

MÔ PHỎNG ĐỘNG LỰC PHÂN TỬ KHẢO SÁT CHUYỂN ĐỘNG CỦA CÁC ION TRONG AGI

Nguyễn Thị Hồng Minh

Khoa Toán - Cơ - Tin học

Trường Đại học Khoa học Tự nhiên

Đại học Quốc gia Hà Nội

Tóm tắt: Sự phát triển mạnh mẽ của máy tính hỗ trợ một lĩnh vực nghiên cứu mới mẻ và rất có triển vọng trong việc nghiên cứu khoa học tự nhiên đó là mô phỏng máy tính (*Computer Simulation - CS*). CS có vai trò cầu nối giữa hai lĩnh vực nghiên cứu truyền thống trước đây là lý thuyết và thực nghiệm.

Mô phỏng động lực phân tử (*Molecular Dynamics Simulation - MDS*) là một kỹ thuật CS nhằm nghiên cứu sự biến đổi theo thời gian của một hệ tương tác n vật với công việc chủ yếu là tích phân phương trình chuyển động của hệ. Trong bài này chúng tôi sẽ giới thiệu một số nét cơ bản của kỹ thuật MDS, một số kết quả mô phỏng sử dụng MDS mà chúng tôi đã thực hiện trong việc nghiên cứu chuyển động của các ion trong vật liệu siêu dẫn iốt bạc (*superionic conductor AgI*) với một số mô hình máy tính khác nhau.

1. Giới thiệu

Trong nghiên cứu khoa học tự nhiên, hai hướng nghiên cứu truyền thống là lý thuyết và thực nghiệm. Sự phát triển mạnh mẽ của kỹ nghệ chế tạo máy tính với sự ra đời của những thế hệ máy mới có tốc độ tính toán cực nhanh đã hỗ trợ các hướng nghiên cứu khoa học tính toán, trong đó có một ngành mới là mô phỏng bằng máy tính (*Computer Simulation- CS*).

Từ các mô hình của hệ thống thực (*real system*) chủ yếu là dưới dạng các phương trình, hệ phương trình toán học, máy tính với khả năng tính toán nhanh và độ chính xác cao sẽ hỗ trợ việc giải các mô hình. Các kết quả tính toán bằng máy tính có thể so sánh với các kết quả thực nghiệm để rút ra những kết luận về tính đúng đắn của mô hình. So sánh với các kết quả lý thuyết có thể cho chúng ta các kiểm chứng về các dự đoán lý thuyết và dự báo các khả năng của hệ thống thực. Nói tóm lại mô phỏng bằng máy tính hỗ trợ những nghiên cứu chi tiết về một hệ thống tương tác.

Một số phương pháp mô phỏng có thể nhắc đến là: Các phương pháp Monte-Carlo, động lực Brown (*Brownian Dynamics*), động lực phân tử (*Molecular Dynamics*)... Khác với phương pháp mô phỏng ngẫu nhiên Monte-Carlo, MDS là một kỹ thuật mô phỏng xác định. Tuy nhiên khối lượng tính toán trong kỹ thuật là rất lớn, tại mỗi bước tích phân số tương tác của hệ n vật lên tới $n(n-1)$, như vậy độ phức tạp tính toán sẽ tăng lên rất nhiều theo số bước lấy tích phân hay theo khoảng thời gian cần khảo sát sự biến đổi của hệ được nghiên cứu. Trong bài này chúng tôi sẽ giới thiệu một số nét cơ bản của kỹ thuật MDS (mục 2), một số kết quả mô phỏng sử dụng MDS mà chúng tôi đã thực hiện trong việc nghiên cứu chuyển động của các ion trong vật liệu siêu dẫn iốt bạc (*superionic conductor AgI*) với một số mô hình máy tính khác nhau (mục 3). Các kết quả mà chúng tôi đã thu được qua quá trình tính toán bao gồm: Hàm phân bố vị trí vị trí của các ion Ag^+ và I^- ; Quỹ đạo chuyển động của các ion; Độ chuyển dịch trung bình của các ion (mục 3.2). Cuối cùng chúng tôi trình bày một số hướng nghiên cứu có thể phát triển xung quanh kỹ thuật mô phỏng này trong điều kiện ở Việt Nam hiện nay.

