

Semana 2: Dinámica molecular, Potenciales interatómicos, Integración de las ecuaciones de Newton y aplicaciones

Camilo Espejo¹

camilo.espejo@utadeo.edu.co

¹Maestría en Modelado y Simulación

Departamento de Ciencias Básicas, Universidad Jorge Tadeo Lozano

9 de agosto de 2014



Curso optativo 1:
M&S de Sistemas Naturales

Sumario

Dinámica molecular

introducción

Integración de las ecuaciones de Newton

Aplicaciones

Configuración en equilibrio de moléculas

Dinámica molecular

Introducción

- ▶ Las ecuaciones de movimiento de Newton son integradas numéricamente para $N \sim 100 - 10000$ partículas.

Dinámica molecular

Introducción

- ▶ Las ecuaciones de movimiento de Newton son integradas numéricamente para $N \sim 100 - 10000$ partículas.
- ▶ Se comienza con una configuración Γ que representa todas las posiciones y velocidades del sistema.

$$\Gamma = (x_1, x_2, \dots, x_N, v_1, v_2, \dots, v_N)$$

Dinámica molecular

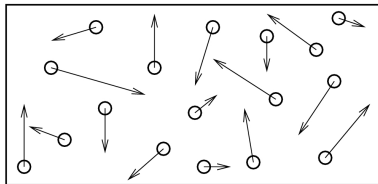
Introducción

- ▶ Las ecuaciones de movimiento de Newton son integradas numéricamente para $N \sim 100 - 10000$ partículas.
- ▶ Se comienza con una configuración Γ que representa todas las posiciones y velocidades del sistema.

$$\Gamma = (x_1, x_2, \dots, x_N, v_1, v_2, \dots, v_N)$$

- ▶ En el equilibrio se pueden obtener promedios temporales de cantidades importantes sobre un intervalo de tiempo $t_0 < t < t_0 + \tau$:

$$\bar{A} = \lim_{\tau \rightarrow \text{inf}} \frac{1}{\tau} \int_{t_0}^{t_0 + \tau} \mathcal{A}(\Gamma(t)) dt$$



Dinámica molecular

Flujo de la simulación

1. Definir configuración inicial Γ_0 .

Dinámica molecular

Flujo de la simulación

1. Definir configuración inicial Γ_0 .
2. Calcular las fuerzas sobre todas las partículas:

$$f_\alpha(\mathbf{r}) = -\frac{\partial\Phi(\mathbf{r})}{\partial\mathbf{r}_\alpha}, \quad \alpha = (x, y, z)$$

Dinámica molecular

Flujo de la simulación

1. Definir configuración inicial Γ_0 .
2. Calcular las fuerzas sobre todas las partículas:

$$f_{\alpha}(r) = -\frac{\partial\Phi(r)}{\partial r_{\alpha}}, \quad \alpha = (x, y, z)$$

3. Obtener nuevas posiciones y velocidades por integración de las ecuaciones de Newton:

$$\mathbf{F}_i = m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt}, \quad \mathbf{v}_i = \frac{d\mathbf{r}_i}{dt}$$

Dinámica molecular

Flujo de la simulación

1. Definir configuración inicial Γ_0 .
2. Calcular las fuerzas sobre todas las partículas:

$$f_\alpha(r) = -\frac{\partial\Phi(r)}{\partial r_\alpha}, \quad \alpha = (x, y, z)$$

3. Obtener nuevas posiciones y velocidades por integración de las ecuaciones de Newton:

$$\mathbf{F}_i = m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt}, \quad \mathbf{v}_i = \frac{d\mathbf{r}_i}{dt}$$

4. Repetir los pasos 2 y 3.

Dinámica molecular

Flujo de la simulación

1. Inicialización

$$E_{kin} = \sum_{i=1}^N \frac{m\mathbf{v}_i^2}{2} = \frac{3NK_B T}{2}, \quad d \geq \sigma, \quad \mathbf{v}_i \in [-1, 1] \rightarrow \mathbf{P} = 0$$

