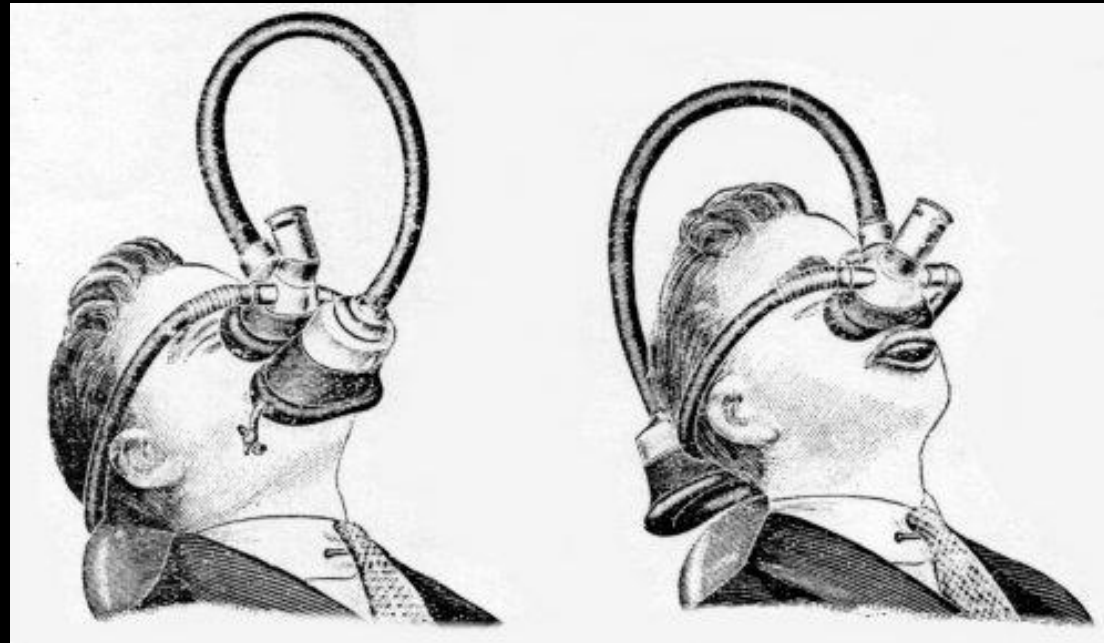


# Symulacje komputerowe w fizyce



08-09.11.2022

Ćwiczenia 6: Więcej gazu

# Zadanie

1. Zaimplementuj termostat izokinetyczny do kontroli temperatury (implementacja Browna & Clarka), narysuj wykres temperatury i ciśnienia od czasu.
2. Zbadaj diagram fazowy  $\rho$ -T (gęstość vs temperatura) układu cząstek oddziałujących siłami Lennarda-Jonesa i znajdź dwa reprezentatywne punkty, w których Twój układ jest odpowiednio płynem i ciałem stałym – przygotuj z tego animację.
- \*3. Oszacuj czas, w jakim układ dochodzi do stanu równowagi poprzez analizę wykresu energii od czasu.

# Żabka + termostat

D. Brown & JHR Clarke, Mol. Phys., 51, 1243 (1984)

1. Wykonaj pół kroku (bez siły oporu)

$$\mathbf{v}^u(t) = \mathbf{v}(t - \delta t/2) + \left( \frac{\mathbf{F}(t)}{m} \right) \frac{\delta t}{2}$$

2. Oblicz chwilową temperaturę

$$\mathcal{T}(t) = \frac{1}{3Nk_B} \sum_{i=1}^N m_i (\mathbf{v}_i^u(t))^2 = \frac{2}{3Nk_B} K^u$$

3. Oblicz współczynnik  $\eta$

$$\eta = \sqrt{\frac{T_{ext}}{\mathcal{T}}}$$

4. Dokończ krok

$$\mathbf{v}(t + \delta t/2) = (2\eta - 1)\mathbf{v}(t - \delta t/2) + \eta \left( \frac{\mathbf{F}(t)}{m} \right) \Delta t$$

$$\mathbf{r}(t + \delta t) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(t + \delta t/2)\Delta t$$