2. Mô phỏng động lực phân tử (MDS)

2.1. MDS là gì?

MDS là một kỹ thuật mô phỏng được sử dụng để nghiên cứu sự biến đổi theo thời gian của hệ tương tác nhiều vật (*many-body*). Yếu tố căn bản nhất của kỹ thuật MDS là xác định được thế năng tương tác

giữa các vật trong hệ được xét. Thế năng tương tác có thể có rất nhiều dạng, từ đơn giản như tương tác hấp dẫn giữa các ngôi sao, hành tinh trong vũ trụ đến phức tạp như tương tác nhiều chiều giữa các phân tử và nguyên tử trong các vật chất cụ thể, đặc biệt là các phân tử sinh học.

Từ biểu diễn của thế năng ta có thể xác định được lực tương tác và phương trình chuyển động của các vật. Việc giải phương trình chuyển động sẽ cho ta những kết quả chi tiết về cấu hình của hệ tại mỗi thời điểm.

Có hai đặc trưng quan trọng làm MDS trở nên được quan tâm trong nhiều ứng dụng. Quá trình mô phỏng bằng MD giúp ta tìm hiểu được chuyển động riêng của mỗi thành phần (mỗi hạt) trong hệ thống như một hàm theo thời gian. Thế năng tương tác sử dụng trong mô phỏng là xấp xỉ, chúng có thể được thay đổi, điều chỉnh trong quá trình tính toán.

2.2. Phương trình chuyển động và thế năng tương tác

Trong mô phỏng động lực phân tử sự biến đổi theo thời gian của các hạt trong hệ thống được nghiên cứu qua việc tính tích phân phương trình chuyển động của chúng. Phương trình chuyển động được sử dụng phổ biến trong các tính toán hiện nay là phương trình chuyển động Newton:

$$a_i(t) = \frac{F_i(t)}{m_i} \quad (1)$$

trong đó m_i là khối lượng, a_i là gia tốc và F_i là lực tác động lên hạt thứ i . Biểu thức tính lực sẽ được xác định thông qua đạo hàm riêng của thế năng theo khoảng cách như sau:

$$F_i(t) = \frac{\partial V(t)}{\partial r_i(t)} \quad (2)$$

Dạng đơn giản nhất của thế năng sẽ được biểu diễn bằng tổng các thế năng cặp đôi giữa từng cặp hạt trong hệ:

$$V = \sum_i \sum_{j>i} \phi_{ij} \quad (3)$$

với ϕ_{ij} là thế năng tương tác cặp đôi giữa hạt thứ i và hạt thứ j . Ngoài ra thế năng có thể được xác định có tính đến các tương tác cặp ba hoặc hơn nữa. Thế năng tương tác cặp đôi được sử dụng phổ biến trong tính toán MD là thế năng Lennard-Jones có dạng biểu diễn như sau:

$$\phi_{ij} = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (4)$$

2.3. Một số phương pháp tích phân phương trình chuyển động

Các ý tưởng chung cho quá trình tích phân phương trình chuyển động là phương trình sẽ được tích phân từng bước với gia số thời gian là Δt . Từ các thông số về vị trí, vận tốc $r(t)$, $v(t)$ tại thời điểm t (và có thể $r(t - \Delta t)$, $v(t - \Delta t)$ tại thời điểm $t - \Delta t$) của mỗi hạt thứ i trong hệ ($i = 1, \dots, N$), bằng những khai triển hợp lí ta có thể tính được $r(t + \Delta t)$, $v(t + \Delta t)$. Cứ như vậy ta có thể thu được quỹ đạo pha (*phase trajectory*) của mỗi hạt theo thời gian và từ đó sẽ xác định được các thuộc tính của hệ cần khảo sát.

Có nhiều phương pháp tích phân phương trình chuyển động dạng (1), chúng tôi điểm lại một số phương pháp truyền thống được sử dụng phổ biến đó là: các phương pháp Verlet, phương pháp dự báo-hiệu chỉnh.

