

ЛАБОРАТОРНА РОБОТА №4. Моделювання систем, що складаються з великого числа частинок, методом молекулярної динаміки

Мета: Моделювання систем, що складаються з великого числа частинок, методом молекулярної динаміки (МД).

Теоретичні відомості до лабораторної роботи наведені у лекції 4.

Порядок виконання роботи

Виконати наступне завдання згідно з номером свого варіанту, використовуючи відповідну математичну модель.

1. Дослідити поведінку статистичної системи з великою кількістю частинок, якщо задані ширина та висота початкової комірки, ширина та висота МД-комірки, максимальне значення швидкості, число МД-кроків та величина МД-кроку: 5, 5, 8, 8, 0.2, 10^4 та 10^{-4} , відповідно. Візуалізувати початкову конфігурацію БЧС, конфігурації у моменти часу 0.05, 0.5 та 1.0, а також залежності від часу кінетичної та потенціальної енергій частинки.

2. Реалізувати алгоритм методу МД, якщо параметри БЧС, відповідно, дорівнюють 4, 4, 8, 8, 0.2, 10^4 та 10^{-4} . Отримати початкову конфігурацію БЧС та конфігурацію у момент часу 1.0, а також (на одному графіку) залежності від часу кінетичної, потенціальної та повної енергій частинки.

3. Візуалізувати імовірності визначення проекцій швидкостей частинок в інтервалі $[v; v + \Delta v]$ на осі x та y , якщо параметри БЧС, відповідно, дорівнюють 5, 5, 8, 8, 0.2, 10^4 та 10^{-4} , момент часу, починаючи з якого обчислюються миттєві розподіли, дорівнює 0.25, а число інтервалів для діаграм розподілів – 10.

4. Отримати залежність миттєвих значень тиску від часу для БЧС з параметрами, які, відповідно, дорівнюють 5, 5, 8, 8, 0.2, 10^4 , 10^{-4} .

5. Отримати залежність середнього квадрату зміщення від часу для БЧС, параметри якої наведені у завданні 1, якщо момент часу, починаючи з якого обчислюються миттєві розподіли, дорівнює 0.07, а крок обчислення середнього квадрату зміщення 50.

6. Отримати залежність автокореляційної функції швидкості частинок БЧС від часу для системи, параметри якої наведені у завданні 1, якщо момент часу, починаючи з якого обчислюються миттєві розподіли, дорівнює 0.01, а крок обчислення середнього квадрату зміщення 50.

7. Визначити повну енергію БЧС в момент часу $t = 0$ та вивести її початкову конфігурацію, якщо система має такі параметри: ширина та висота початкової комірки 6, ширина та висота МД-комірки 8, максимальне значення швидкості 0.2, коефіцієнт, що визначає початкову щільність системи, 1.6.

8. Дослідити поведінку статистичної системи, що має такі параметри: ширина та висота початкової комірки 7, ширина та висота МД-комірки 20, максимальне значення швидкості 2, величина МД-кроку $5 \cdot 10^{-4}$, число МД-кроків $2 \cdot 10^4$. Візуалізувати початкову конфігурацію БЧС, конфігурації у моменти часу 0.05, 0.5 та 1.0, а також залежності від часу кінетичної та потенціальної енергій частинки.

9. Для БЧС із завдання 8 отримати залежності від часу миттєвих значень тиску, середнього квадрату зміщення, а також автокореляційної функції швидкості частинок, якщо момент часу, починаючи з якого обчислюються миттєві розподіли, дорівнює 0.7, а крок обчислення середнього квадрату зміщення – 50.

10. Для методу МД отримати початкову конфігурації системи, а також конфігурації у моменти часу 0.05 та 1.0, якщо параметри БЧС, відповідно, дорівнюють 6, 6, 8, 8, 0.2, 10^4 та 10^{-4} .

11. Використовуючи умови задачі 10, дослідити поведінку БЧС методом МД. Отримати залежності від часу кінетичної, потенціальної та повної енергій частинки, якщо параметри БЧС, відповідно, дорівнюють 6, 6, 8, 8, 0.2, 10^4 та 10^{-4} .

12. Використовуючи умови задачі 1, дослідити поведінку БЧС методом МД. Отримати початкову конфігурації системи, конфігурації у моменти часу 0.5, 0.05 та 1.0, а також залежності від часу кінетичної, потенціальної та повної енергій частинки.

13. Візуалізувати імовірності визначення проекцій швидкостей частинок в інтервалі $[v; v + \Delta v]$ на осі x та y , якщо параметри БЧС, відповідно, дорівнюють 4, 4, 8, 8, 0.2, 10^4 та 10^{-4} , момент часу, починаючи з якого обчислюються миттєві розподіли, дорівнює 0.25, а число інтервалів для діаграм розподілів – 15.

14. Отримати залежність миттєвих значень тиску від часу для БЧС, якщо система має такі параметри: ширина та висота початкової комірки 4, ширина та

висота МД-комірки 8, максимальне значення швидкості 0.2, число МД-кроків 10^4 , крок інтегрування рівняння руху 10^{-4} .

15. Отримати залежність середнього квадрату зміщення від часу для БЧС із завдання 2, якщо момент часу, починаючи з якого обчислюються миттєві розподіли, дорівнює 0.03, а крок обчислення середнього квадрату зміщення 50.

16. Отримати залежність автокореляційної функції швидкості частинок БЧС від часу для системи, параметри якої наведені у завданні 2, якщо момент часу, починаючи з якого обчислюються миттєві розподіли, дорівнює 0.05, а крок обчислення середнього квадрату зміщення 50.

17. Визначити повну енергію БЧС в момент часу $t = 0$ з такими параметрами: ширина та висота початкової комірки 7, ширина та висота МД-комірки 20, максимальне значення швидкості 2, коефіцієнт, що визначає початкову щільність системи, дорівнює 1.6.

18. Дослідити поведінку статистичної системи з великою кількістю частинок, якщо задані ширина та висота початкової комірки, ширина та висота МД-комірки, максимальне значення швидкості, число МД-кроків та величина МД-кроку: 3, 3, 6, 6, 0.1, 10^4 та 10^{-4} , відповідно. Візуалізувати початкову конфігурацію БЧС, конфігурації у моменти часу 0.05, 0.5 та 1.0, а також залежності від часу кінетичної та потенціальної енергій частинки.

19. Дослідити поведінку статистичної системи, що має такі параметри: ширина та висота початкової комірки 5, ширина та висота МД-комірки 8, максимальне значення швидкості 2, величина МД-кроку $5 \cdot 10^{-4}$, число МД-кроків $2 \cdot 10^4$, коефіцієнт, що визначає початкову щільність системи, дорівнює 1.6, момент часу, починаючи з якого обчислюються миттєві розподіли, – 0.7, а крок обчислення середнього квадрату зміщення – 50. Візуалізувати початкову конфігурацію БЧС, конфігурації у моменти часу 0.05, 0.5 та 1.0, а також залежності від часу кінетичної та потенціальної енергій частинки. Визначити повну енергію системи в момент часу $t = 0$. Отримати залежності від часу миттєвих значень тиску, середнього квадрату зміщення, а також автокореляційної функції швидкості частинок.

Контрольні питання

1. У чому полягає метод МД? Які особливості його моделювання?
2. Оцінювання макроскопічних характеристик статистичної системи.
3. Оцінювання коефіцієнтів переносу в методі МД.
4. Моделювання фазових переходів методом МД.