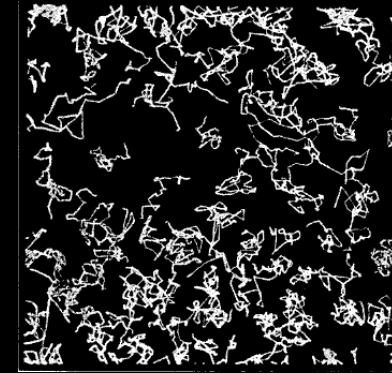
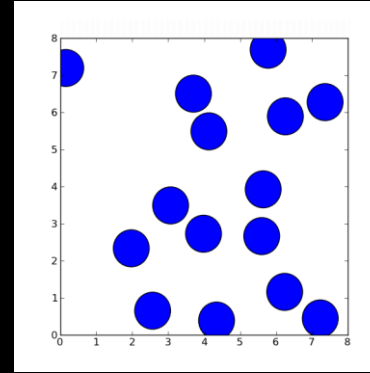
Fazy



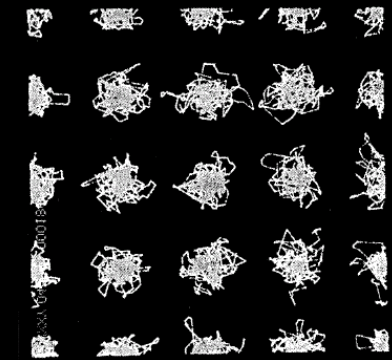
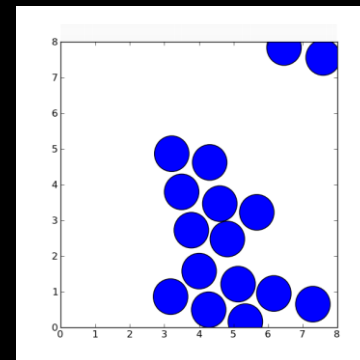
# Jak odróżnić płyn od ciała stałego?

- wpatrując się...

płyn:



ciało  
stałe:



świat rzeczywisty

nasz kod

Alder & Wainwright  
1959

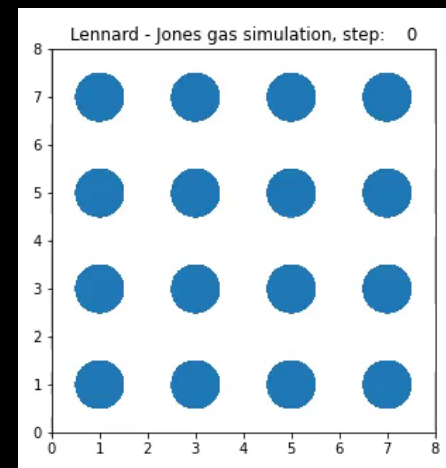
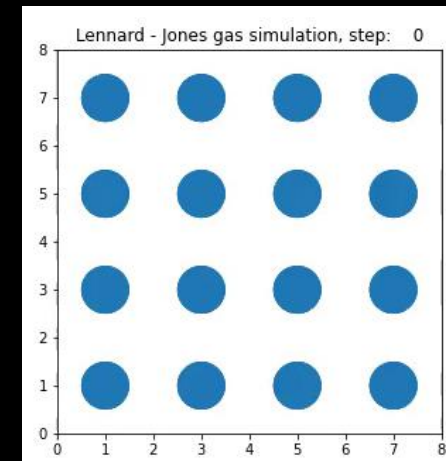
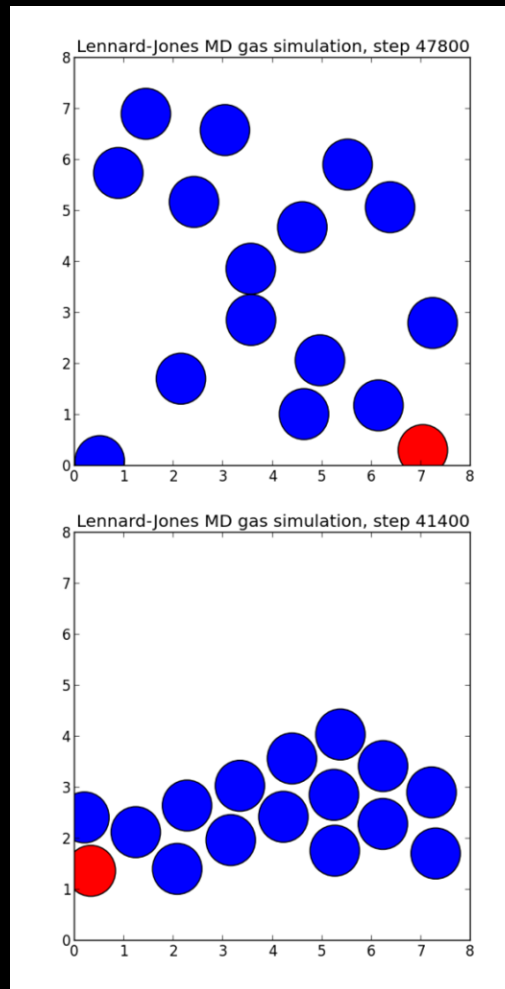
# Jak odróżnić płyn od ciała stałego?

