

Лабораторна робота 1

Основи роботи в операційній системі Unix.

Вивчення структурних властивостей простої рідини за допомогою методу молекулярної динаміки.

Комп'ютерне моделювання рідкокристалічних фаз моделі частинок, що описуються потенціалом Гей-Берне.

Основи роботи в операційній системі Unix

- Операційна система UNIX.
- Організація запуску задач, послідовна і паралельні черги кластера ІФКС.
- Основні системні виклики з командного рядка.
- Робота з оболонкою Midnight Commander.
- Робота з програмою побудови графіків gnuplot.
- Робота з програмою молекулярної візуалізації RasMol.
- Віддалена робота за допомогою putty MobaXtern (з Windows) та ssh (з Unix/Linux)

Вивчення структурних властивостей простої рідини за допомогою методу молекулярної динаміки.

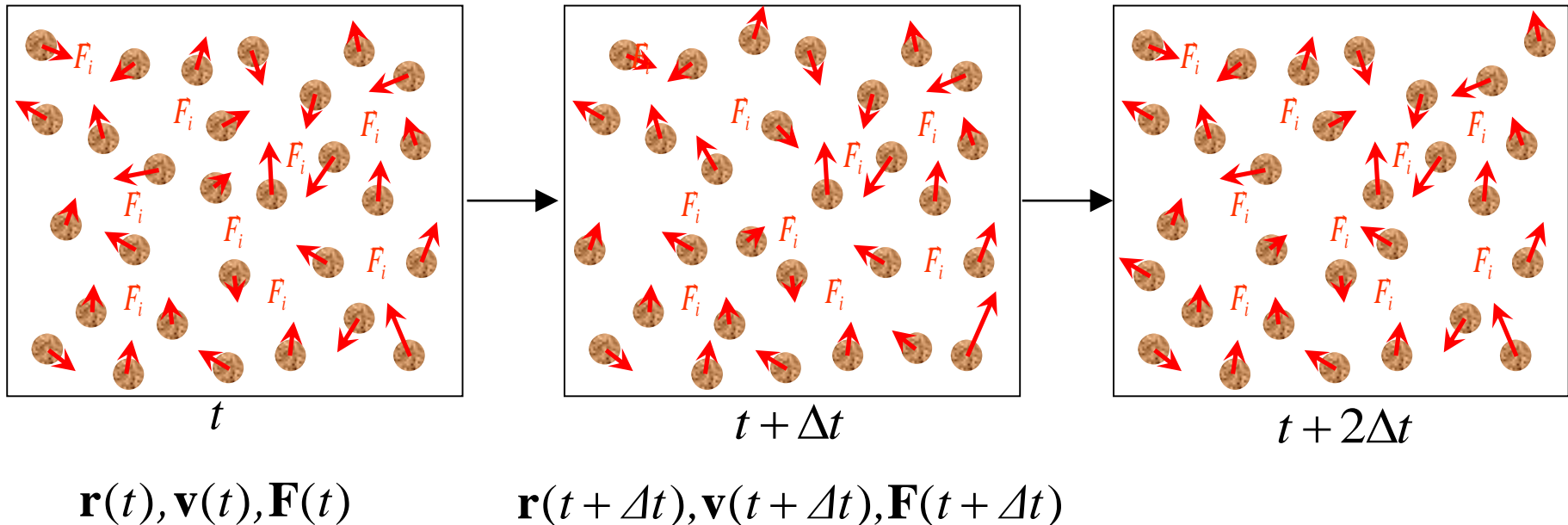
Рівняння Ньютона - диференціальні рівняння **2 порядку**, по часу t .

Молекулярна динаміка - наближений розв'язок по t методом скінчених різниць.

Пониження ступеня рівняння - система двох рівнянь першого порядку:

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{F}_i \longrightarrow \begin{cases} m_i \dot{\mathbf{v}}_i = \mathbf{F}_i \\ \dot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{v}_i \end{cases} \quad \text{проміжна змінна: швидкість}$$

Розв'язок дискретний за часом з інтервалом Δt



Інтегратори рівнянь руху. Початкові дані: $\vec{r}(t), \vec{v}(t), \vec{F}(t)$. Аналітичні вирази:

$$\begin{cases} \vec{r}_i(t + \Delta t) = 2\vec{r}_i(t) - \vec{r}_i(t - \Delta t) + \frac{\vec{F}_i(t)}{m_i} \Delta t^2 + O(\Delta t^4) \\ \vec{v}_i(t) = \frac{\vec{r}_i(t + \Delta t) - \vec{r}_i(t - \Delta t)}{2\Delta t} + O(\Delta t^2) \end{cases}$$

Інтегратор Верле

- різна точність для r і v
- зберігання $r(t-\Delta t)$ і $r(t)$

$$\begin{cases} \vec{r}_i(t + \Delta t) = \vec{r}_i(t) + \vec{v}_i(t + \frac{\Delta t}{2})\Delta t + O(\Delta t^3) \\ \vec{v}_i(t + \frac{\Delta t}{2}) = \vec{v}_i(t - \frac{\Delta t}{2}) + \frac{\vec{F}_i}{m_i} \Delta t + O(\Delta t^3) \end{cases}$$

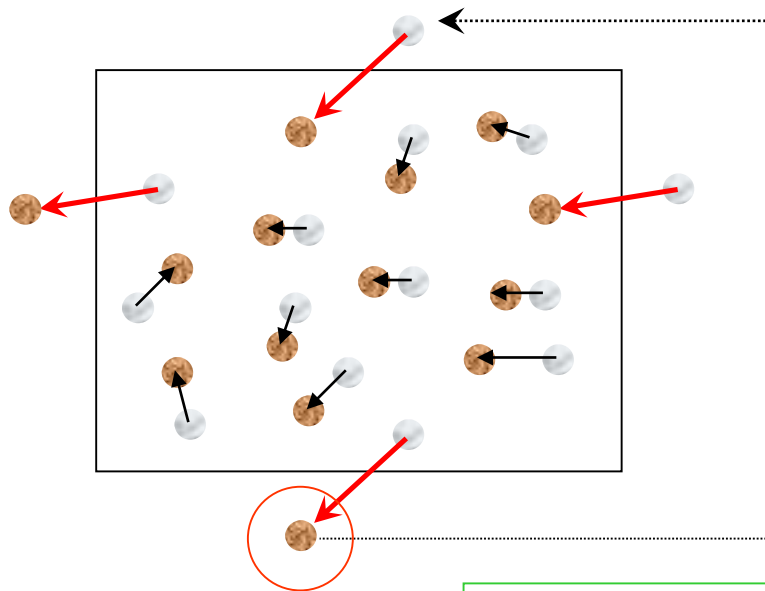
Інтегратор почергового просування

- часовий зсув між r і v

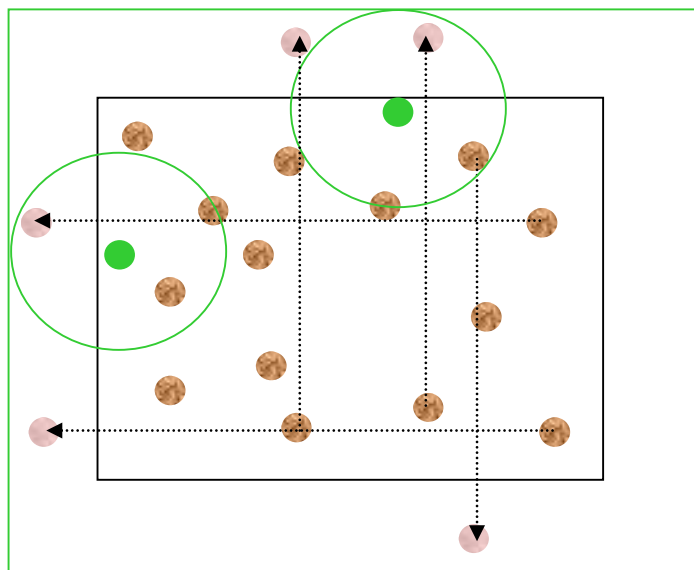
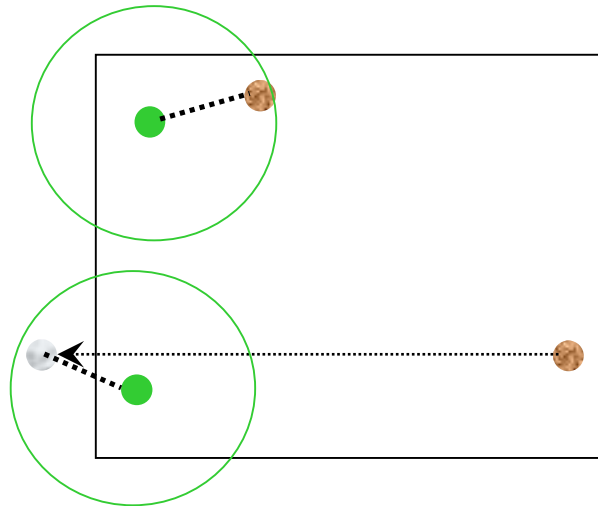
$$\begin{cases} \vec{r}_i(t + \Delta t) = \vec{r}_i(t) + \left(\vec{v}_i(t) + \frac{\vec{F}_i(t)}{m_i} \frac{\Delta t}{2} \right) \Delta t + O(\Delta t^3) \\ \vec{v}_i(t + \Delta t) = \vec{v}_i(t) + \frac{1}{2} \left(\frac{\vec{F}_i(t)}{m_i} + \frac{\vec{F}_i(t + \Delta t)}{m_i} \right) \Delta t + O(\Delta t^3) \end{cases}$$

