

**Методичні вказівки
до лабораторних робіт
з курсу**

**Моделювання методами
першопринципної
молекулярної динаміки**

Робота з кластером ІФКС

Локальні комп'ютери - система Linux з графічною оболонкою Xwindows

Login: *****

Password: *****

startx - запуск Xwindows

Під'єднання до кластеру ІФКС через ssh протокол

ssh -p 2222 -X west.icmp.lviv.ua або ssh -X -p 2222 192.168.3.49

Загальні команди Linux:

cd SIMUL - перехід у директорію MATH

ls або lt - показати список файлів у директорії

exit або x - вихід з кластеру

make name - компіляція фортранівської програми name.f

vi name.f - редакування файлу name.f

./name - запуск програми name на рахунок

Робота з кластером ІФКС

Редактор vi - основні команди:

Клавіша Esc - перехід у командний режим

dd - знищення строки; x - знищення букви

5dd - знищення 5 строк

:q! - вихід з редактора без збереження змін

:wq - вихід з редактора із збереженням змін

yy - копіювати в буфер одну лінійку

5yy - копіювати в буфер 5 лінійок

p - вставка скопійованої в буфер інформації

Перехід у режим редагування:

i - вставка перед курсором

a - вставка після курсору

R - режим заміщення

O - вставка нової стрічки

s5 - заміна 5 символів

Основні принципи написання програм на мові Fortran

Стандартне закінчення:

.....

STOP

END

Поля: **позиції 1-5 - поле міток**

позиція 6 - продовження попередньої строки

позиції 7-72 – основне поле операторів

Масиви:

DIMENSION X(100),Y(100),Z(100)

STOP

END

Типи змінних:

по замовчанню якщо перша буква IJKLMN - це є ціла змінна

всі інші - дійсна змінна

Основні принципи написання програм на мові Fortran

Цикли:

```
DIMENSION X(100),Y(100),Z(100)
```

```
DO I=1,100  
  X(I)=REAL(I)  
ENDDO
```

```
STOP  
END
```

```
DIMENSION X(100),Y(100),Z(100)
```

```
DO I=1,100  
  X(I)=REAL(I)  
  IF(X(I).GT.50.0) GO TO 5 ! ЯКЩО(...) ПЕРЕЙТИ ДО 5  
ENDDO  
5 CONTINUE  
DO I=1,50  
  IF(X(I).GT.10.0) THEN ! ЯКЩО(...) ТОДІ  
    X(I)=X(I)*2.0 ! .....  
  ELSE ! В ПРОТИЛЕЖНОМУ ВИП.  
    X(I)=X(I)+2.0 ! .....  
  ENDIF ! ЗАКІНЧЕННЯ  
ENDDO
```

```
STOP  
END
```

Умови:

Основні принципи написання програм на мові Fortran

```
DIMENSION X(100),Y(100),Z(100)
```

Зовнішні файли:

Считування/Запис

```
OPEN(01,FILE='INPUT')
OPEN(09,FILE='OUTPUT')
DO I=1,100
  READ(01,101) X(I)
  X(I)=X(I)*SQRT(2.0)
ENDDO
DO I=1,100
  WRITE(09,102) I,X(I)
ENDDO
```

**Формат считування
або запису**

```
101 FORMAT(E14.6)
102 FORMAT(I5,E12.4)
```

```
STOP
END
```

Мінімізація повної енергії для заданої конфігурації іонів

1. Задати двоатомну об'ємоцентровану ґратку Na.
2. Взяти псевдопотенціал Na в наближенні LDA
3. Використати енергію обрізання плоских хвиль за замовчуванням у файлі параметрів
4. Задати початкову сталу оцк ґратки $a=4.6$ Ангстрема
5. Запустити мінімізацію повної енергії та оцінити кількість ітерацій, необхідних для збіжності.
6. З кроком 0.1 А зробити подібну процедуру для оцк ґратки Na в діапазоні $a=3.8-4.6$ А
7. Побудувати графік залежності $E(a)$, встановити положення мінімуму (рівноважну сталу ґратки з прведених розрахунків) та порівняти з табличним значенням 4.23 А

