Отчет по задаче №4

1. Математическая постановка задачи

При помощи алгоритма Метрополиса сделать анализ системы взаимодействующих частиц на плоскости.

2. Алгоритм Метрополиса

- N частиц произвольным образом распределены внутри объёма V .

- Случайным образом выбирается некоторая частица j с координатами (x,y), вокруг которой изображаем квадрат размером aXa (a приблизительно равно отношение V к N) с центром в точке j. Затем перемещаем эту частицу j случайным образом в любую точку квадрата:
$$x_j^{n+1} = x_j^n + a\left(\xi_1 - \frac{1}{2}\right),$$
$$y_j^{n+1} = y_j^n + a\left(\xi_2 - \frac{1}{2}\right),$$
где ξ_1, ξ_2 значения равномерно распределенной на (0, 1) случайной величины.

- В процессе перемещения частицы происходит изменение потенциальной энергии:
$$\Delta U = \sum_{i=1, i\neq j}^{N} \left\{ \Phi(r_i^{n+1}) - \Phi(r_i^n) \right\}$$

где Ф(r) – это потенциал Леннарда-Джонса с некоторыми характерными константами Ɛ и σ, который рассчитывается по следующей формуле:

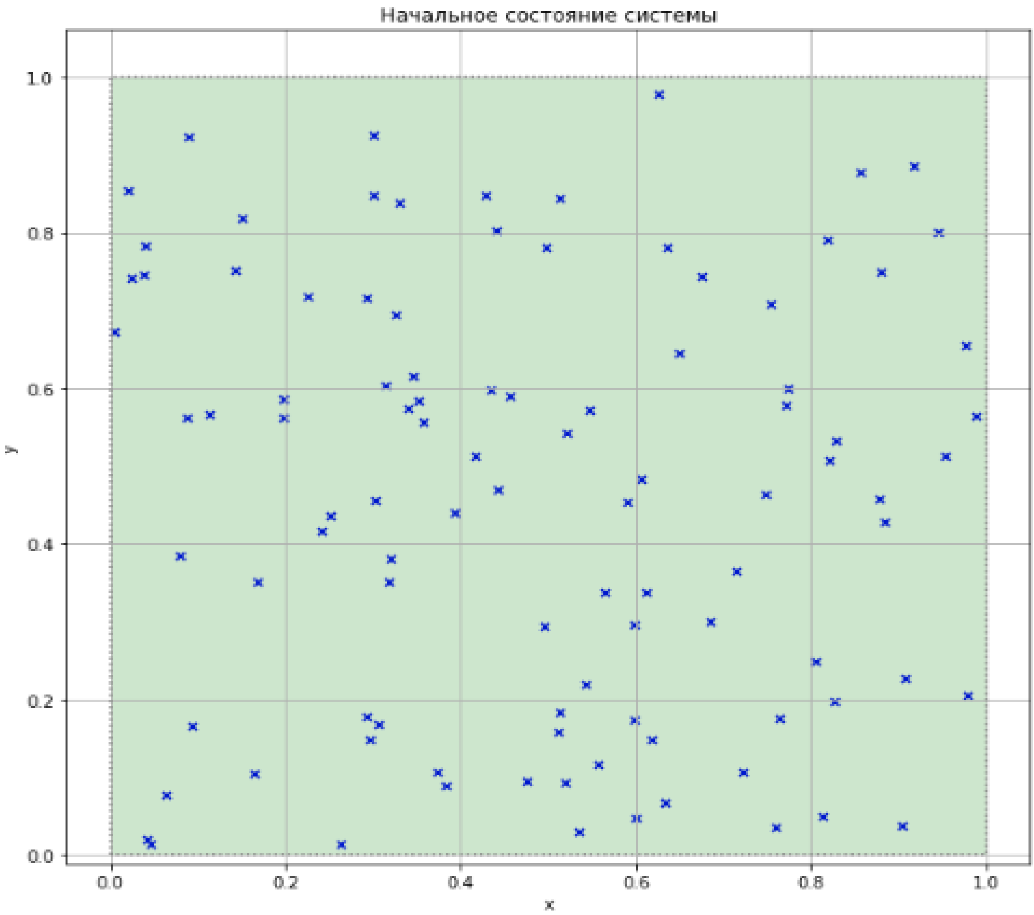
$$\Phi(r) = 4\epsilon\left(\frac{\sigma^{12}}{r^{12}} - \frac{\sigma^6}{r^6}\right),$$

