



Lennard-Jones 12-6

$$\rho = 0.8$$

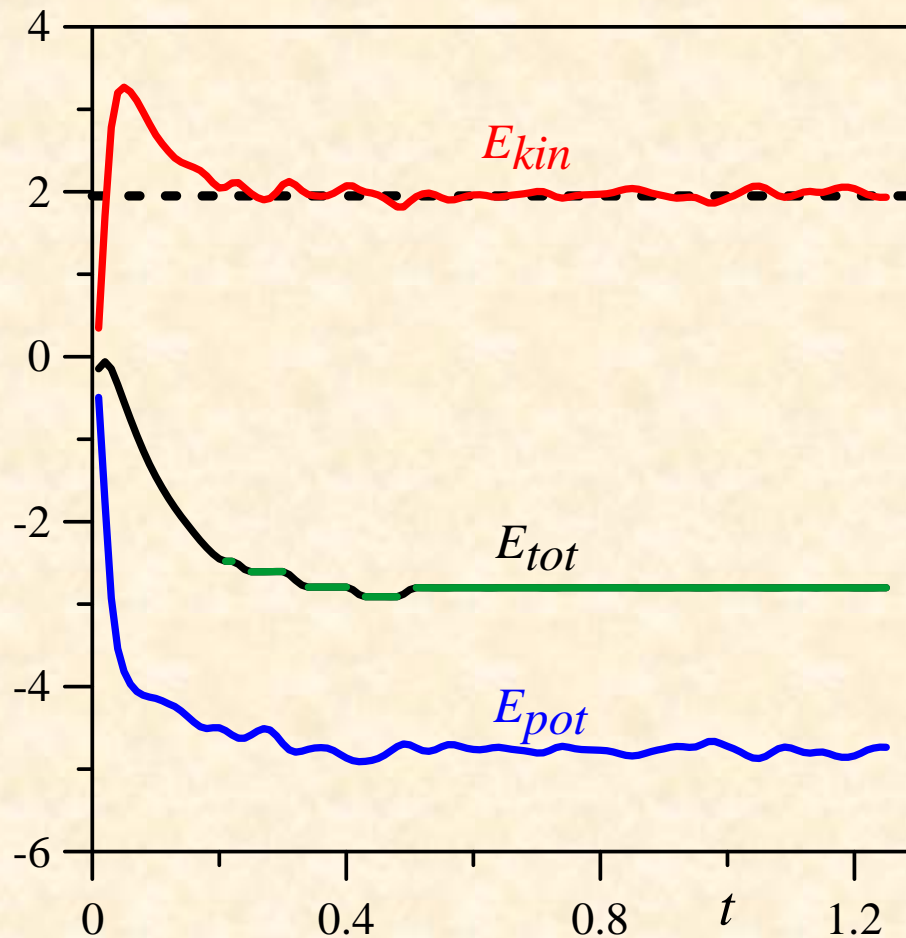
$$T = 1.3$$

$$N = 256$$

$$r_{cut} = 3.0$$

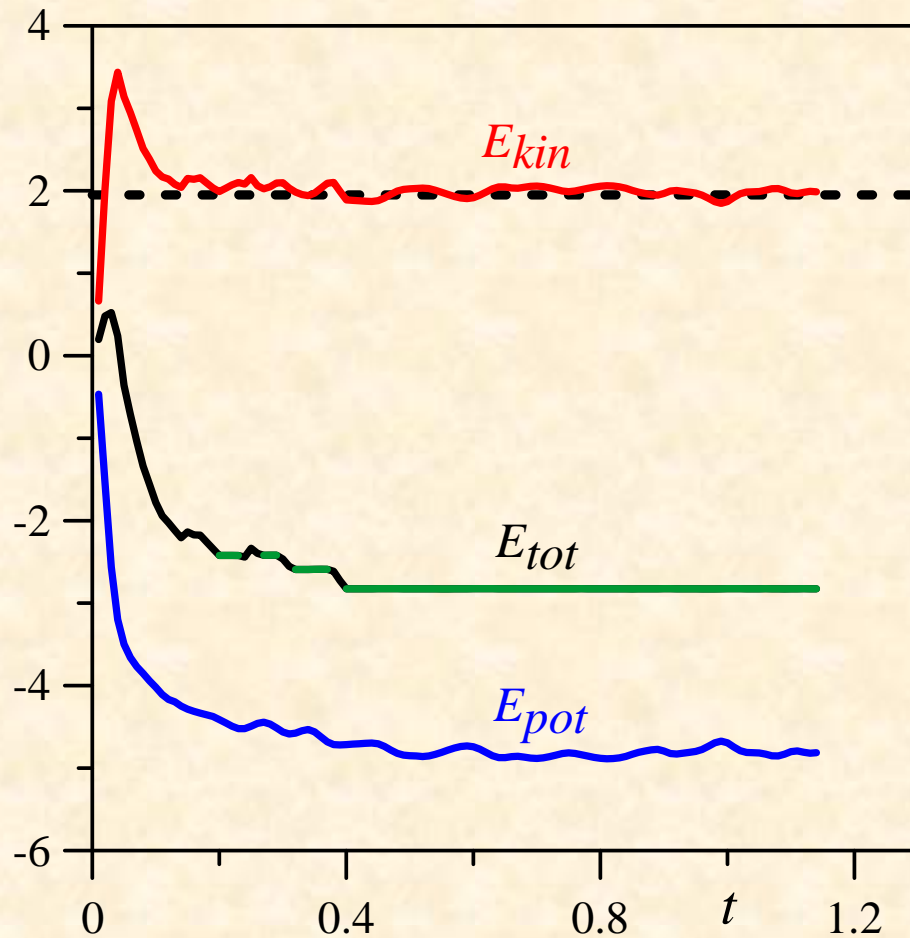
Применение термостатов для выхода на равновесие в МД