Верле у швидкісній формі

Періодичні граничні умови



Взаємодія із найближчим образом



Врахування реплік
частинок

Оптимізація обчислень

Списки взаємодіючих сусідів

якщо $\max\{\Delta r_i\} \geq (r_l - r_c)$ перебудувати:

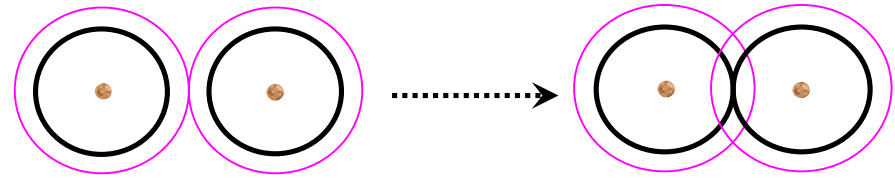
```
do i = 1, N-1
  do j = i+1, N
    r12sq = (x(i)-x(j))**2 + (y(i)-y(j))**2 + (z(i)-z(j))**2
    if (r12sq <= rcsq) then
      call add_neighb(i,j)
      call add_neighb(j,i)
    endif
  enddo
enddo
```

перебір усіх $N(N-1)/2$ пар для перевірки $r12sq$
лише при перебудові списку сусідів

else use old lists:

```
do i = 1, N
  do n = 1, Nneighb
    call eval_energy_forces (i,neighb(n,i))
  enddo
enddo
```

в іншому разі при обчисленні сил:
перебір лише $N \cdot N_{\text{neigh}}$ пар сусідів



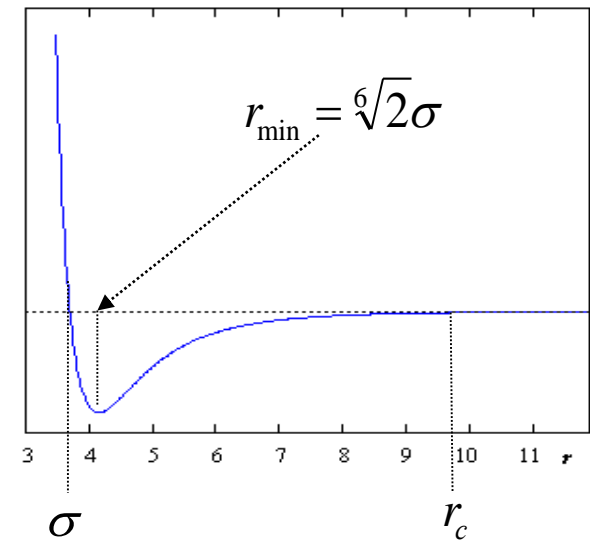
Найгірший сценарій: частинки змістились
на Δr кожна назустріч одна одній

Виграш в ефективності: $\sim [N/2] : N_{\text{neigh}} \sim L^3/2 : [4/3\pi r_c^3]$
залежить від співвідношення між r_c і L

Візуалізувати потенціал Леннард-Джоунса для
вибраних одиниць і знайти граничну відстань r_c
на якій частинки ще взаємодіють, з умови:

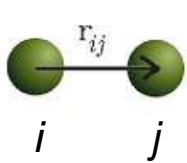
$$U_{LJ}(r_c) \approx 10^{-5} U_{LJ}(r_{\min})$$

де r_{\min} - точка мінімуму потенціалу взаємодії
частинок



Обчислити аналітичні вирази для сил, які діють на кожну із частинок i, j , які взаємодіють
через потенціал Леннард-Джоунса

координати частинок:



$$\vec{r}_i = \{x_i, y_i, z_i\}$$

$$\vec{r}_j = \{x_j, y_j, z_j\}$$

вектор між частинками
відстань між ними

$$\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j, \quad r_{ij} = |\vec{r}_{ij}|$$

потенціал Леннард-
Джоунса

$$U_{LJ}(r_{ij}) = 4\epsilon_0 \left(\left(\frac{\sigma_0}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_0}{r_{ij}} \right)^6 \right)$$

$$\vec{F}_i = \{F_{ix}; F_{iy}; F_{iz}\} = \left\{ -\frac{\partial U_{LJ}(r_{ij})}{\partial x_i}; -\frac{\partial U_{LJ}(r_{ij})}{\partial y_i}; -\frac{\partial U_{LJ}(r_{ij})}{\partial z_i} \right\} = ?$$

$$\vec{F}_j = \{F_{jx}; F_{jy}; F_{jz}\} = -\vec{F}_i = ?$$

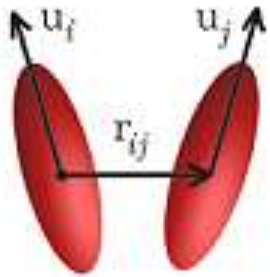
Вивчення структурних властивостей простої рідини за допомогою методу молекулярної динаміки.

- Визначитись із **одинацями моделювання**:
 - або фізичні (ван-дер-Ваальсовий діаметер σ , маса m , енергія взаємодії ϵ), із наборів доступних онлайн силових полів (force fields GROMOS, AMBER, MM3) для молекул напр. якогось із інертних газів: Ar, Ne, Kr,...
 - або модельні безрозмірні ($\sigma=1$, $m=1$, $\epsilon=1$).
- Знайти граничну відстань взаємодії частинок r_c і отримати **аналітичні вирази для сил**, що діють на кожну з частинок, які взаємодіють через потенціал Леннард-Джоунса (див. наст. слайд)
- Змінні**: три-компонентні вектори координат $r(i)$, компонент швидкостей $v(i)$ та сил $f(i)$, що характеризують частинки від 1 до N .
- Програма генерування **початкової конфігурації** частинок – симуляційної комірки розміром $\{L_x, L_y, L_z\}$ із частинками у вузлах простої кубічної решітки із заданою відстанню між частинками від σ до 1.5σ (σ -діаметр частинок) вздовж кожної з осей, швидкості частинок вибрати із розподілу Максвелла для вибраної температури T .
- Виконання **циклу молекулярної динаміки** задану кількість разів N_{\max} :
 - обчислити сили, що діють на кожну частинку від взаємодій між усіма парами $r_{ij} < r_c$ частинок (**періодичні граничні умови – якщо відстань між частинками по якійсь з осей k менша за $Lk/2$ – то виконати трансляцію однієї з частинок вздовж цієї осі на Lk , повторити перевірку за всіма осями**)
 - застосувати вибраний інтегратор рівнянь руху – отримати стан при $t+\Delta t$

Комп'ютерне моделювання рідкокристалічних фаз моделі частинок, що описуються потенціалом Гей-Берне.

J.G.Gay, B.J.Berne, J.Chem.Phys., 74, 3316(1981), De Miguel, Berardi, Zannoni, Cleaver, Allen, Wilson, Schoen, Luckhurst, 1990-...

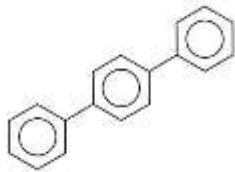
Потенціал Гей-Берне



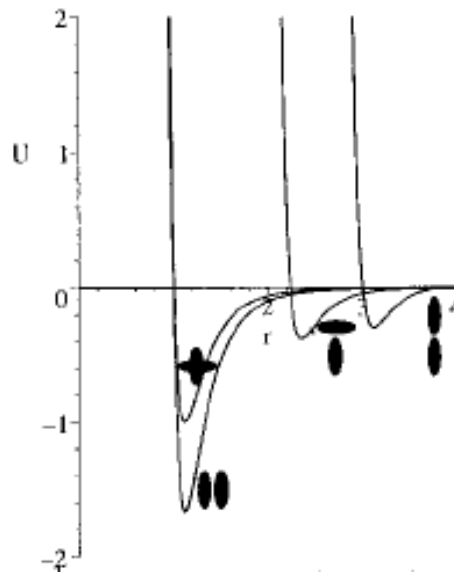
$$U_{GB} = 4\varepsilon(u_1, u_2, \vec{r}_{12}) \left[\left(\frac{\sigma_0}{r_{12} - \sigma(u_1, u_2, r_{12}) + \sigma_0} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_0}{r_{12} - \sigma(u_1, u_2, r_{12}) + \sigma_0} \right)^6 \right]$$