$$r_i^n = \sqrt{(x_i^n - x_j^n)^2 + (y_i^n - y_j^n)^2},$$

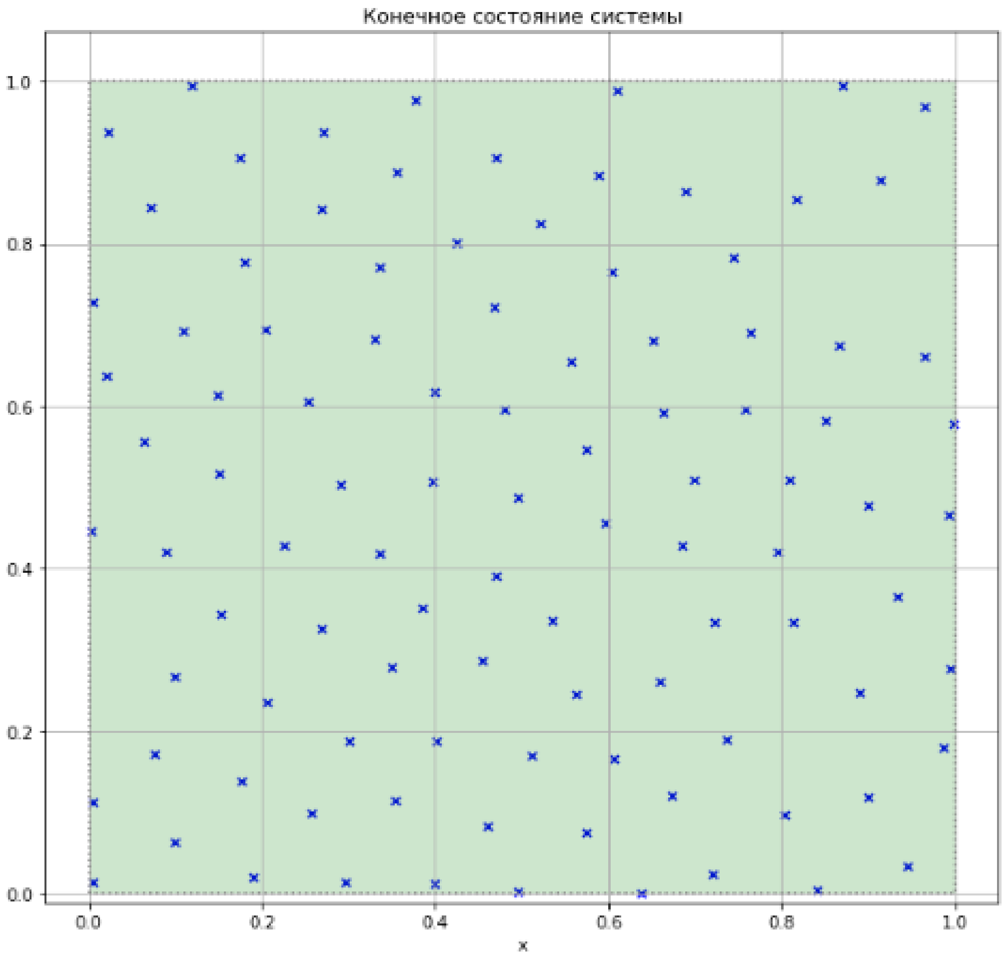
$$r_i^{n+1} = \sqrt{(x_i^{n+1} - x_j^{n+1})^2 + (y_i^{n+1} - y_j^{n+1})^2}.$$

- Если ΔU<0, то новая система включается в ансамбль. С другой стороны, если образовалась система с большей энергией, то система включается в ансамбль лишь с вероятностью e^(ΔU/kT). Для чего выбирается третье равномерно распределённое на (0,1) случайное число ξ_3, и если ξ_3 < e^(ΔU/kT), то новая система присоединяется к ансамблю, если нет, то новая система отбрасывается, и в ансамбль ещё раз добавляется старая система.

Долгов Виктор, 3-й ВМК ВВО



Начальное состояние системы при N = 100



Долгов Виктор, 3-й ВМК ВВО