- obliczając stałą dyfuzji – średnie przesunięcie kwadratowe w funkcji czasu

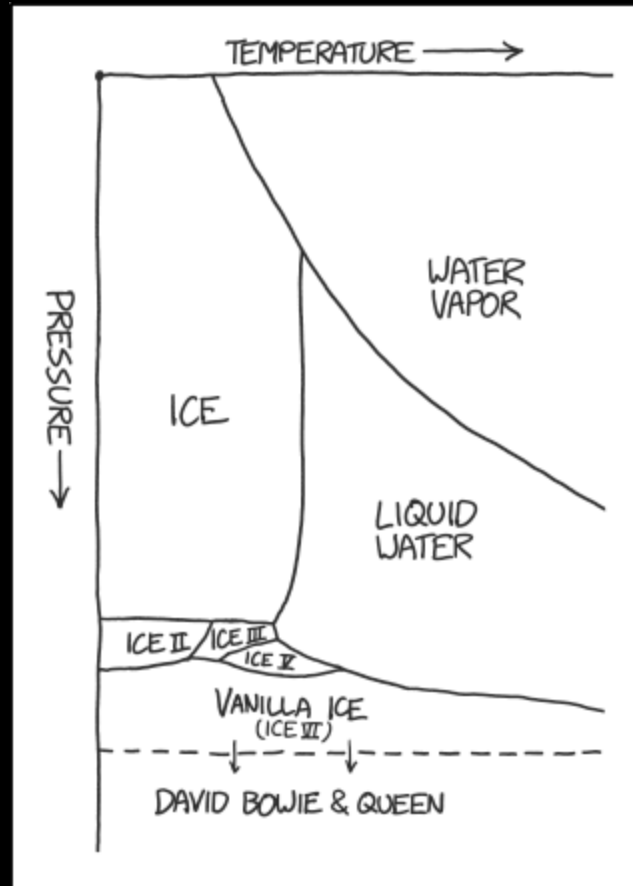
płyn – duża

ciało stałe – (prawie) zero

● – śledzona cząstka



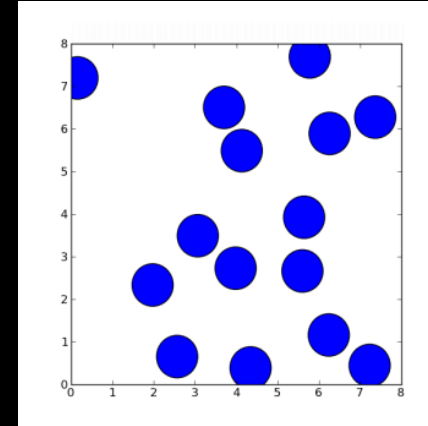
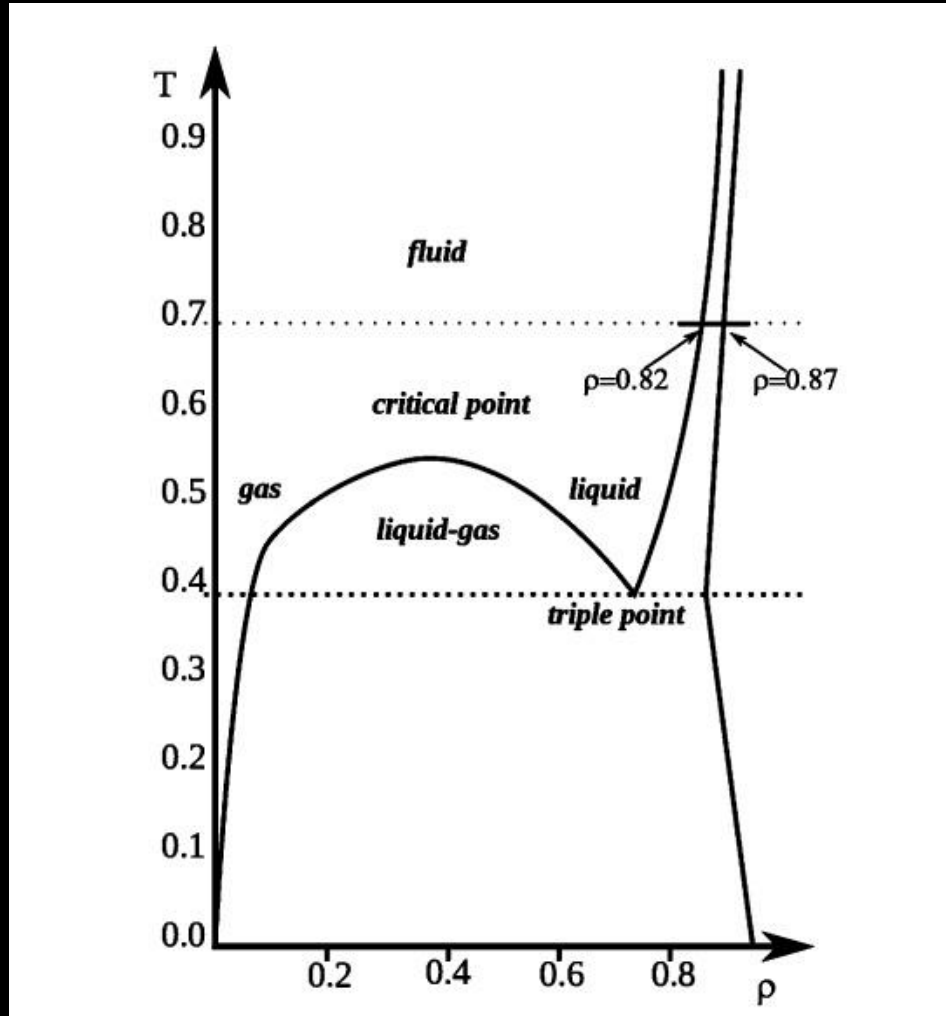
# Diagram fazowy



# Diagram fazowy dwuwymiarowego układu LJ

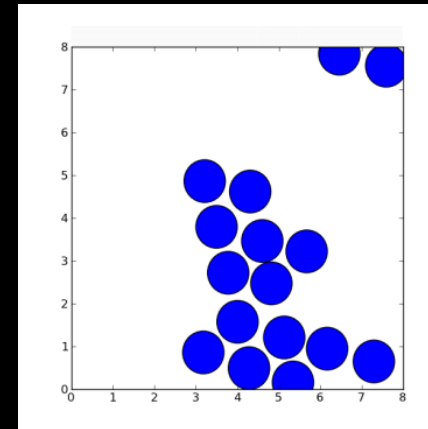
T podane dla  $k = 1$

$$\rho = \frac{N}{S} \sigma^2$$



$\rho = 0.25, T = 0.7$

płyn



$\rho = 0.25, T = 0.1$

ciało stałe

Zbadajcie kilka punktów!

Abraham, F. F. *Phys. Rep.* **1981**, 80, 340–374.