Візуалізація потенціалу

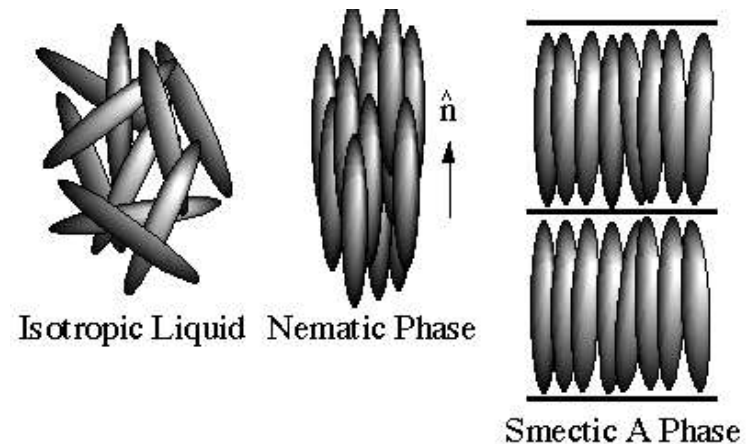
Молекули-прототипи



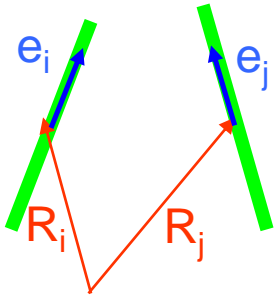
Luckhurst, Simmonds, 1993
p-terphenyl fit



Рідкокристалічні фази



Рівняння руху несферичних видовжених молекул



$$M\ddot{\mathbf{R}}_i = \mathbf{F}_i$$

$$I\ddot{\mathbf{e}}_i = \mathbf{G}_i^\perp - I(u_i)^2 \mathbf{e}_i$$



$$M\dot{\mathbf{V}}_i = \mathbf{F}_i$$

$$\dot{\mathbf{R}}_i = \mathbf{V}_i$$

$$I\dot{\mathbf{u}}_i = \mathbf{G}_i^\perp - I(u_i)^2 \mathbf{e}_i$$

$$\dot{\mathbf{e}}_i = \mathbf{u}_i$$

Примітивний “термостат” та термостат Андерсена

$$K_{\text{trans}} = \sum_{i=1}^N \frac{m_i \mathbf{v}_i^2}{2} = N_{\text{trans}} \frac{k_B T}{2},$$

$$K_{\text{rot}} = \sum_{i=1}^N \frac{I_i \mathbf{u}_i^2}{2} = N_{\text{rot}} \frac{k_B T}{2}$$

$$\lambda = \frac{T}{T_{\text{fix}}}, \quad |\mathbf{v}_i| \leftarrow \frac{|\mathbf{v}_i|}{\sqrt{\lambda}}, \quad |\mathbf{u}_i| \leftarrow \frac{|\mathbf{u}_i|}{\sqrt{\lambda}}$$

H.C.Andersen 72, 2384 (1980)

вибирати випадково атоми (молекули)
замінити швидкості \mathbf{v} , \mathbf{u} новими випадковими
швидкостями згідно із розподілом Максвелла

$$p(v_{xyz}) \propto \exp\left(-\frac{mv_{xyz}^2/2}{k_B T}\right)$$

$$p(u_{xyz}) \propto \exp\left(-\frac{Iu_{xyz}^2/2}{k_B T}\right)$$

Моделювання фаз, властивих флюїду частинок, що описуються потенціалом Гей-Берне

- Визначитись із **одинацями моделювання**: фізичні (ван-дер-Ваальсовий діаметер σ , видовження L/D , маса m , енергія взаємодії ϵ), або безрозмірні ($\sigma=1$, $m=1$, $\epsilon=1$).
- Знайти граничну відстань взаємодії частинок r_c і отримати **аналітичні вирази для сил**, що діють на кожну з частинок, які взаємодіють через потенціал Гей-Берне
- **Змінні**: три-компонентні вектори координат $r(i)$, компонент швидкостей $v(i)$ та сил $f(i)$, орієнтації $e(i)$, похідні від орієнтацій $u(i)$, обертові сили $G(i)$, що характеризують частинки $i=1-N$.
- Програма генерування **початкової конфігурації** частинок – симуляційної комірки розміром $\{L_x, L_y, L_z\}$ із частинками у вузлах простої кубічної решітки, швидкості частинок вибрати із розподілу Максвелла для вибраної температури T .
- Виконання **циклу молекулярної динаміки в NVT ансамблі** для різних температур, обчислити параметр орієнтаційного впорядкування, розподіл густини центрів мас частинок вздовж нематичного директора
- Ідентифікувати **ізотропну, нематичну і смектичну** А фази.

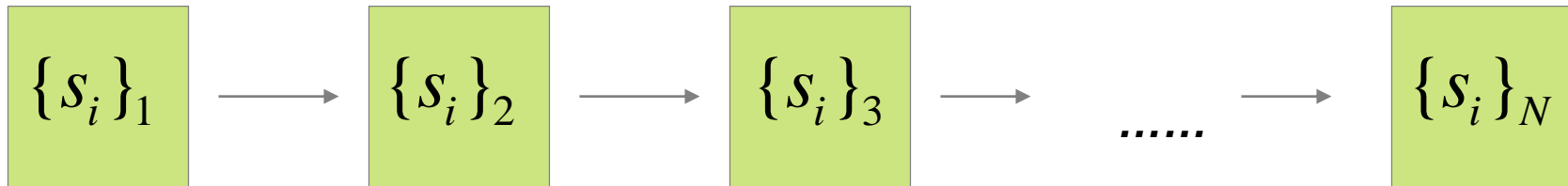
Лабораторна робота 2

Моделювання поведінки моделі Ізінга методом Монте Карло.

Застосування кластерних алгоритмів Вольфа та Свендвена-Ванга.

Метод Монте Карло: принципи

Марківський ланцюг станів із властивістю оборотності



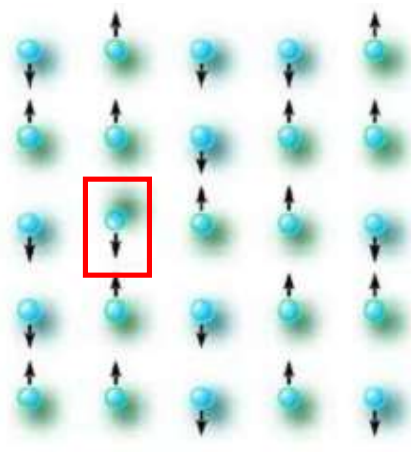
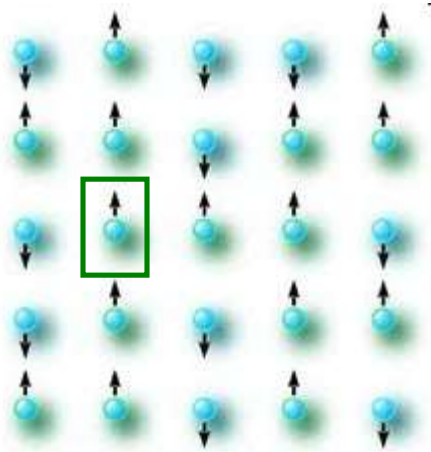
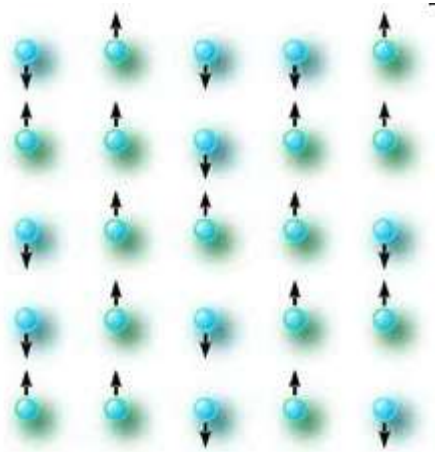
Рівноважна система \rightarrow оборотність часу \rightarrow умова детального балансу:

$$\frac{p(\text{old} \rightarrow \text{new}) \exp(-\beta H_{\text{new}})}{p(\text{new} \rightarrow \text{old}) \exp(-\beta H_{\text{old}})} = \exp(-\beta \Delta H)$$

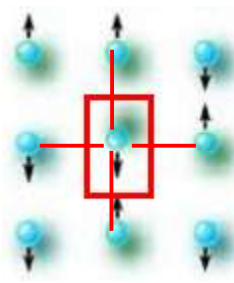
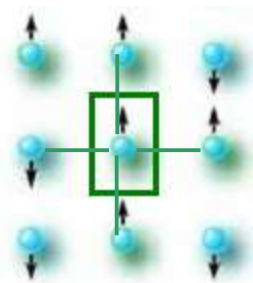
Варіанти алгоритмів, що задовольняють цій умові:

$p(\text{old} \rightarrow \text{new})$	$= \begin{cases} 1, & \Delta H < 0 \\ \exp(-\beta \Delta H), & \Delta H > 0 \end{cases}$	$= \frac{\exp(-\beta H_{\text{new}})}{\exp(-\beta H_{\text{new}}) + \exp(-\beta H_{\text{old}})}$
	Metropolis	Glauber