Phương pháp Verlet

Phương pháp Verlet được đề xuất bởi Verlet (1967) là một trong các phương pháp được sử dụng phổ biến nhất trong việc tích phân phương trình chuyển động. Phương pháp Verlet giải trực tiếp hệ phương trình vi phân cấp 2 dạng (1) có lược đồ như sau:

$$r(t + \Delta t) = r(t) + v(t) \cdot \Delta t + \frac{1}{2} a(t) \Delta t^2 \quad (5)$$

Với phương pháp Verlet các giá trị của vận tốc không cần tính đến trong quá trình tích phân phương trình chuyển động nhưng nó cần thiết để tính toán động năng của các hạt (và từ đó tính được động năng và tổng năng lượng của toàn hệ). Chúng có thể nhận được giá

trị vận tốc của các hạt từ công thức:

$$v(t) = \frac{r(t + \Delta t) - r(t - \Delta t)}{2\Delta t} \quad (6)$$

Một cải tiến của phương pháp Verlet có tính đến giá trị vận tốc của các hạt được đề xuất bởi Hockney (1970) và Potter (1972) có tên là Leaf-frog có lược đồ như sau:

$$\begin{aligned} r(t + \Delta t) &= r(t) + v(t + \frac{1}{2}\Delta t) \\ v(t + \frac{1}{2}\Delta t) &= v(t - \frac{1}{2}\Delta t) + a(t)\Delta t \end{aligned} \quad (7)$$

Vận tốc tức thời tại thời điểm t được tính theo công thức sau:

$$v(t) = \frac{1}{2}(v(t + \frac{1}{2}\Delta t) + v(t - \frac{1}{2}\Delta t)) \quad (8)$$

Năm 1982 nhóm các tác giả Swope, Andersen Berens và Wilson [2, tr.81] đã đề xuất một cải tiến khác của phương pháp Verlet là phương pháp *Velocity Verlet* có lược đồ như sau:

$$\begin{aligned} r(t + \Delta t) &= r(t) + v(t) + \frac{1}{2}a(t)\Delta^2 t \\ v(t + \Delta t) &= v(t) + \frac{1}{2}(a(t) + a(t + \Delta t))\Delta t \end{aligned} \quad (9)$$

Phương pháp Dự báo-Hiệu chỉnh

Phương pháp Dự báo-Hiệu chỉnh được Rahman [3] áp dụng vào MDS. Các bước cơ bản của một thuật toán Dự báo-Hiệu chỉnh bao gồm:

- Dự báo vị trí và vận tốc tại bước tiếp theo
- Tính lực ở thời điểm với các vị trí đã dự báo
- Hiệu chỉnh công thức dự báo sử dụng những kết hợp giữa công thức dự báo và các giá trị vị trí và vận tốc ở những bước trước.

Ví dụ một phương pháp Dự báo-Hiệu chỉnh:

Dự báo:

$$\begin{aligned} r(t + \Delta t) &= r(t) + v(t)\Delta t \\ v(t + \Delta t) &= v(t) - \omega^2 r(t)\Delta t \end{aligned} \quad (10)$$

Tính lực:

$$f(t + \Delta t) = m \frac{dv}{dt} = -\omega^2 r(t + \Delta t) \quad (11)$$

Hiệu chỉnh:

$$\begin{aligned}r(t + \Delta t) &= r(t) + v(t + \Delta t)\Delta t. \\v(t + \Delta t) &= v(t) - \omega^2 r(t + \Delta t)\Delta t.\end{aligned}\tag{12}$$

Một số phát triển hiệu quả của phương pháp Dự báo-Hiệu chỉnh như Dự báo-Hiệu chỉnh Gear với một số cấp chính xác khác nhau đã được nghiên cứu kỹ lưỡng trong [3].

2.4. Tính toán các giá trị thuộc tính

Các giá trị thuộc tính (như nhiệt độ, áp suất, động năng...) của hệ các hạt được tính toán bằng kỹ thuật MD sẽ được xác định thông qua việc tính giá trị trung bình theo thời gian của thuộc tính đó tại các điểm tức thời. Giá trị trung bình theo thời gian của một thuộc tính A được tính theo công thức sau:

$$A = \frac{1}{t} \int_{t_0}^{t_0+t} A(r(\tau), v(\tau)) d\tau,\tag{13}$$

với $A(r(t), v(t))$ là giá trị tức thời của thuộc tính A đó tại thời điểm t , đó là đại lượng phụ thuộc vào quỹ đạo pha.

