

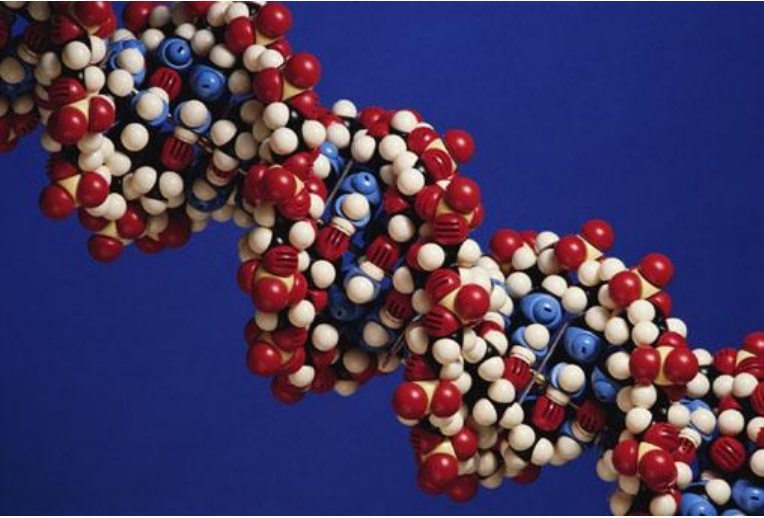
Комп'ютерне моделювання фізичних процесів

Брик Тарас Михайлович

**Інститут фізики конденсованих систем
НАН України**

Зимовий семестр 2006, НУ "Львівська Політехніка"

Л.1 Предмет комп'ютерного МОДЕЛЮВАННЯ



Література:

1. D.Frenkel, B.Smit. *Understanding Molecular Simulation*. Academic Press. SanDiego, 1996 ----- Інтернет, djv-file
2. Х.Гулд, Я.Тобочник. *Компьютерное моделирование в физике*. В 2-х томах. “Мир”, М., 1990 ----- Бібліотека
3. Д.В.Хеерман. *Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике*. “Наука”, М., 1990 ----- Бібліотека

Методи комп'ютерного моделювання

1. Метод Монте-Карло

Моделювання систем
N класичних частинок

2. Молекулярна динаміка

Моделювання системи
N ланжевенівських
частинок, занурених у
суцільне середовище

3. Броунівська динаміка

4. Дисипативна динаміка частинок

5. *Ab initio* молекулярна динаміка

Моделювання системи
N макрочастинок

6. *Path integral* молекулярна динаміка

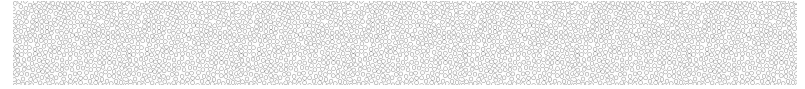
7. Квантовий метод Монте-Карло

Моделювання системи
N класичних іонів,
занурених в квантову
електронну рідину

Моделювання систем
N квантових частинок

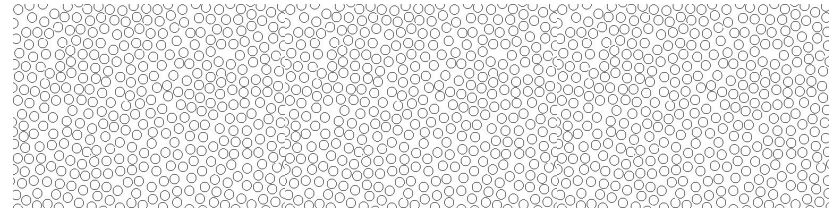
Три масштаби моделювання процесів у конденсованих системах

- суцільне середовище (немає атомної структури)