Модель Изинга



$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j$$



$$p(\text{old} \rightarrow \text{new}) \exp(-\beta H_{\text{new}}) = p(\text{new} \rightarrow \text{old}) \exp(-\beta H_{\text{old}})$$

$$H_{\text{old}} = -J(-1+1+1+1) = -2J$$

$$H_{\text{new}} = -J(+1-1-1-1) = 2J$$

$$\frac{p(\text{old} \rightarrow \text{new})}{p(\text{new} \rightarrow \text{old})} = \exp(-\beta \Delta H)$$

$$p(\text{old} \rightarrow \text{new}) =$$

$$\begin{cases} 1, & \Delta H < 0 \\ \exp(-\beta \Delta H), & \Delta H > 0 \end{cases}$$

Metropolis

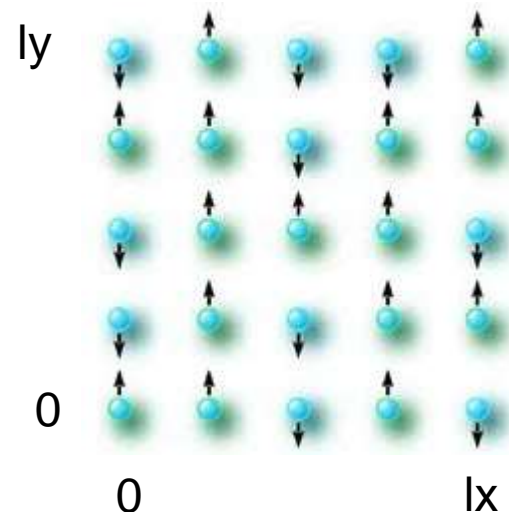
$$\frac{\exp(-\beta H_{\text{new}})}{\exp(-\beta H_{\text{new}}) + \exp(-\beta H_{\text{old}})}$$

Glauber

Список сусідів із періодичними граничними умовами

`neigh[n][i]` x, y, z – координати спіна
 n – порядковий номер спіна
 i – індекс сусіда

```
for (x=0;x<lx;x++){
  for (y=0;y<ly;y++){
    for (z=0;z<lz;z++){
      n = z+y*lz+x*lz*ly+1;
      for (i=0;i<6;i++){ /* loop over neighbours */
        xnn=x+dx[i]; ynn=y+dy[i]; znn=z+dz[i];
        if (xnn==-1) xnn=lx-1; if (ynn==-1) ynn=ly-1; if (znn==-1) znn=lz-1; /* PBC */
        if (xnn==lx) xnn=0;   if (ynn==ly) ynn=0;   if (znn==lz) znn=0;
        nnn = znn+ynn*lz+xnn*lz*ly+1;
        neigh[n][i]=nnn;
      }
    }
  }
}
```



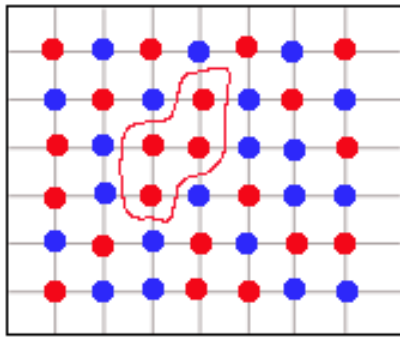
Монте Карло цикл (алгоритм Метрополіса)

$$\Delta E' = - \sum_{\langle ij \rangle} [(-s_i)s_j - s_i s_j] = 2 \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j$$
$$p = \begin{cases} 1, & \Delta E' < 0 \\ \exp(-\beta J \Delta E'), & \Delta E' > 0 \end{cases}$$

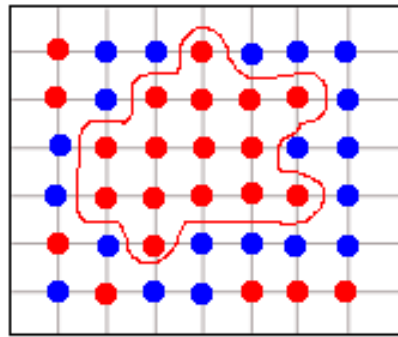
```
for (n=1;n<=nmax;n++){ /* loop over all sites */
    nor++;
    /* evaluate energy difference due to spin flip */
    sdif = 0;
    for (i=0;i<6;i++){ /* loop over site neighbours */
        nn = neigh[n][i];
        sdif += 2*ispin[n]*ispin[nn];
    }
    if (sdif<0){
        ispin[n]=-ispin[n];
        yor++;
    }
    else if (exp(-betaJ*sdif)>Ran1(&idum)){
        ispin[n]=-ispin[n];
        yor++;
    }
}
```


Роль кластеризації та ефективність методу

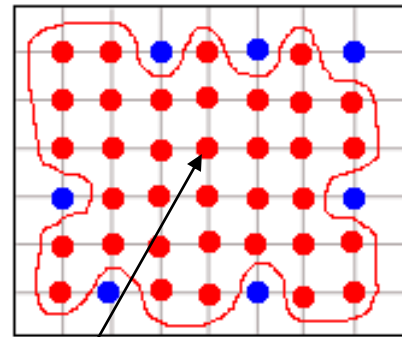
$$T \rightarrow T_c$$



$$\xi \propto a$$



$$a \leq \xi \leq L$$



$$\xi \propto L$$

$$T \rightarrow T_c : \quad \tau \rightarrow \infty$$

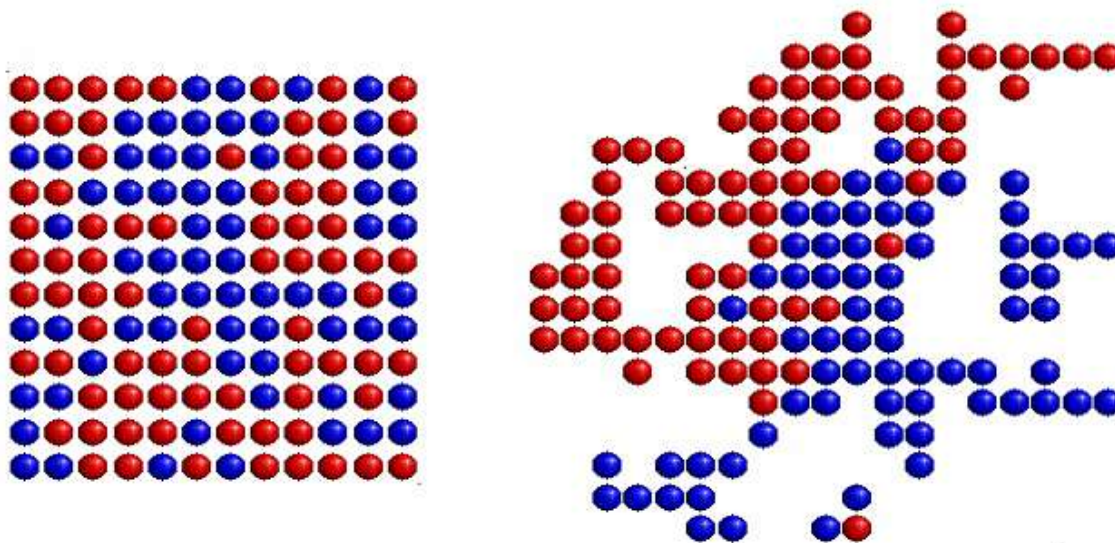
$$\Delta E' = 2 \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \equiv 2, \quad \exp[-\beta J \Delta E'] \ll 1$$

явище критичного сповільнення: час релаксації безмежний
односпівові зміни стану системи – неефективні,
має місце скорельована динаміка кластерів, МК повинен це врахувати

Ідентифікація кластерів

$$s_k \in \{0,1\}, \quad c_k \in \{1, N_c\}$$

1. set $\{c_k := 0\}$, $m = 0$;
2. pick k th individual randomly with $s_k = 1$ and $c_k = 0$;
3. set $m := m + 1$, $c_k := m$, declare k as a newcomer;
4. loop over the cluster neighbourhoods $\{I\}$ of all newcomers;
5. if $s_I = 1$ then set $c_I := m$, declare I as a newcomer;
6. repeat steps 4-5 until no newcomers;
7. go to 2.



$$n_c = \frac{N_c}{N}$$

$$a_c = \frac{\langle S_m \rangle}{N}$$

$$l_c = \frac{1}{L} \max\{l_x, l_y\}$$

$$m_c = \frac{\max\{S_m\}}{N}$$

Алгоритми Свендсена-Ванга та Вольфа



Свендсен-Ванг

- Examine every pair of neighboring spins
- If parallel: establish a bond with probability $p=1-\exp\{-2bJ\}$
- Identify all clusters of bonded spins
- Flip each cluster with probability 1/2

Вольф

- Pick spin at random
- Identify the cluster to which it belongs
- Flip all the spins in a cluster

