

שאלות הכנה – מעבדה 2 Hypre-Chem

Classical Molecular Dynamics

1. אילו סוגי סימולציות יבוצעו במעבדה? מי מהם עשוי למצוא מינימום גלובלי?
2. אילו מהסימולציות הן דטרמיניסטיות ואילו הן סטוכסטיות?
3. מהו תהליך ארגודי?
4. בהרצת classical MD, לפי אילו חוקים מתקדמת המערכת בזמן? כיצד מתקבלים צעדים בסימולצית Monte-Carlo?
5. במעבדה זו תחשבו מערכת עם וללא ממש. מהם ההבדלים אשר אתם מצפים למצוא?
6. את הממש ניתן להציג בצורה implicit ו-explicit. מה היתרונות של כל הצגה?
7. בחישוב סימולציות המערכת מוצבת בתוך "קופסה". איך בוחרים את מימדי הקופסה? מהם PBC (periodic boundary conditions)?