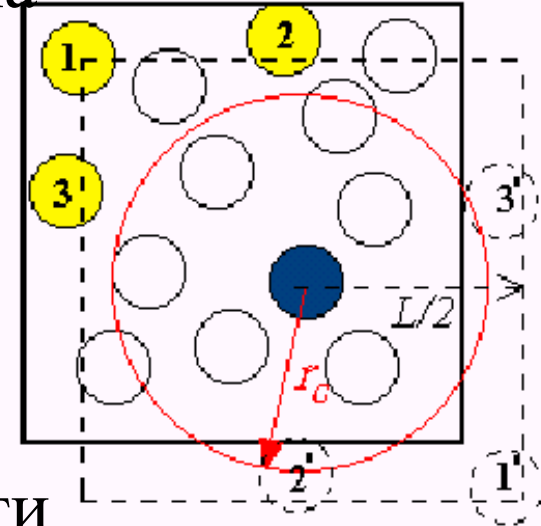
Збіжність повної енергії системи від енергії обрізання для плоских хвиль у розкладі хвильових функцій

1. Задати двоатомну об'ємоцентровану ґратку Na.
2. Взяти псевдопотенціал Na в наближенні LDA
3. Енергію обрізання плоских хвиль у файлі параметрів задавати в області 400 eV – 1200 eV з кроком 200 eV.
4. Побудувати графік залежності $E_{\text{LDA}}(E_{\text{cut-off}})$
5. Оцінити зростання обчислювального часу із зростанням енергії обрізання та точність обрахунку повної енергії

Розрахунок функцій розподілу

Для конфігурацій з $N=300$ атомів розплаву Mg розрахувати парні функції розподілу.

1. Робиться цикл по N частинках : $I=1,N$
2. Розраховуються відстані R_{ij} між I -ю та всіма іншими частинками
3. Враховуються періодичні граничні умови
4. При попаданні R_{ij} у проміжок між r і $r+\Delta r$ сума збільшується на 1
5. Кінцеву сумарну функцію від r пронормувати на об'єм між r і $r+\Delta r$ та усереднити на N частинок



Розрахунок величин за допомогою функцій розподілу

$$n_{ij}(r) = \frac{4\pi N_i}{V} \int_0^r g_{ij}(r') r'^2 dr'$$

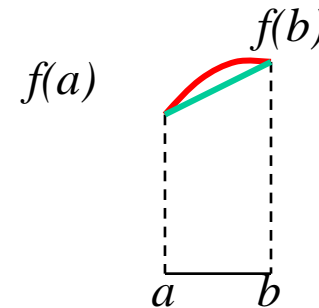
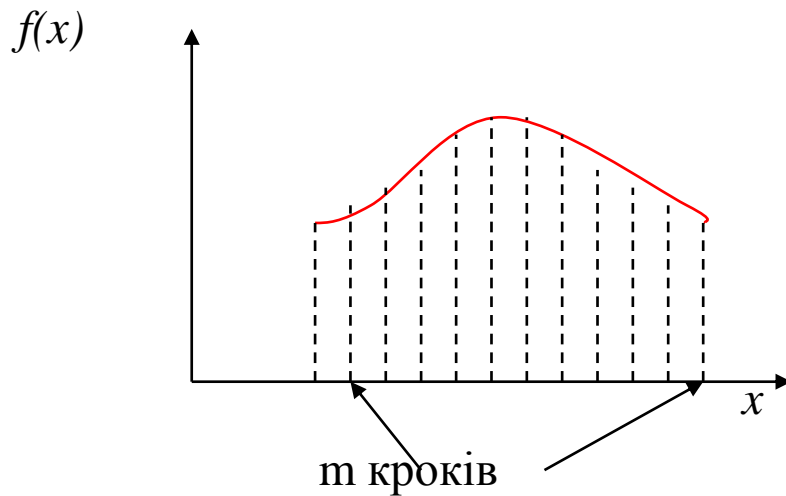
Біжуче (залежне від відстані) число сусідів і-го сорту навколо частинок j-го сорту

$$S(k) = 1 + \frac{4\pi N}{V} \int_0^{\infty} (g(r) - 1) \frac{\sin(kr)}{kr} r^2 dr$$