Алгоритм Вольфа

```
n = (int)(nmax*Ran1(&idum))+1;
iold = ispin[n];
inew = -iold;
/* start a cluster, initial shell = n */
assigned[n]=TRUE;
ispin[n]=inew;
shell[0]=n;
cnt=1;
/* loop over shells until zero shell */
while (TRUE){
    nxtcnt = 0; /* next shell index */
    /* loop over shell sites */
    for (ishell=0;ishell<cnt;ishell++){
        n=shell[ishell];
```

```
/* loop over shell atom nearest neighbours */
    for (i=0;i<6;i++){
        nn=neigh[n][i];
        if (!assigned[nn]){
            if (ispin[nn]==iold){
                /* the same direction neighbour */
                if (Ran1(&idum)<bondprob){
                    /* add to a cluster, flip, register in a new shell */
                    assigned[nn]=TRUE;
                    ispin[nn]=inew;
                    nxtshell[nxtcnt]=nn;
                    nxtcnt++;
                }
            }
        }
    }
}
/* if empty new shell -> exit */
if (nxtcnt==0) break;
/* else rename new shell into work one and repeat */
cnt=nxtcnt;
for (i=0;i<cnt;i++) shell[i] = nxtshell[i];
/* continue to extend cluster until end */
}
```

План роботи:

- Вибір **змінних**: граткова $\{i,j,k\}$ vs наскрізна n нумерація спінів, масив змінної спіна частинок s , вибір **формату файлу** конфігурації спінів.
- Вибір **генератора випадкових** чисел в інтервалі $[0:1]$.
- Програма генерування **початкової конфігурації** спінів – гратки розміром $L \times L \times L = N$ із спінами: усі $+1$, або усі -1 , або випадково
- Програма **просторової візуалізації** наявних спінів (напр. кольорові кульки)
- Програма виконання **симуляції Монте Карло** за алгоритмом Метрополіса
- Програма виконання **симуляції Монте Карло** за алгоритмом Свендсена-Ванга
- Програма виконання **симуляції Монте Карло** за алгоритмом Вольфа
- Побудова графіків поведінки середньої намагніченості системи залежно від температури
- Ідентифікація точки Кюрі

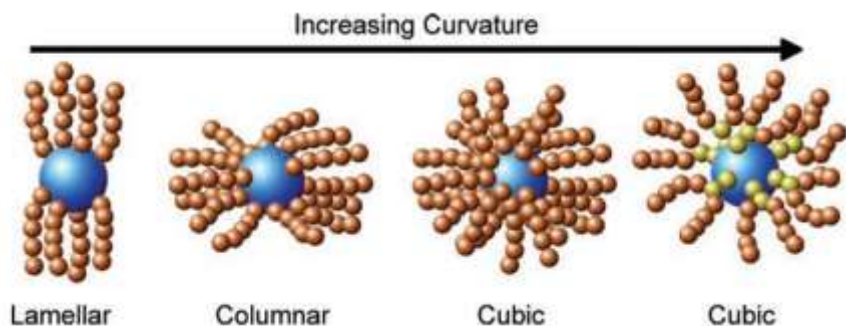
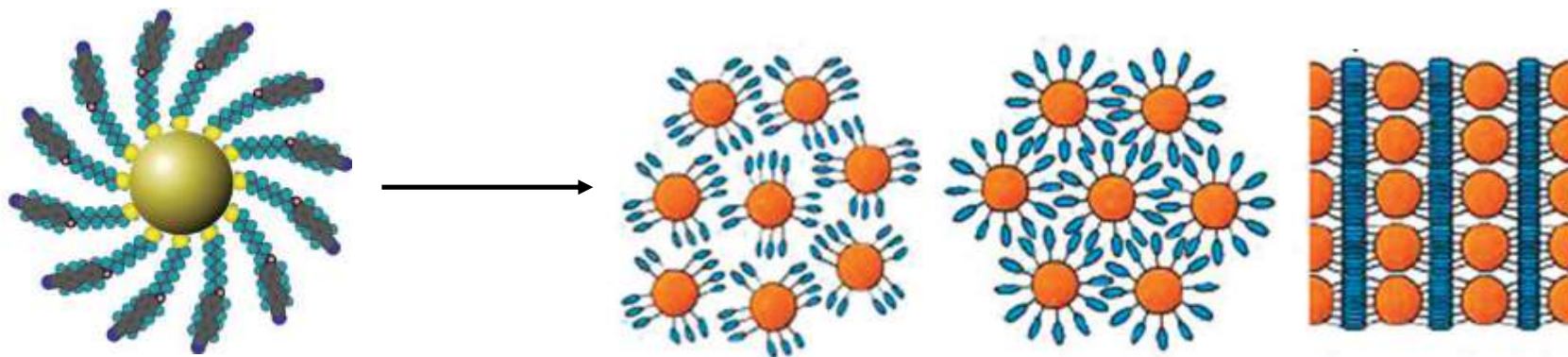
Лабораторна робота 3

Моделювання самоорганізації систем декорованих наночастинок золота методом огрубленої молекулярної динаміки.

Вивчення мікрофазового розшарування системи лінійних діблок-кополімерів методом дисипативної динаміки.

Самоорганізація декорованих наночастинок золота

Металічна серцевина, ліганди з функціональними групами, контроль самоорганізації



Регулярність структури забезпечує застосування: фотоніка, нанопровідники, барвники скла

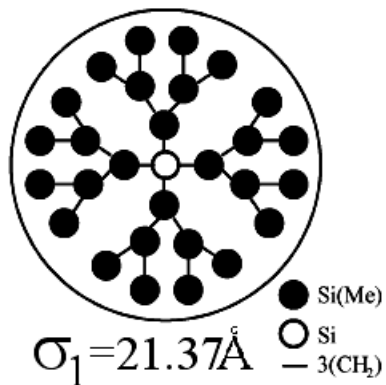
*M.Draper et al. Adv.Funct.Mat.21,1260 (2011),
H.K.Bisoyi, S.Kumar, Chem. Soc. Rev., 40, 306 (2011).*

Моделювання

- ґрунтується на метричних властивостях (середній виключений об'єм

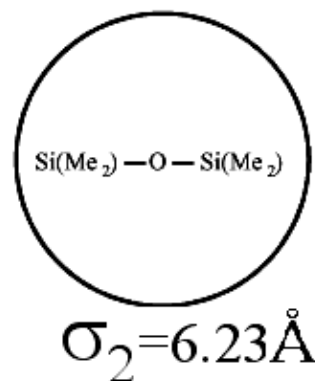
Z.E.Hughes, M.R.Wilson, L.M.Stimson, Soft Matter, 1,436 (2005)

- сферична серцевина:

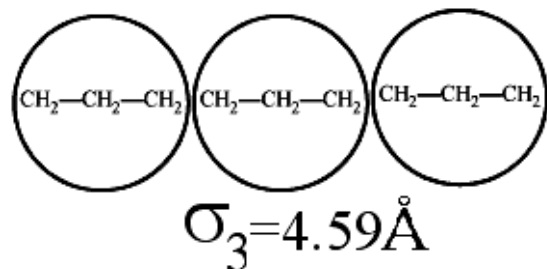


$D = 1.5 - 20 \text{ nm}$

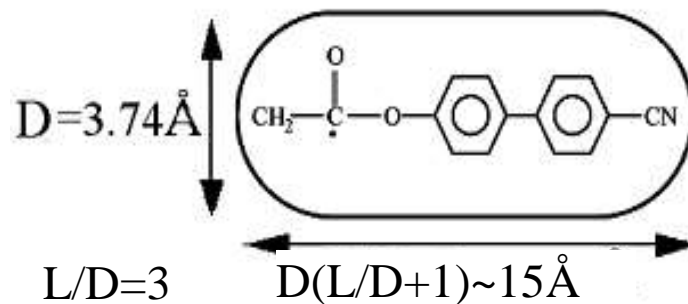
D.V.Leff et al, J.Phys.Chem. 99, 7036 (1995)



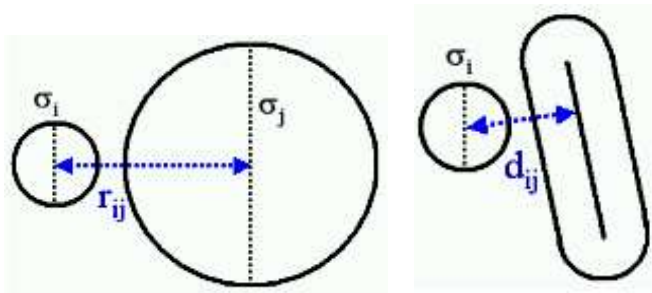
- полімерний ліганд



- мезоген (сфероциліндр)