Термостат Берендсена

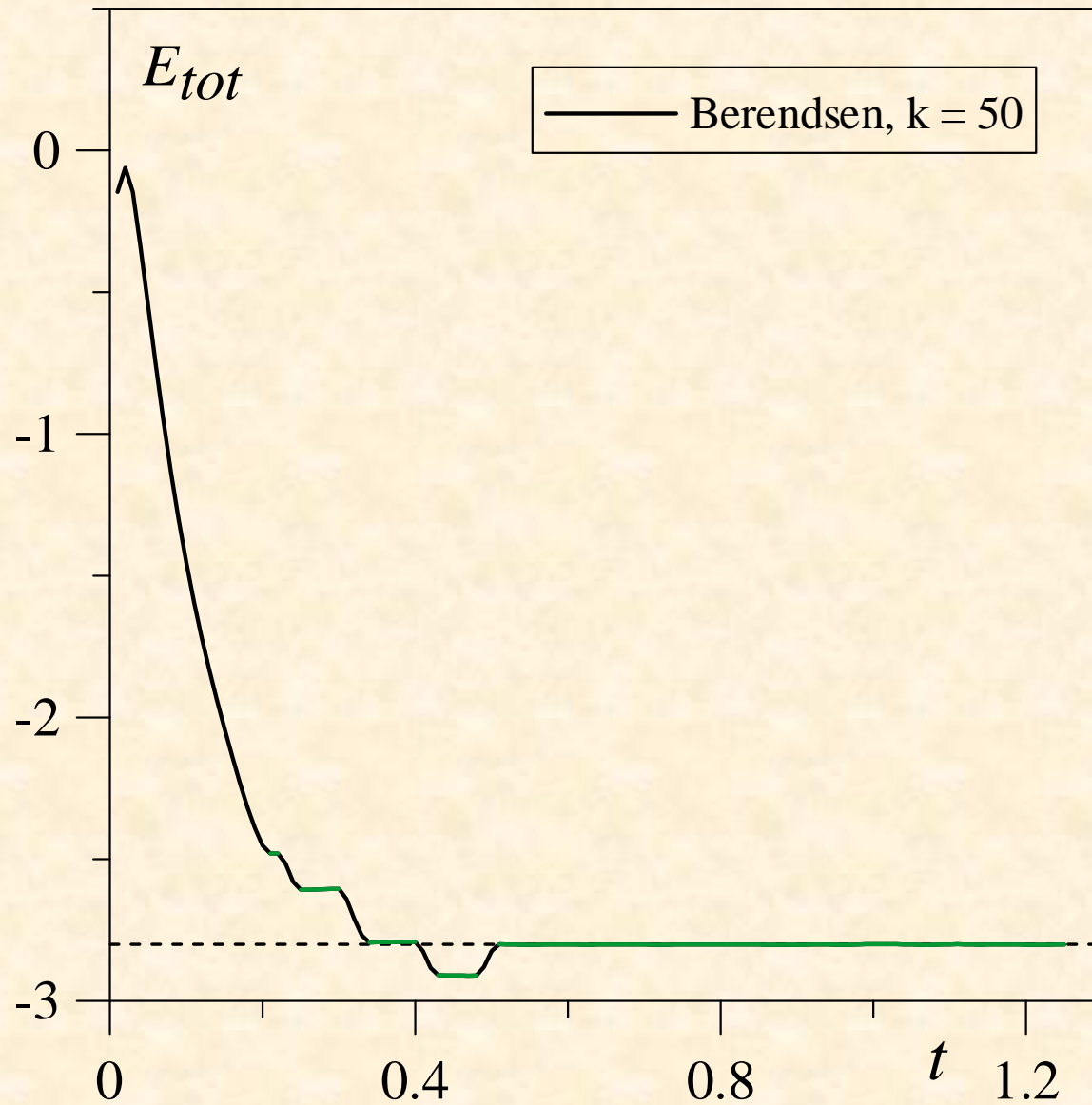


Применение термостатов для выхода на равновесие в МД

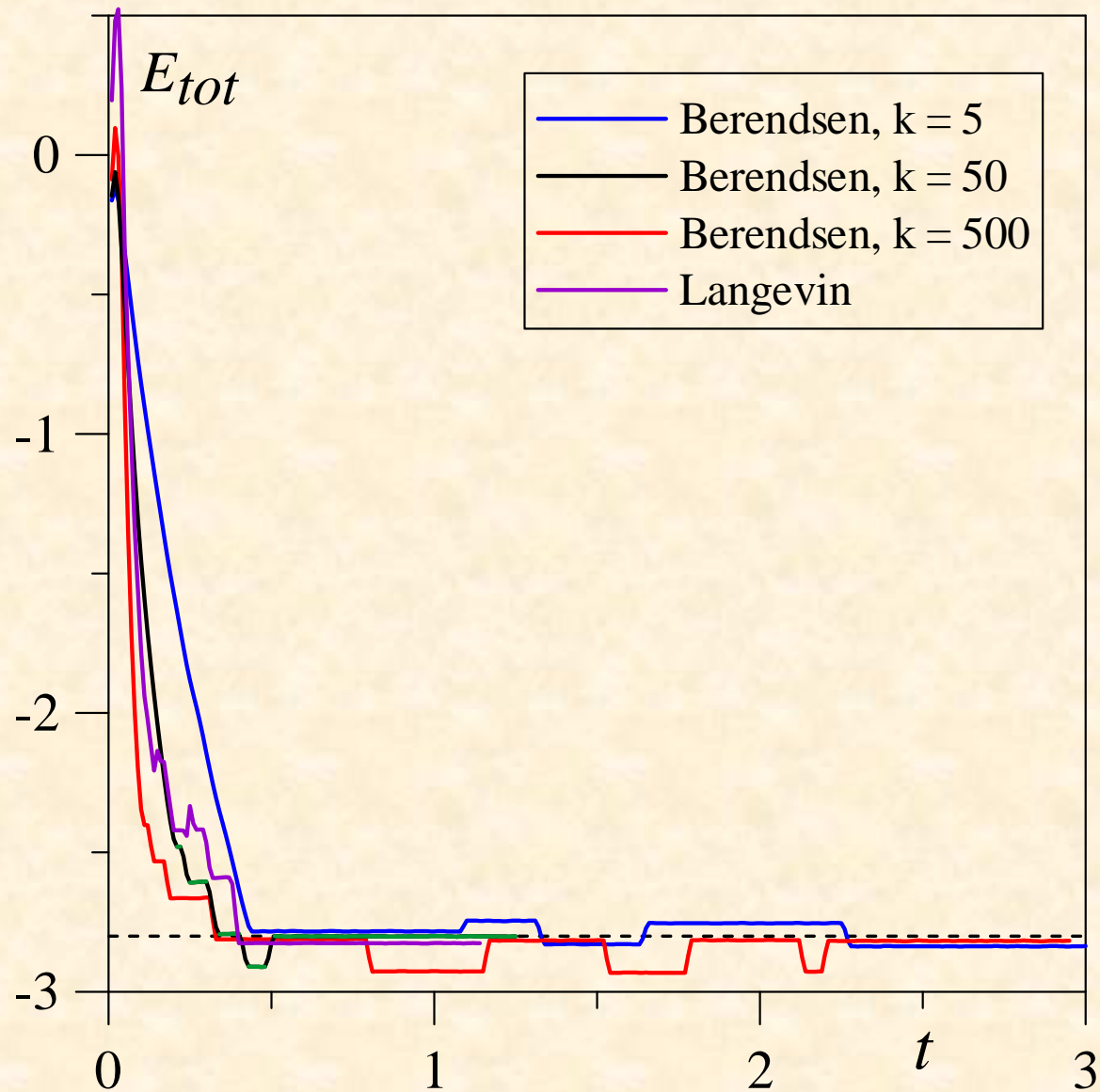
Термостат Ланжевена



Применение термостатов для выхода на равновесие в МД



Применение термостатов для выхода на равновесие в МД



Термостат Нозе-Хувера

Модифицированные уравнения движения:

$$\frac{\partial \mathbf{q}_i}{\partial t} = \frac{\mathbf{p}_i}{m_i}$$

$$\frac{\partial \mathbf{p}_i}{\partial t} = -\frac{\partial U(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}_i} - \zeta \mathbf{p}_i$$