2.5. Lược đồ chương trình cho kỹ thuật MDS

Lược đồ chung của một chương trình MDS bao gồm các bước sau:

Khởi tạo cấu hình ban đầu

Main loop (Vòng lặp chính theo các bước lấy tích phân)

 Tính thế năng, lực tương tác

 Tính vị trí và vận tốc tại thời điểm mới

 Tính các giá trị thuộc tính tức thời

End loop

Đối với việc khởi tạo cấu hình ban đầu, chúng ta cần có sự tham khảo từ những cấu hình truyền thống của các hệ thống được xét theo các nghiên cứu đã có (đặc biệt là các kết quả nghiên cứu của các ngành Vật lý, Hoá học, Sinh học...) hoặc thiết đặt một cấu hình giả định. Thông thường quá trình mô phỏng được thực hiện thành hai

giai đoạn: Giai đoạn chưa cân bằng (*nonequilibrium*) là giai đoạn hệ thống từ cấu hình ban đầu đạt đến trạng thái cân bằng; Giai đoạn cân bằng (*equilibrium*) là giai đoạn mà hệ thống đã ổn định như trạng thái trong tự nhiên. Tùy thuộc vào mục tiêu nghiên cứu mà chúng ta tính toán và khảo sát các thuộc tính của hệ thống trong giai đoạn này.

Để đánh giá thời điểm mà hệ thống đạt tới trạng thái cân bằng chúng ta có thể phải dựa vào một vài tiêu chí đánh giá như sự bảo toàn năng lượng, cân bằng về nhiệt độ... (tham khảo thêm [3]).

Thế năng và lực được tính toán theo các công thức xác định thế năng mà chúng ta lựa chọn cho quá trình mô phỏng thực hiện. Đây là bước thực hiện đắt nhất trong quá trình mô phỏng, bởi các thế năng và lực sẽ phải tính theo các tương tác cặp đôi, cặp ba... giữa tất cả các đối tượng trong hệ. Một trong các hướng nghiên cứu đang được quan tâm nhiều là việc cải thiện quá trình tính toán này.

2.6. Ngôn ngữ lập trình và máy tính thực hiện

Máy tính thực hiện

Khối lượng tính toán trong các chương trình MDS là rất lớn. Với sự phát triển nhanh chóng của công nghệ chế tạo máy tính, các máy tính với khả năng mạnh liên tục xuất hiện trên thị trường. Nhưng vấn đề lựa chọn máy tính để thực hiện các chương trình MDS cần nhiều những nghiên cứu và khảo sát cụ thể với mục tiêu là tăng tốc độ tính toán đến tối đa và phù hợp với điều kiện của người sử dụng. Các tính toán chúng tôi thực hiện và trình bày trong mục 3 đã được thử nghiệm trên một số mô hình máy tính khác nhau.

Mô hình máy thứ nhất mà chúng tôi sử dụng là các workstation, đây là loại máy phổ dụng nhưng với cấu hình và khả năng hiện nay thì thời gian chạy các chương trình MDS vẫn còn là vấn đề đáng kể. Cùng với việc chạy chương trình trên các workstation chúng tôi cũng đồng thời chạy chương trình ở chế độ tuần tự trên siêu máy tính VPP Fujitsu 700 với thời gian chạy giảm khá nhiều. Một cơ hội tốt cho chúng tôi là được làm việc với một nhóm chuyên gia Nhật Bản đang

nghiên cứu việc chế tạo phần cứng máy tính chuyên dụng cho các chương trình MDS, được gọi là *special purpose computer*. Hiện nay phiên bản thứ hai của loại máy này đã được chế tạo thành công với tốc độ tính toán của toàn hệ thống là khoảng $8.4Tflop$. Các kết quả chương trình mà chúng tôi đã thực hiện trên chủng loại máy này cho thấy rõ những tương lai khả quan của các chương trình MDS về độ chính xác cũng như tốc độ.