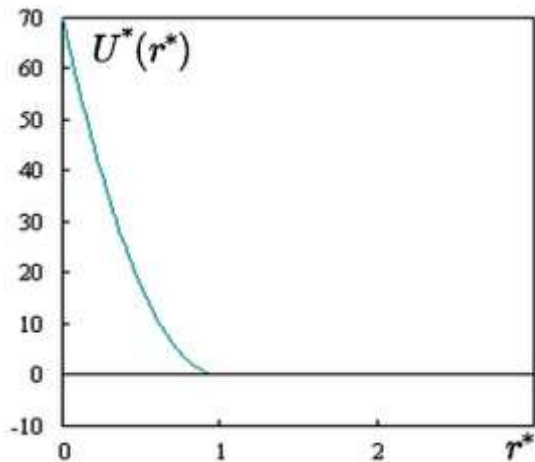


Потенціали взаємодії

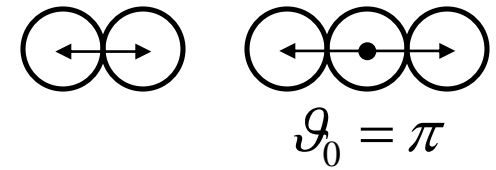


$$V_{ij} = \begin{cases} V_{\max} (1 - \Delta_{ij})^2, & \Delta_{ij} < 1 \\ 0, & \Delta_{ij} \geq 1 \end{cases}$$

$$\Delta_{ij} = r_{ij} / \bar{\sigma}$$

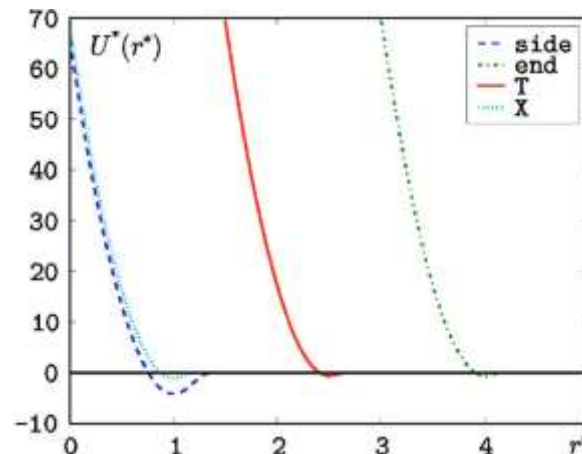


М'яке відштовхування



$$V_{ij} = \begin{cases} V_{\max} (1 - \Delta_{ij})^2, & \Delta_{ij} < 1 \\ V_{\max} (1 - \Delta_{ij})^2 + V_{attr}, & 1 \leq \Delta_{ij} < \Delta^* \\ 0, & \Delta_{ij} \geq \Delta^* \end{cases}$$

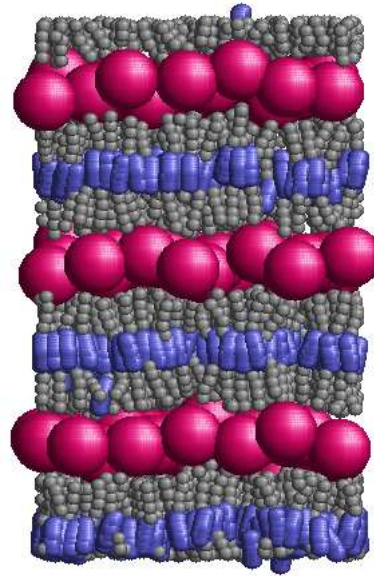
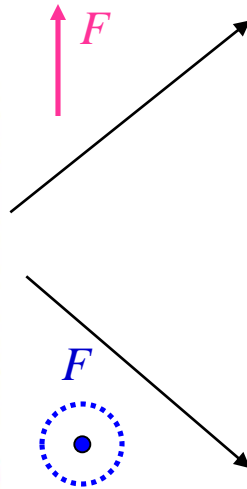
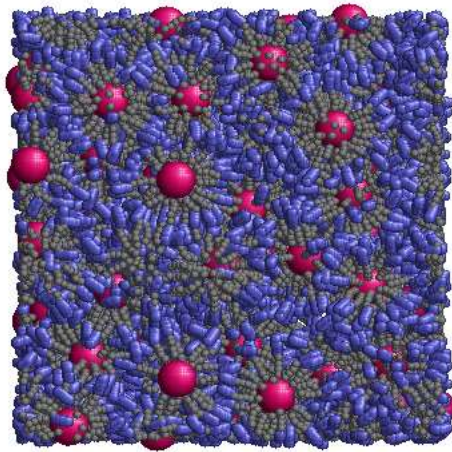
Z.Hughes et al, *Comp.Phys.Comm.* 178,724(2008);
H.Steuer, S.Hess, M.Schoen, *Physica A*, 2003, 328, 322.
J.Lintuvuori, M.R.Wilson, *J.Chem.Phys.* 128, 044906 (2008)



Відштовхування + анізотропне притягання

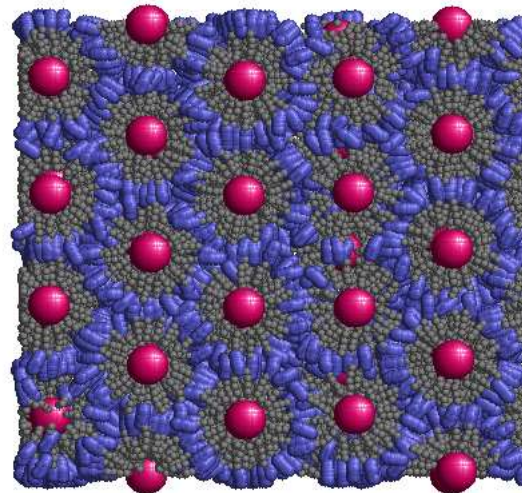
Послідовність отримання і аналізу впорядкованих фаз

1. Початкова неупорядкована фаза, $T=500K$
 $N_{mol}=100$

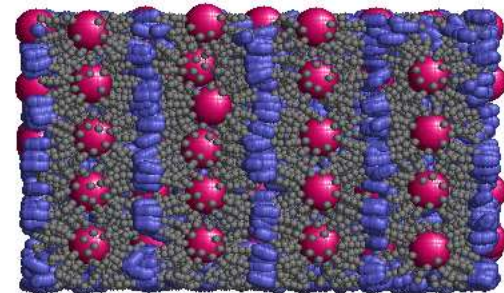


2. Шарувата смектична Фаза (одновісне поле, $T=500K$)

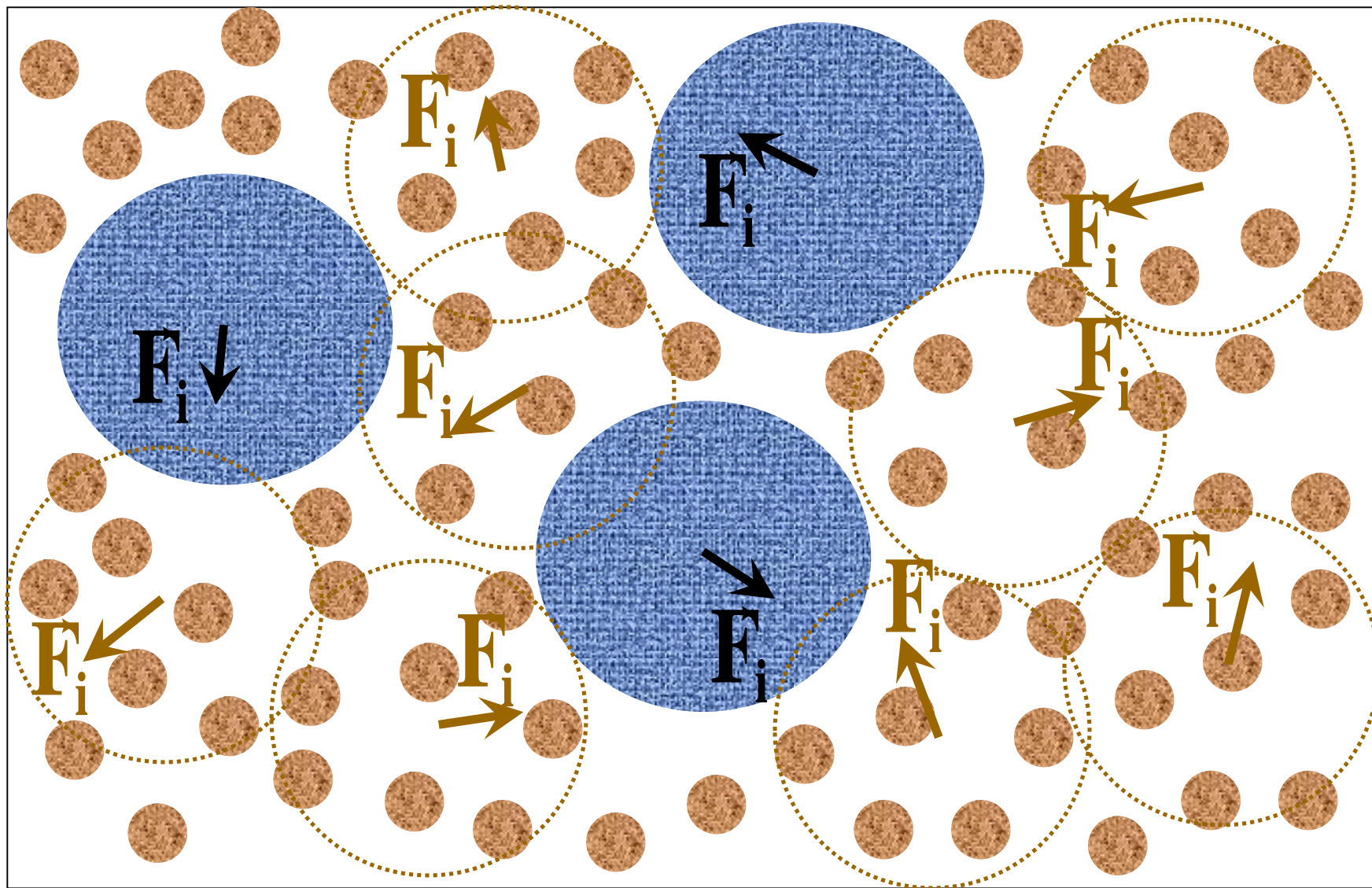
3. Дослідження області температурної стабільності отриманих фаз.