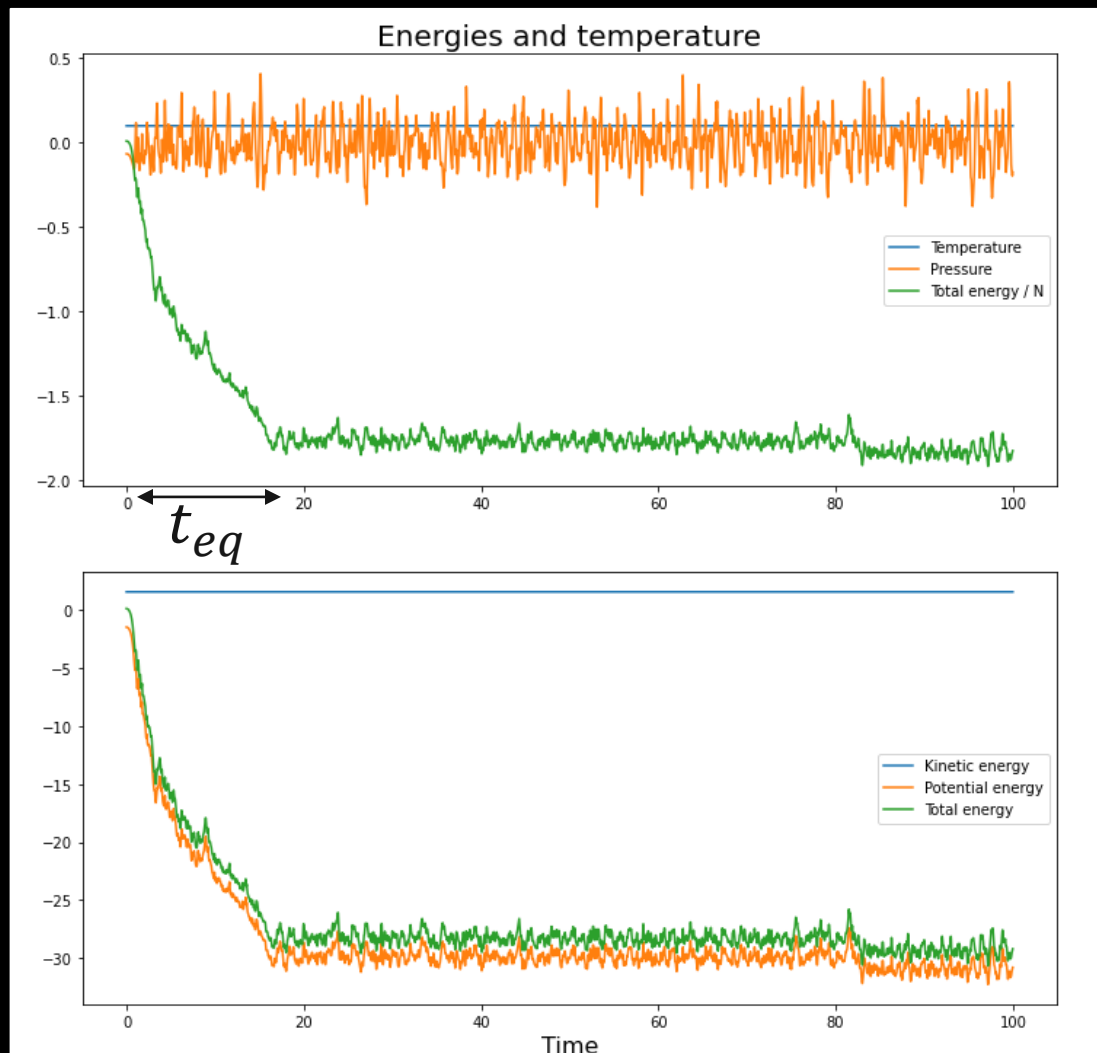


# Dochodzenie do równowagi

Narysuj energię w funkcji czasu (kinetyczną, potencjalną, całkowitą),  
oszacuj czas dochodzenia do równowagi (dla niskiej temperatury  $T=0.1$ ).

czas dochodzenia  
do równowagi ( $t_{eq}$ )

(użyjcie większego kroku  
czasowego  $dt = 0.025$ , aby móc  
z badać większe czasy)



# Punktacja zadania

1. Termostat izokinetyczny, wykres temperatury i ciśnienia od czasu – 0.5 pkt.
2. Animacje dla gęstości i temperatury odpowiadających płynowi i ciała stałego – 0.5 pkt.
- \*3. Wykres  $E(t)$ , czas dochodzenia do równowagi – 0.2 pkt.