Структурний фактор

Методи чисельного інтегрування

Формула трапецій.



Площа однієї трапеції:

$$S_{tr} = \frac{(b-a)}{2} [f(a) + f(b)]$$

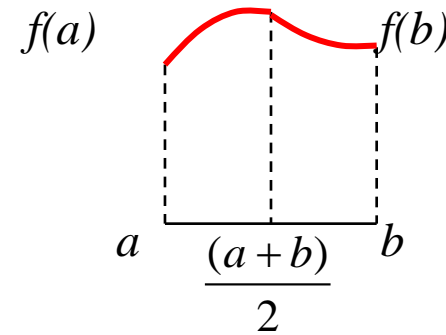
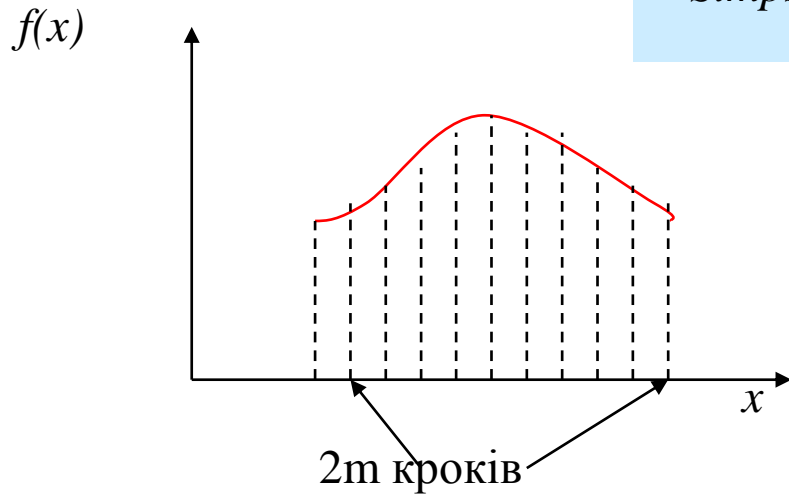
Формула трапецій для інтегрування функцій з постійним кроком:

$$\int_A^B f(x) dx = \frac{(B-A)}{2m} [f_0 + 2f_1 + 2f_2 + \dots + 2f_{m-1} + f_m]$$

Методи чисельного інтегрування

Формула Сімпсона.

$$S_{Simpson} = \frac{(b-a)}{6} [f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)]$$



Формула Сімпсона для інтегрування функцій з постійним кроком:

$$\int_A^B f(x) dx = \frac{(B-A)}{6m} [f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 \dots + 4f_{2m-1} + f_{2m}]$$

Середньоквадратичні зміщення

$$\langle \Delta r^2(t) \rangle = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N [\vec{r}_i(t) - \vec{r}_i(t=0)]^2 \right\rangle$$

Зв'язок середньоквадратичних зміщень з коефіцієнтом самодифузії

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle \Delta r^2(t) \rangle}{6t}$$

УВАГА!!! Траєкторії $r(t)$ потрібно перевести у форму без періодичних граничних умов!!!