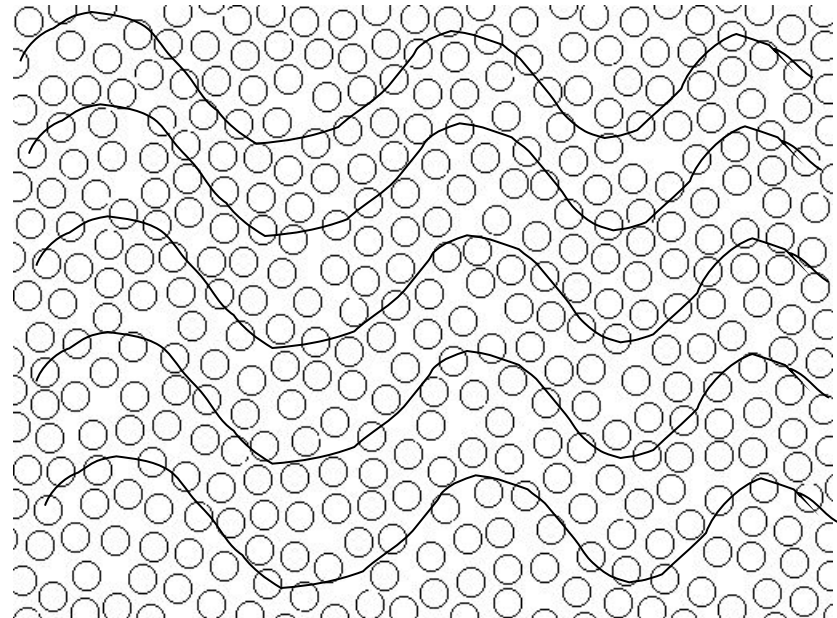


- статистична механіка

атомних систем



$$L \gg \bar{a}$$



- атоми + електронна густина



Суперкомп'ютери

Паралельна архітектура суперкомп'ютерів та мінімальний час обміну даними між вузлами роблять їх на кілька порядків потужнішими за персональні комп'ютери