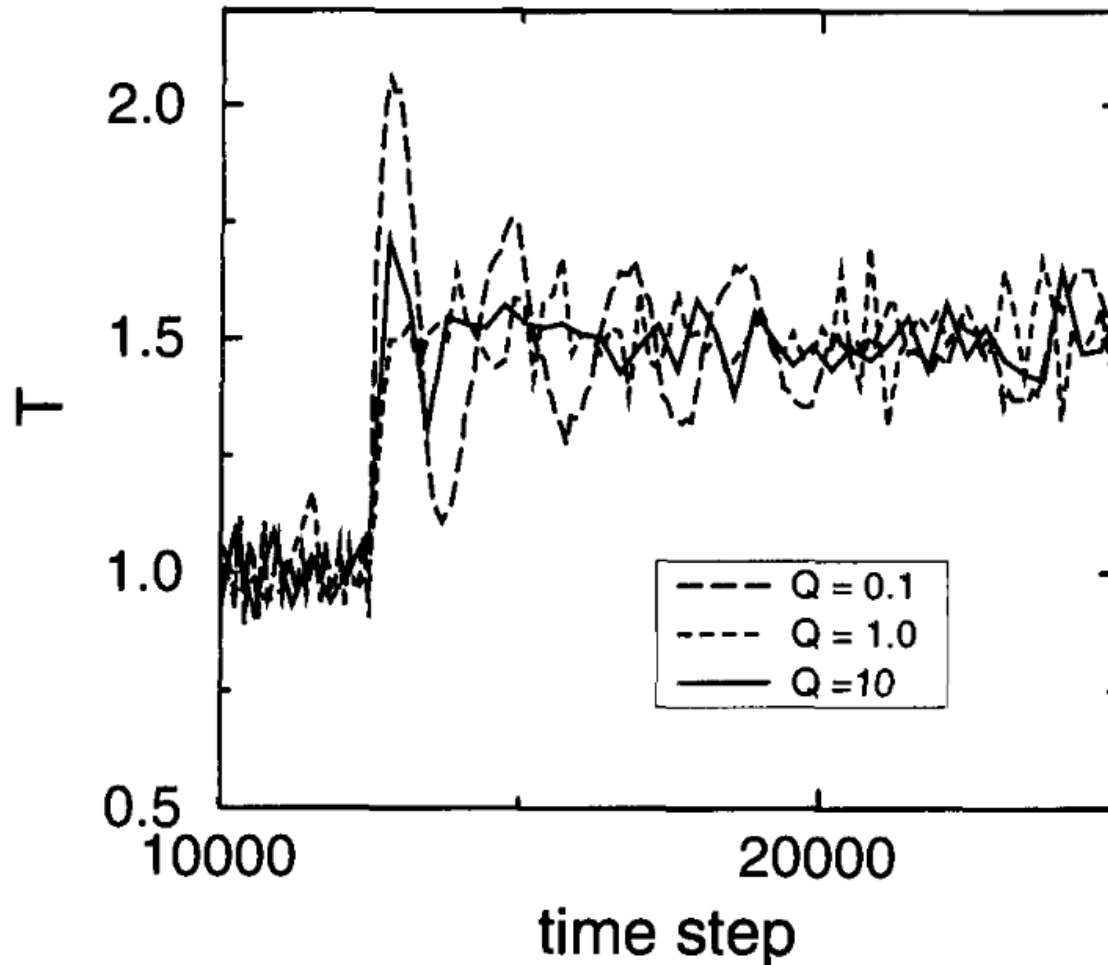
Уравнения для дополнительной переменной

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} = \frac{1}{M_s} \left(\sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{m_i} - g k_B T \right)$$

$g = 3N + 1$ is the number of degrees of freedom

Термостат Нозе-Хувера

Пример реакции системы на изменение температуры термостата



Термостат Нозе-Хувера

Различные термостаты в применении к гармоническому осциллятору

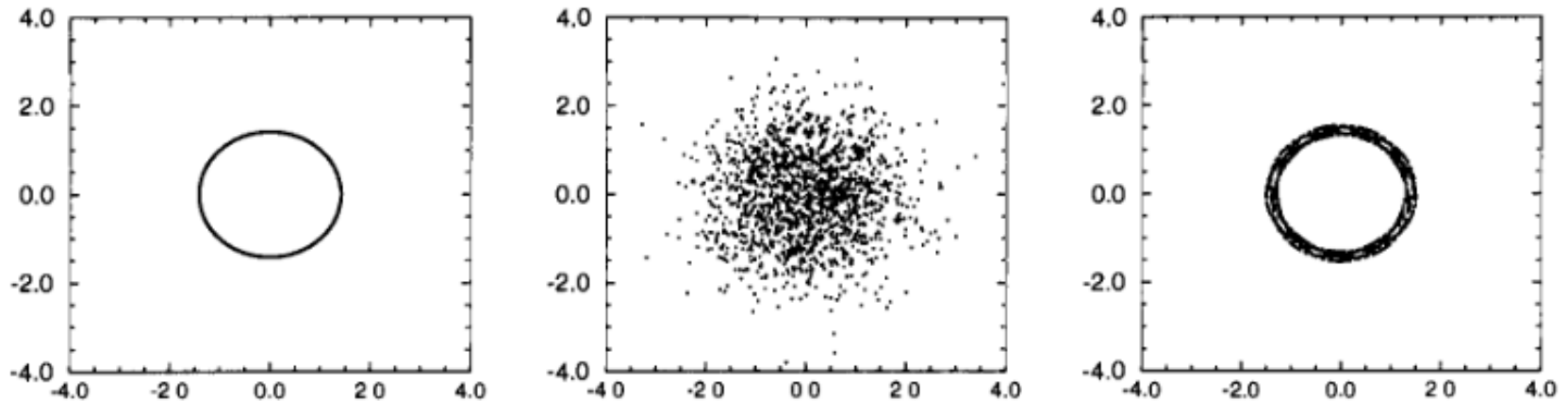


Figure 6.7: Trajectories of the harmonic oscillator: (from left to right) in the microcanonical ensemble, using the Andersen method, and using the Nosé-Hoover method. The y axis is the velocity and the x axis is the position.

$$U = \frac{1}{2} q^2$$

Баростат

Модифицированные уравнения движения:

$$\dot{q}_i = \frac{p_i}{m} + \dot{\varepsilon} q_i$$

$$\dot{p}_i = F_i - \dot{\varepsilon} p_i - \alpha p_i$$

$$\dot{V} = dV \dot{\varepsilon}$$

Уравнения для функции растяжения:

$$\dot{\varepsilon} = \frac{\frac{1}{2m} \sum_{i \neq j} q_{ij} \cdot p_{ij} \left(\phi_{ij}'' + \frac{\phi_{ij}'}{q_{ij}} \right)}{\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} q_{ij}^2 \left(\phi_{ij}'' + \frac{\phi_{ij}'}{q_{ij}} + d^2 pV \right)}$$