Зв'язок середньоквадратичних зміщень з автокореляційною функцією швидкостей

$$\langle \Delta r^2(t) \rangle = \frac{6k_B T}{m} \int_0^t \psi(\tau)(t - \tau) d\tau$$

Чисельна перевірка:

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \langle \Delta r^2(t) \rangle \approx \psi(t)$$

Різницева схема:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \Big|_{t=t_n} \approx \frac{f_{n+1} - 2f_n + f_{n-1}}{\Delta t^2}$$

Тиск з першопринципних симуляцій

Увага! Різні пакети дають тензор напружень в різних одиницях (!) або в одиницях тиску (кбар, Па,) або домножені на об'єм (енергія, eV, ...)

$$\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zx} & \sigma_{zz} \end{pmatrix}$$

Якщо недіагональні елементи тензора напружень виходять нерівними, наприклад $\sigma_{xy} \neq \sigma_{yx}$, то в площині XY відбувається ротаційний рух

$$P = \frac{1}{3} (\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz})$$

Розрахунки зсувної та об'ємної в'язкості, пружних модулів

Компоненти тензора напружень для центральних сил

в класичній МД

$$\sigma_{\alpha\beta}(t) = m \sum_{i=1}^N v_i^\alpha(t) v_i^\beta(t) + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N r_{ij}^\alpha(t) F_{ij}^\beta(t)$$

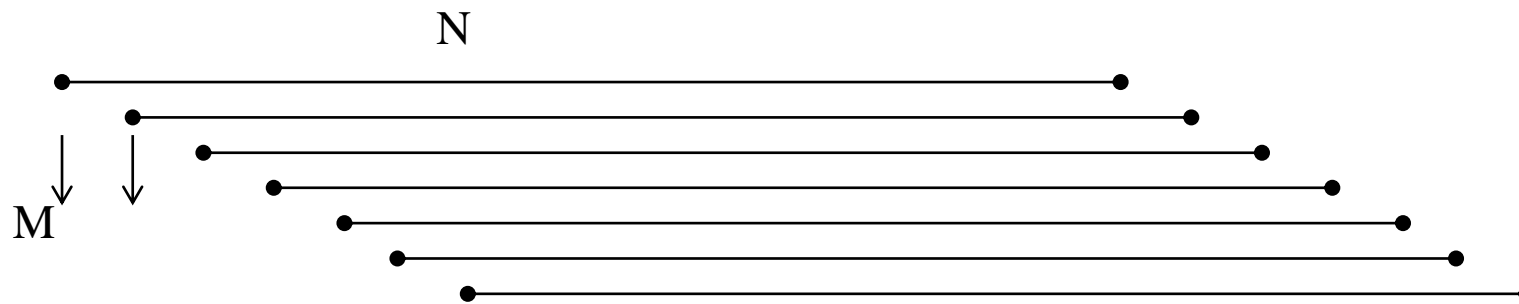
Для АІМД цей вираз не підходить, оскільки вираз для повної енергії системи в АІМД не відповідає лише внескам від іонів (атомів). Компоненти тензора напружень можна отримати як

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{\Omega} \frac{\partial E}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}}$$

Розрахунок автокореляційних функцій

Алгоритм розрахунку часових кореляційних функцій зсувних напружень

1. Задається довжина N часової кореляційної функції та відстань M між початковими моментами ($t=0$)



2. Для кожного початкового моменту ($I=1$) розраховується N добутків $\sigma_{xy}(1)\sigma_{xy}(I)$, $I=1,N$

3. Результат нормується на кількість усереднень по ансамблю автокореляційних функцій з різними початками

Розрахунки зсувної в'язкості рідини

Формула Гріна-Кубо для зсувної в'язкості

$$\eta_s = \frac{V}{k_B T} \int_0^{\infty} \langle \sigma_{xy}(t) \sigma_{xy}(0) \rangle dt$$

$$V = L^3$$

Одноекспонентне наближення для автокореляційної функції - порівняти з розрахунками з AIMD

$$\frac{V}{k_B T} \langle \sigma_{xy}(t) \sigma_{xy}(0) \rangle = G_{\infty} e^{-t/\tau}$$