Ngôn ngữ lập trình

C và FORTRAN là hai ngôn ngữ có nhiều ưu thế và khá phổ biến cho việc lập các chương trình tính toán số nói chung và mô phỏng nói riêng. Chương trình dịch của hai ngôn ngữ này được cài đặt trên hầu hết các máy với những thư viện chuyên dụng rất mạnh. Việc lựa chọn ngôn ngữ lập trình nào không phải là vấn đề khó khăn lớn của những người lập trình mà điều đó sẽ phụ thuộc vào thói quen, kinh nghiệm của lập trình viên. Những tính toán của chúng tôi đã được thực hiện bằng ngôn ngữ FORTRAN 77. Tuy đã ra đời khá lâu nhưng cho đến nay FORTRAN vẫn là ngôn ngữ rất hữu hiệu trong việc xây dựng những chương trình tính toán số, trong đó có mô phỏng. Chúng tôi sẽ trình bày một số kết quả của quá trình mô phỏng trong phần tiếp theo.

3. Nghiên cứu chuyển động của các ion trong AgI

Bài toán đầu tiên chúng tôi lựa chọn để thử nghiệm các tính toán bằng kĩ thuật MDS là nghiên cứu chuyển động của các ion trong vật liệu siêu dẫn iốt bạc (*superionic conductor AgI*). α -AgI là loại vật liệu siêu dẫn được nhiều nhà vật lý quan tâm nghiên cứu, các kết quả thực nghiệm cũng như lý thuyết khá đầy đủ. Chúng tôi lựa chọn bài toán mô phỏng chuyển động của các ion trong α -AgI với mục đích thử nghiệm các tính toán và chương trình.

3.1. Hệ thống được mô phỏng

Hệ thống được mô phỏng theo phương pháp hằng số NVE bao gồm các ion Ag^+ và I^- trong một khối hộp lập phương thể tích không đổi với điều kiện biên tuần hoàn (*periodic boundary condition*) ([3, tr.80-82].

Thế năng tương tác giữa các ion được xác định theo mô hình sau:

$$V_{ij} = \frac{H_{ij}}{r_{ij}^n} + \frac{q_i q_j}{r} - \frac{1}{2} \frac{\alpha_i q_j^2 + \alpha_j q_i^2}{r^4} - \frac{w_{ij}}{r^6} \quad (14)$$

trong đó i, j biểu thị cho các ion Ag và I, các tham số $H(AgAg) = 0.014804$, $H(AgI) = 114.48$, $H(II) = 446.64$, $\alpha(Ag) = 0$, $\alpha(I) = 6.52$, $n(AgAg) = 11$, $n(AgI) = 9$, $n(II) = 7$, $q(I) = -0.6$, $q(Ag) = +0.6$, $w(AgAg) = 0$, $w(II) = 6.9331$, r là khoảng cách giữa các ion (xem [5]).

Các tính toán được thực hiện trên các hệ với 108, 256, 864, 1327 ion Ag và I với mật độ $5.928g/cm^3$, nhiệt độ $T = 640K$. Phương pháp tích phân phương trình chuyển động mà chúng tôi sử dụng là phương pháp Velocity Verlet (9).

Quá trình mô phỏng được thực hiện với 20.000 bước, 10.000 bước cho giai đoạn khởi đầu và còn lại cho quá trình hệ thống đã cân bằng. Các giá trị thuộc tính của hệ thống được đo trong giai đoạn hệ thống đã đạt trạng thái cân bằng.

3.2. Các kết quả

Quỹ đạo chuyển động của các ion

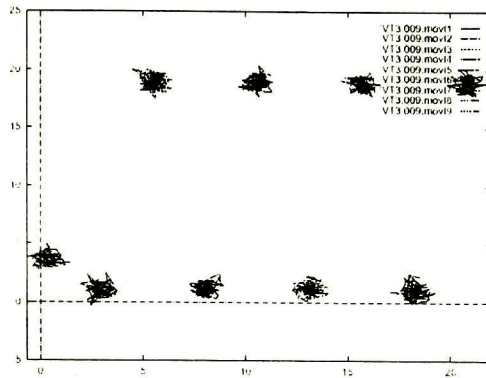
Vị trí tức thời tại các thời điểm tính toán được ghi lại 100 bước một lần, từ đó chúng tôi có thể vẽ lại được quỹ đạo dịch chuyển của các ion như trong hình 1 và hình 2.