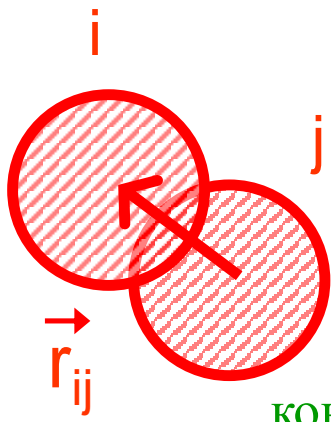
2. Стовпцева гексагональна фаза (планарне поле, $T=500K$)



Об'єкти моделювання методом дисипативної динаміки



Сили в методі дисипативної динаміки

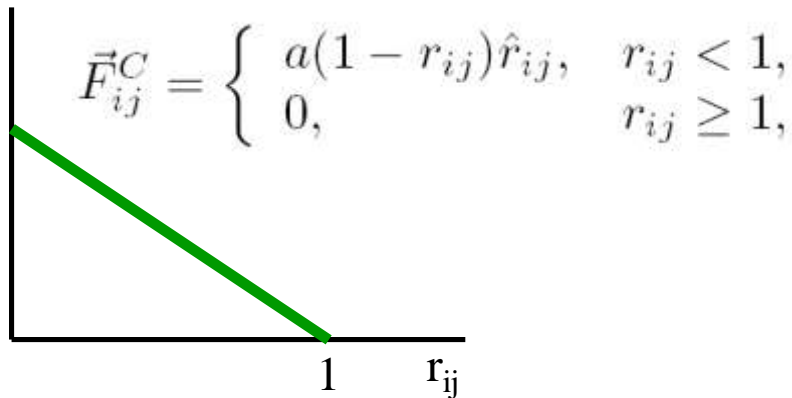


$$\vec{F}_{ij} = \vec{F}_{ij}^C + \vec{F}_{ij}^D + \vec{F}_{ij}^R + \vec{F}_{ij}^B$$

консервативна, м'яке
відштовхування

$a(1-r_{ij})$

a



дисипативна, тертя

$$\vec{F}_{ij}^D = -\gamma w^D(r_{ij})(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{v}_{ij})\hat{r}_{ij}$$

випадкова, термостат

$$\vec{F}_{ij}^R = \sigma w^R(r_{ij})\theta_{ij}\Delta t^{-1/2}\hat{r}_{ij}$$

гармонічні
зв'язки

$$\vec{F}_{ij}^B = -kr_{ij}\hat{r}_{ij}$$

Об'єкт дослідження: 

$$f_A = \frac{n_A}{n}, \quad f_B = \frac{n_B}{n}, \quad n = n_A + n_B = 10$$

Наявні програмні засоби:

gfortran – компілятор Fortran 90/95, компіляція програм:

```
gfortran -O3 -o dpd_init dpd_init.f90
```

```
gfortran -O3 -o dpd_2_4 dpd_2_4.f90
```

```
gfortran -O3 -o crd2pdb crd2pdb.f90
```

dpd_init - формування початкового розплаву діблок-кополімерів із часткою А-частинок f_A :

```
dpd_init fA //fA-параметер = 0.1, 0.2, ... 0.5
```

dpd_2_4 – програма дисипативної динаміки, старт (без параметрів, але потребує **dpd.inp**):

```
dpd_2_4
```

crd2pdb – створення файлу у форматі pdb для візуалізатора:

```
Crd2pdb 00500000_diblock_fA=0.1.coord 00500000_diblock_fA=0.1.pdb
```


Формат файлу параметрів симуляції:

"diblock copolymer"	<назва>
"NEW" "TDPD" "NONE" 100000	<"NEW", "CNT"> <> <> <к-сть кроків>
1.0 4.5 0.3	
000000000_diblock_fA=0.50.top	<файл топології: звідки читати>
000000000_diblock_fA=0.50.coord	<файл координат: звідки читати>
diblock_fA=0.50.top	<файл топології: куди записувати>
diblock_fA=0.50.coord	<файл координат: куди записувати>
1 1 1	
100 5000	<запис ТД стану> <запис координат>
0.04 1.0	
25. 40. 0.	<a_AA> <A_AB> <>
40. 25. 0.	<a_BA> <a_BB> <>
0. 0. 0.	<> <> <>
25. 25. 0.	
0.25 2.0	
0. 0. 0.	
0. 0. 0.	
0. 0. 0.	
0. 0. 0.	
"NON" "NON"	
"NON" "NON" "NON"	

Формат файлу координат:

0	5180	0	<крок>	<N частинок>	
0.12000000E+02	0.12000000E+02	0.12000000E+02	<Lx>	<Ly>	<Lz>
1	1		<i>	<тип>	
0.64070862E+01	0.38761056E+01	0.48132477E+01	<x>	<y>	<z>
0.40961301E+00	0.16812075E+01	0.75884946E-01	<vx>	<vy>	<vz>
2	1				
0.63228089E+01	0.36491133E+01	0.56800648E+01			
0.27975861E+00	-0.99469781E+00	-0.13900760E+01			
.....					
5180	2				
0.91651180E+01	0.11680859E+02	0.11310840E+02			
-0.16870924E+01	-0.76783011E-01	-0.38447857E+00			
12.0000	12.0000	12.0000			
0.00000	0.00000	0.00000			
0.00000	0.00000	0.00000			

Візуалізатор RasMol:

Часто-вживані команди:

В МЕНЮ:

Display/Spacefill

В командній стрічці:

```
set background white
set boundingbox on
color boundingbox black
spacefill 400
select 1
select 2
select all
restrict 1
```

План роботи:

- Компіляція Fortran-програм
- Створення папок для кожного значення f_A , копіювання в кожен скомпільованих програм і файлу параметрів dpd.inp.
- Генерування програмою dpd_init у кожній папці початкових файлів молекулярної топології *.top і координат *.coord, редагування файлу параметрів dpd.inp.
- Запуск симуляції у кожній папці.
- По закінченні – генерування *.pdb файлу із остаточного координатного файлу та його візуалізація Rasmol або візуалізація координатного файлу своєю утилітою.
- Систематизація візуалізованих морфологій у Word файл.

Лабораторна робота 4

Застосування коміркового автомату до вивчення порогу перколяції та до задач про поширення захворювань у епідеміології

Компартментні моделі

Набір груп

Диференціальні рівняння

Стаціонарні стани

Недоліки – ідеальна змішуваність

W.O.Kermack, A.G.McKendrick,

Proc. Roy. Soc. Lond. A 115 (1927) 700.

F.Brauer, Math.Biosci. 198 (2005) 119–131.

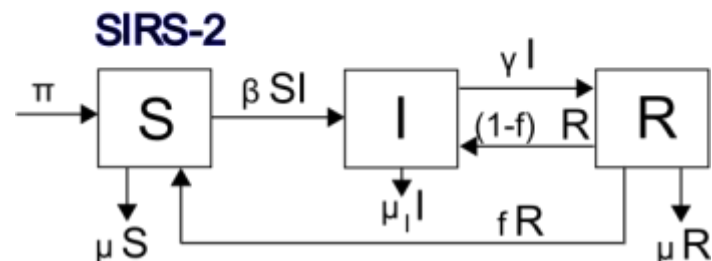
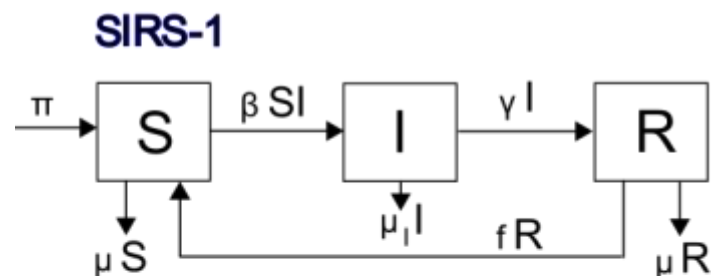
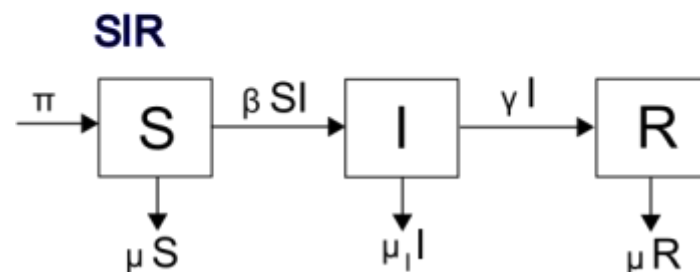
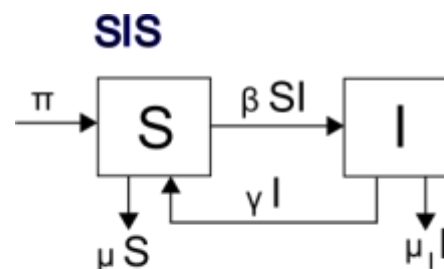
C. Ozcaglara et al. Math. Biosci. 236 (2012) 77–96.