2. Cálculo de fuerzas: $N(N - 1)/2$ interacciones o r_{cut}

Integración de las ecuaciones de Newton

Algoritmo de Verlet

Expansión de Taylor

$$f(x+a) = f(x) + \left(\frac{df}{dx}\right)_x a + \frac{1}{2!} \left(\frac{d^2f}{dx^2}\right)_x a^2 + \dots + \frac{1}{n!} \left(\frac{d^n f}{dx^n}\right)_x a^n + \dots$$

Integración de las ecuaciones de Newton

Algoritmo de Verlet

Expansión de Taylor

$$f(x+a) = f(x) + \left(\frac{df}{dx}\right)_x a + \frac{1}{2!} \left(\frac{d^2f}{dx^2}\right)_x a^2 + \dots + \frac{1}{n!} \left(\frac{d^n f}{dx^n}\right)_x a^n + \dots$$

Verlet:

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(t)\Delta t + \frac{\mathbf{f}(t)}{2m}\Delta t^2 + \frac{\partial^3 \mathbf{r}}{\partial t^3} \frac{\Delta t^3}{3!} + \mathcal{O}(\Delta t^4)$$

$$\mathbf{r}(t - \Delta t) = \mathbf{r}(t) - \mathbf{v}(t)\Delta t + \frac{\mathbf{f}(t)}{2m}\Delta t^2 - \frac{\partial^3 \mathbf{r}}{\partial t^3} \frac{\Delta t^3}{3!} + \mathcal{O}(\Delta t^4)$$

Sumandolas y restando $\mathbf{r}(t - \Delta t)$ a ambos lados:

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = 2\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(t - \Delta t) + \frac{\mathbf{f}(t)}{m}\Delta t^2 + \mathcal{O}(\Delta t^4)$$

No se usa la velocidad para calcular la posición. (Mostrar que se conserva el momentum y la energía total).

Integración de las ecuaciones de Newton

Algoritmo de velocidad de Verlet

Buen algoritmo

- ▶ Rápido y bajo uso de memoria.
- ▶ Suficientemente preciso para pasos de tiempo largos.
- ▶ Conservación del momentum y de la energía.
- ▶ Reversible en el tiempo.

Integración de las ecuaciones de Newton

Algoritmo de velocidad de Verlet

Buen algoritmo

- ▶ Rápido y bajo uso de memoria.
- ▶ Suficientemente preciso para pasos de tiempo largos.
- ▶ Conservación del momentum y de la energía.
- ▶ Reversible en el tiempo.

Método de Euler no satisface 3.

Verlet para la velocidad:

$$\begin{aligned}\mathbf{r}(t + \Delta t) &= \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(t)\Delta t + \frac{\mathbf{f}(t)}{2m}\Delta t^2 \\ \mathbf{v}(t + \Delta t) &= \mathbf{v}(t) + \frac{\mathbf{f}(t + \Delta t) + \mathbf{f}(t)}{2m}\Delta t\end{aligned}\quad (1)$$

Aplicaciones

Búsqueda del equilibrio

- ▶ En lugar de simular el movimiento de las partículas se busca la configuración de mínima energía:

$$E_{pot} = \sum_{i < j} \phi_{i,j}(r_{i,j})$$

Aplicaciones

Búsqueda del equilibrio

- ▶ En lugar de simular el movimiento de las partículas se busca la configuración de mínima energía:

$$E_{pot} = \sum_{i < j} \phi_{i,j}(r_{i,j})$$

- ▶ No se requiere integrar las ecuaciones de Newton sino buscar un mínimo en una superficie multidimensional.

Aplicaciones

Búsqueda del equilibrio

- ▶ En lugar de simular el movimiento de las partículas se busca la configuración de mínima energía:

$$E_{pot} = \sum_{i < j} \phi_{i,j}(r_{i,j})$$

- ▶ No se requiere integrar las ecuaciones de Newton sino buscar un mínimo en una superficie multidimensional.
- ▶ Ejemplo: Moleculas con Avogadro.