

Уменьшения времени динамической памяти при добавлении термостатов в уравнения движения.

В.А. Петров^{1,2}, Г.Э. Норман^{1,2}

¹ Объединенный институт высоких температур РАН

² Московский физико-технический институт

VitaliyPetrov18@gmail.com

Временем динамической памяти t_m^d называется характерный для молекулярно-динамической (МД) системы временной промежуток, по истечении которого разбегание координат частиц переходит в диффузионный режим, а разбегание скоростей выходит на постоянную величину [1]. Значение t_m^d определяется как состоянием и свойствами системы, так и точностью численного интегрирования.

В данной работе рассматривается пример системы, в которой взаимодействие между частицами описывается потенциалом Леннарда-Джонса. Проводится расчет времени динамической памяти и находится его изменение при включении термостата при прочих равных условиях. Рассмотрены два термостата: Берендсена и Ланжевена. Ищутся зависимости произведения Kt_m^d от значения подвижности B (термостат Ланжевена) и коэффициента вязкого трения g (термостат Берендсена). K – значение К-энтропии, которое определяется состоянием и свойствами системы. Включение термостатов уменьшает величину t_m^d , поскольку точность численной схемы и, соответственно, определения МД траекторий при этом снижается.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках научного проекта 14-19-01295.

Литература

1. *Норман Г.Э., Стегайлов В. В.* Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики // Математическое моделирование. 2012. Т.24, №6, С.3-44