Рекордна кількість процесорів більше 130 тисяч (!!!) в машині IBM BlueGene

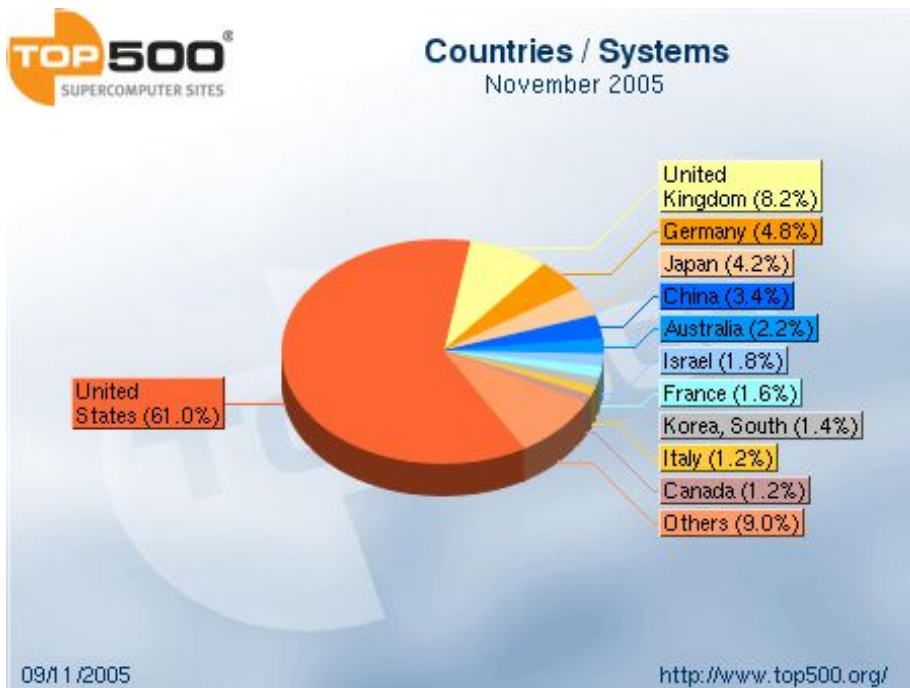
Cray

IBM Power4

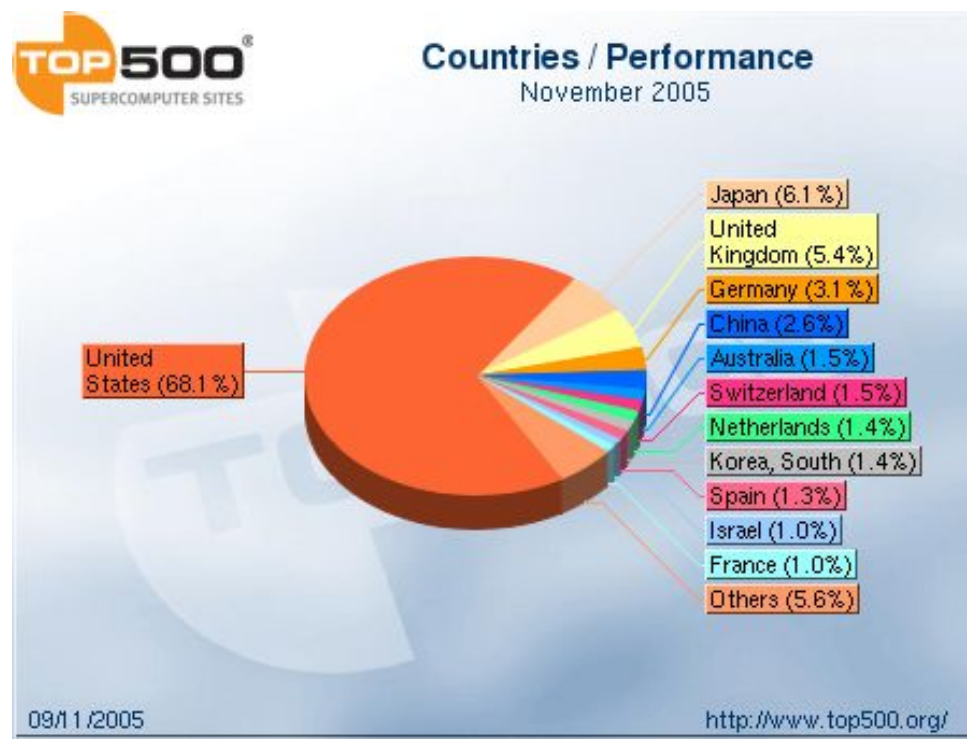


Суперкомп'ютери

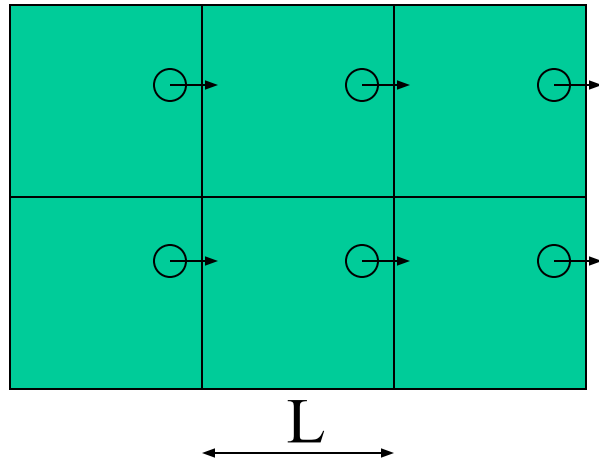
Розподіл кількості суперкомп'ютерів по країнах