Độ chuyển dịch trung bình của các ion

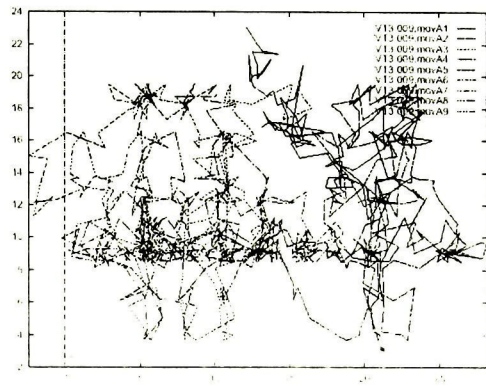
Một trong những kết quả có thể rút ra từ tính toán mô phỏng là sự chuyển dịch của các ion. Từ kết quả này chúng có thể xác định hệ thống đang xét là chất lỏng hay chất rắn. Giá trị mà chúng ta quan tâm ở đây chính là độ chuyển dịch trung bình của các ion (*mean-square displacement*) được xác định theo công thức (xem [tr. 209][3]):

$$\Delta r^2(t) = \frac{1}{N} \sum_i^N [r_i(t) - r_i(0)]^2,$$

với các chất rắn $\Delta r^2(t)$ hầu như có giá trị hằng số theo thời gian còn đối với các chất lỏng thì nó lại tăng tuyến tính theo thời gian.



Hình 1. Quỹ đạo chuyển động của ion I^-

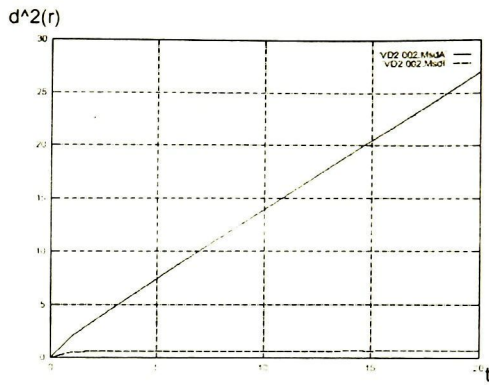


Hình 2. Quỹ đạo chuyển động của ion Ag^+

Kết quả tính toán cho hai loại ion riêng I^- và Ag^+ được mô tả trên hình 3.

Hàm phân bố vị trí

Cấu trúc của các hệ thống có thể được mô tả bởi một loạt các hàm phân bố vị trí các ion [2, tr. 54], hàm phân bố đơn giản nhất được xác định là hàm phân bố vị trí cặp đôi (*pair-distribution function*) $g_2(r_i, r_j)$ hay $g(r_{ij})$ thường được kí hiệu đơn giản là $g(r)$. $g(r)$ cho khả năng tìm được các cặp ion cách nhau khoảng r , hay nói cách khác nó xác định được sự phân bố của mỗi ion so với các ion lân cận với nó (cấu trúc địa phương). Trong thực nghiệm để đo được sự phân bố này người ta sử dụng nhiễu xạ tia X và neutron. Trong tính toán bằng



Hình 3. Độ chuyển dịch trung bình của các ion I^-

động lực phân tử chúng ta có thể ghi nhận lại tọa độ của các ion tại từng thời điểm và do đó có thể tính toán được giá trị của hàm phân bố. Hàm phân bố vị trí của các ion được xác định theo công thức sau [3, tr. 263]:

$$g(r) = \frac{\langle N(r, \Delta r) \rangle}{\frac{1}{2} N \rho V(r, \Delta r)},$$

hay tính trung bình theo N_T bước tích phân như sau:

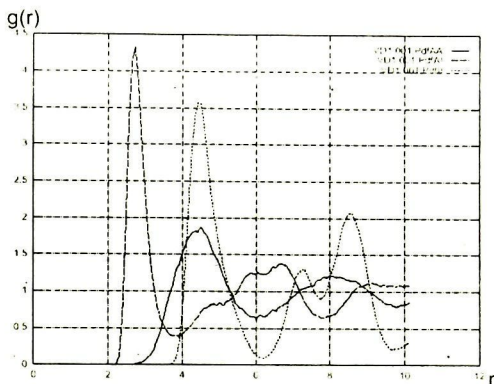
$$g(r) = \frac{\sum_{k=1}^{N_T} N_k(r, \Delta r)}{N_T (\frac{1}{2} N) \rho V(r, \Delta r)}, \quad (15)$$

trong đó $N_k(r, \Delta r)$ là số lượng các ion nằm trong vành cầu bán kính r độ dày Δr được tính theo công thức:

$$N_k(r, \Delta r) = \sum_i^N \sum_{j<i}^N \delta[r - r_{ij}] \Delta r \quad \text{tại bước tích phân thứ } k, \quad (16)$$

ρ là mật độ ion, N là tổng số ion, $V(r, \Delta r)$ là phần thể tích vành cầu bán kính r độ dày Δr . Cần có sự cân nhắc khi lựa chọn Δr , trong các tính toán của chúng tôi giá trị $\Delta r = 0.025\sigma$ với σ là bán kính của các ion.

Kết quả tính toán hàm phân bố vị trí giữa các ion Ag và Ag , I và I , Ag và I được thể hiện trong hình 4.



Hình 4. Hàm phân bố vị trí của các ion

4. Đánh giá kết quả

Qua một số kết quả tính toán, chúng tôi nhận thấy các kết quả tính toán được khá phù hợp với các kết quả thực nghiệm và một số các tính toán mô phỏng khác. Về chuyển động của các ion các kết quả đều thể hiện sự chuyển dịch hỗn loạn của các ion Ag^+ và sự dao động tương đối ổn định của các ion I^- . Kết quả này phần nào lý giải được một tính chất khá quan trọng của chất liệu siêu dẫn AgI khi cấu trúc vật lý là một chất rắn nhưng lại có các tính chất truyền dẫn như chất lỏng. Tuy nhiên các kết luận mang tính chất chuyên sâu chúng tôi vẫn cần có các ý kiến của các chuyên gia Vật lý về khoa học vật liệu.

5. Kết luận và đề xuất hướng nghiên cứu

Các tính toán đã thực hiện được thể hiện sự thành công trong việc triển khai phương pháp mô phỏng động lực phân tử. Chúng tôi đã tiến hành thử nghiệm tính toán trên ba loại máy tính khác nhau: Alpha Server 4100, VPP Fujitsu 700 và MD-GRAPE I. Các đánh giá về mặt thời gian cho thấy những ưu thế tốt của MD-GRAPE so với các hệ thống máy khác. Chúng tôi sẽ có những kết luận rõ ràng hơn về khả năng tính toán của một số loại máy tính cho phương pháp MDS khi có thêm những tính toán và so sánh cần thiết khác.

Bài toán mà chúng tôi tiếp tục quan tâm là nghiên cứu sự chuyển

động của các ion trong AgI ở các pha khác nhau: pha lỏng, pha rắn.

Nghiên cứu mô phỏng hiện vẫn còn là hướng nghiên cứu mới mẻ ở Việt Nam, các tính toán mô phỏng mới chỉ được thực hiện trong các chuyên ngành cụ thể mà chưa có những nghiên cứu phổ biến ở các chuyên ngành khác như Toán học tính toán, Tin học. Việc đầu tư cho nghiên cứu về mô phỏng đang là hướng mở cho các nhà Toán học và Tin học. Chúng tôi hy vọng những kết quả ban đầu sẽ đặt nền móng và chuẩn bị cho những ý tưởng có giá trị trong lĩnh vực này.

6. Lời cảm ơn

Xin chân thành cảm ơn Trường Đại học Khoa học Tự nhiên đã tạo điều kiện về mặt kinh phí để chúng tôi tiến hành đề tài TN-01-01. Cảm ơn Trung tâm Tính toán Khoa học Cơ bản Viện Năng lượng Hạt nhân đã hỗ trợ chúng tôi về máy móc, trang thiết bị để thực hiện các tính toán và tổng hợp kết quả.