Z.Hu, Z.Teng, H.Jiang, Nonlinear Analysis:

Real World Applications 13 (2012) 2017–2033.

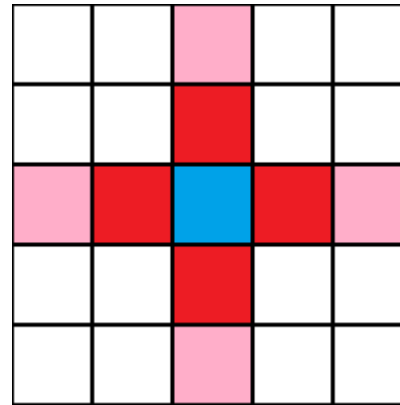
R.I.Hickson, G.N.Mercer, K.M.Lokuge,

PLoS ONE 7(4) (2012) e34411.

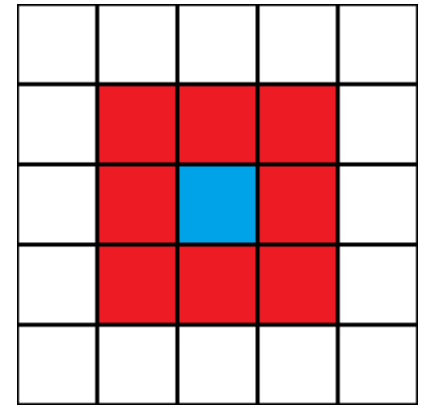


Коміркові автомати

- regular grid of cells
- finite # of states
- cell neighbourhood
- state change according to the state of neighbours



von Neumann
neighbourhood



Moore
neighbourhood

Conway Game of life (deterministic rules)

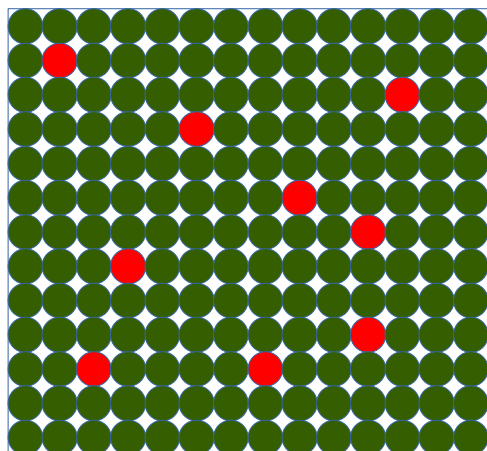
$$1 \rightarrow 0 \quad n(S=1) < 2 \text{ or } n(S=1) > 3 \quad \text{under- and overpopulation}$$
$$1 \rightarrow 1 \quad n(S=1) = \{2, 3\} \quad \text{survival}$$
$$0 \rightarrow 1 \qquad n(S=1)=3 \qquad \text{reproduction}$$

Просторові паттерни, осциляції, рухомі паттерни

Синхронный vs асинхронный

- Глобальне (синхронне) оновлення
- Локальне (миттєве) оновлення

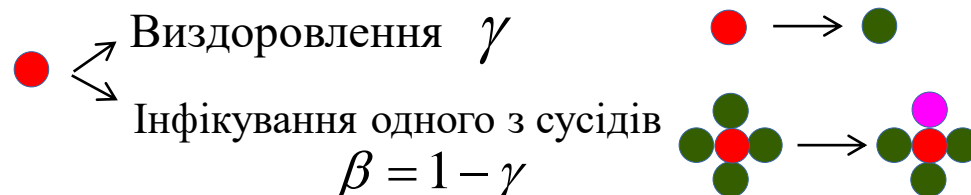
Вивчення залежності поширення інфекції в моделі SIS з різним радіусом поширення



Стани:

● сприйнятливі ● Інфіковані і інфективні

Дії:



Правила зміни станів:

● \rightarrow ● Видужання з імовірністю γ

● \rightarrow ● Інфікування з імовірністю $\beta \frac{n_I}{n}$

Critical behaviour

$\gamma = \gamma_c$ exists such that

$$I(t \rightarrow \infty) = 0$$

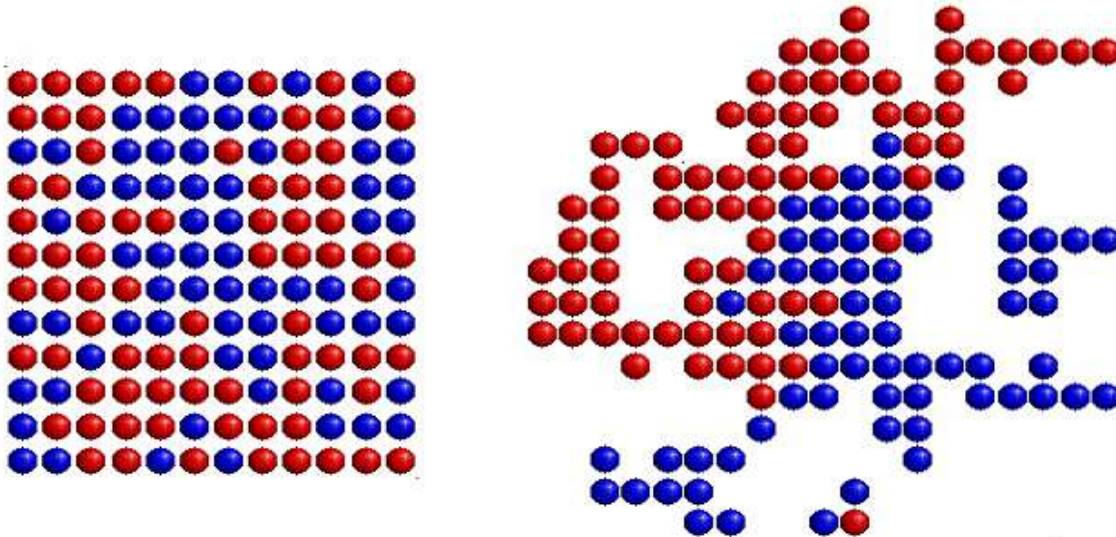
model	1d	2d sq	2d triang	3d	4d	5d	limit
q	2	4	6	6	8	10	
γ_c	0.233	0.377	0.392	0.432	0.456	0.468	0.5

Зріст радіусу інфікування (# сусідів q) зсуває γ_c в бік 0.5 (комп. модель)

Ідентифікація кластерів

$$s_k \in \{0,1\}, \quad c_k \in \{1, N_c\}$$

1. set $\{c_k := 0\}$, $m = 0$;
2. pick k th individual randomly with $s_k = 1$ and $c_k = 0$;
3. set $m := m + 1$, $c_k := m$, declare k as a newcomer;
4. loop over the cluster neighbourhoods $\{I\}$ of all newcomers;
5. if $s_I = 1$ then set $c_I := m$, declare I as a newcomer;
6. repeat steps 4-5 until no newcomers;
7. go to 2.



$$n_c = \frac{N_c}{N}$$

$$a_c = \frac{\langle S_m \rangle}{N}$$

$$l_c = \frac{1}{L} \max\{l_x, l_y\}$$

A diagram showing a cluster of red spheres. A horizontal double-headed arrow below the cluster is labeled l_x . A vertical double-headed arrow to the right of the cluster is labeled l_y .

$$m_c = \frac{\max\{S_m\}}{N}$$

План роботи:

- Створення коду коміркового автомату (Fortran чи C чи Python), компіляція.
- Вибір набору значень параметра контактності для аналізу поведінки моделі
- Комп'ютерне моделювання моделі SIS із найближчим сусідством (фон Ноймана)
- Пошук залежності критичного параметра виздоровності γ_c
- Комп'ютерне моделювання моделі SIS із послідовно зростаючим розміром найближчого сусідства і дослідження залежності критичного параметра виздоровності від розміру сусідства
- Візуалізація кластерів інфікованих індивідів
- Систематизація дослідження