Розподіл потужності суперкомп'ютерів по країнах

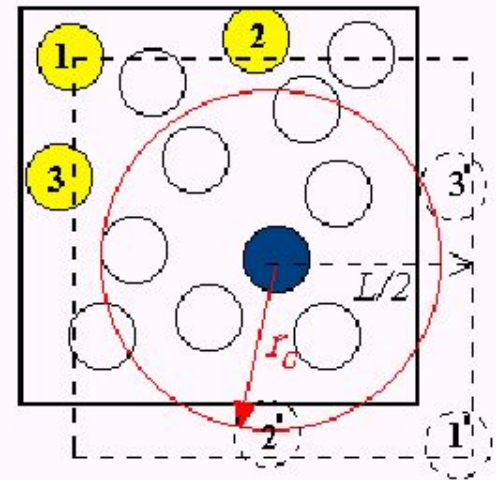
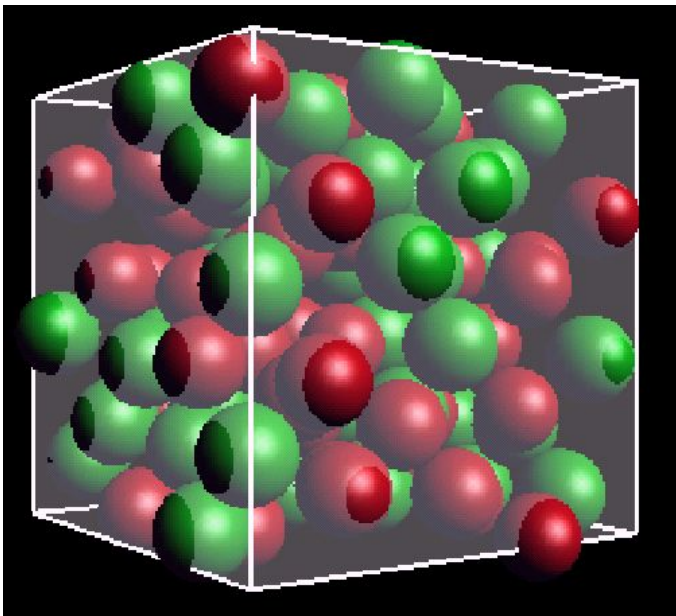


Періодичні граничні умови



Для кубічної комірки періодичності об'єм $V=L^3$ визначається заданою густиною системи ρ та числом частинок N , вибраним для моделювання

$$V = \frac{m_a N}{\rho}$$



Ефективні потенціали міжчастинкової взаємодії

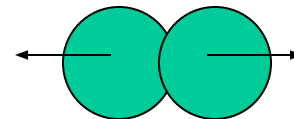
Існують **фундаментальні** та **ефективні** взаємодії між частинками.

Фундаментальні – це основні (первинні) взаємодії в природі.

Прикладом **фундаментальної** взаємодії є кулонівська потенціальна енергія взаємодії двох точкових зарядів у вакуумі на відстані r_{12}

$$U_{Coulomb}(r_{12}) = \frac{z_1 z_2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}$$

Ефективні взаємодії – це вторинні взаємодії, в яких “ефективно” враховується середовище, в якому знаходяться взаємодіючі частинки. Приклад – екранована кулонівська взаємодія, чи відштовхування двох атомів на близьких відстанях через перекриття їх електронних хмарин



Ефективні потенціали міжчастинкової взаємодії

Найпростіші ефективні взаємодії :

- взаємодія твердих кульок

$$U_{HS}(r_{12}) = \begin{cases} \infty & r_{12} \leq \sigma \\ 0 & r_{12} > \sigma \end{cases}$$

σ є ефективним радіусом частинки

- взаємодія м'яких кульок

$$U_{SS}(r_{12}) = 4\varepsilon \left(\frac{\sigma}{r_{12}} \right)^{12}$$

Ефективні потенціали міжчастинкової взаємодії

- взаємодія Ленард-Джонса

$$U_{LJ}(r_{12}) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{12}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{12}} \right)^6 \right]$$

Добре описує поведінку атомів газоподібних систем:

Ar, Kr, Xe, Ne ...

- взаємодія псевдоатомів у металах через електронну густину

$$U_{metallic}(r_{12}) \propto \frac{\cos(k_c r_{12})}{r_{12}^3}$$

- добре описує так звані Фріделівські осциляції електронної густини на великих відстанях у одно- та двовалентних металах Cs, Rb, Be, Mg ...