

Введение

ooo

Глава 2

о  
оо  
оооо  
оо

Результаты Главы 2

ooooo  
ooooo

Глава 3

о  
оо

Результаты Главы 3

оо  
оо

Итоги ВКР

оо

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
«Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный  
исследовательский университет)» (МГТУ им. Н.Э. Баумана)



**НАУЧНО-КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА**  
**«Роль дальнодействия притяжения в фазовых диаграммах и диффузии**  
**в двумерных системах с регулируемыми взаимодействиями»**

Студент: Дмитрюк Никита

гр. ФН4-81Б

Руководитель: Юрченко Станислав Олегович

д.ф.-м.н., доцент каф. СМ13,

МГТУ им. Н.Э. Баумана.

Москва, 2020

**Введение**

●○○

**Глава 2**

○  
○○  
○○○○  
○○

**Результаты Главы 2**

○○○○○  
○○○○

**Глава 3**

○  
○○

**Результаты Главы 3**

○○  
○○

**Итоги ВКР**

○○

## Актуальность

Для физики конденсированного состояния большой интерес представляют такие явления, как кристаллизация, плавление, критические явления, а так же их зависимость от свойств системы. Понимание влияния этих свойств на систему играет важную роль в материаловедении. На данный момент эти проблемы решаются с использованием математических моделей систем.

| Введение | Глава 2 | Результаты Главы 2 | Глава 3 | Результаты Главы 3 | Итоги ВКР |
|----------|---------|--------------------|---------|--------------------|-----------|
| о●о      |         |                    |         |                    |           |
| о        | ooooo   |                    | о       | оо                 |           |
| оо       | ooooo   |                    | оо      | оо                 |           |
| оооо     |         |                    |         |                    |           |
| оо       |         |                    |         |                    |           |

## Цель работы

**Цель работы** – установить связь между дальнодействием притяжения в двумерной системе частиц, взаимодействующих посредством обобщенного потенциала Леннарда-Джонса, с фазовой диаграммой, и параметрами переноса.

**Введение**

oo●

**Глава 2**

o  
oo  
ooo  
oo

**Результаты Главы 2**

ooooo  
oooo

**Глава 3**

o  
oo

**Результаты Главы 3**

oo  
oo

**Итоги ВКР**

oo

## Задачи работы

1. Разработка программного комплекса для расчета явлений переноса в 2D системах.
2. Разработка методов определения термодинамических свойств системы по распределениям плотностей.
3. Усовершенствование метода распознавание фаз и построения фазовых диаграмм.
4. Применение разработанных методов на различных потенциалах взаимодействия.
5. Применение наработок для изучения влияния потенциала взаимодействия на различные термодинамические параметры.

Введение

ooo

Глава 2

●  
○○  
○○○○  
○○

Результаты Главы 2

ooooo  
ooooo

Глава 3

○  
○○

Результаты Главы 3

oo  
oo

Итоги ВКР

oo

## ГЛАВА 2

«ВЛИЯНИЕ ДАЛЬНОДЕЙСТВИЯ ПРИТЯЖЕНИЯ НА  
ФАЗОВЫЕ ДИАГРАММЫ»

Введение

ooo

Глава 2

○  
●○  
○○○○  
○○

Результаты Главы 2

ooooo  
ooooo

Глава 3

○  
○○

Результаты Главы 3

oo  
oo

Итоги ВКР

oo

Разбиение на ячейки вороного

Разбиение на ячейки вороного

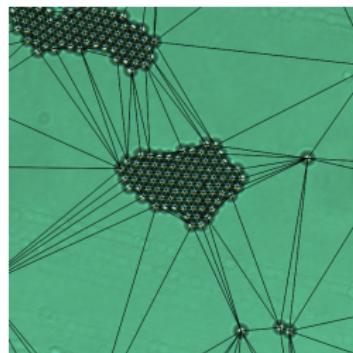


Рис. 1: Триангуляция  
Делоне

Введение

ooo

Глава 2

○  
●○  
○○○○  
○○

Результаты Главы 2

ooooo  
ooooo

Глава 3

○  
○○  
○○

Результаты Главы 3

oo  
oo

Итоги ВКР

oo

Разбиение на ячейки вороного

## Разбиение на ячейки вороного

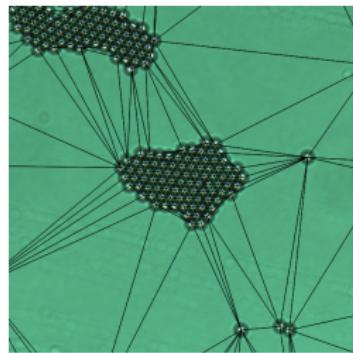


Рис. 1: Триангуляция  
Делоне

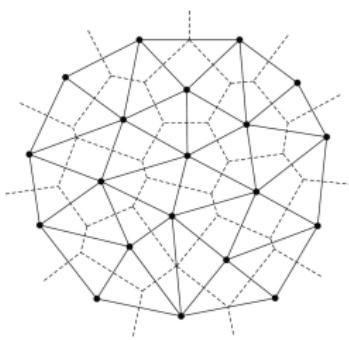


Рис. 2: Проведение  
перпендикуляров

Введение

ooo

Глава 2

○  
●○  
○○○○  
○○

Результаты Главы 2

ooooo  
ooooo

Глава 3

○  
○○

Результаты Главы 3

oo  
oo

Итоги ВКР

oo

Разбиение на ячейки вороного

## Разбиение на ячейки вороного

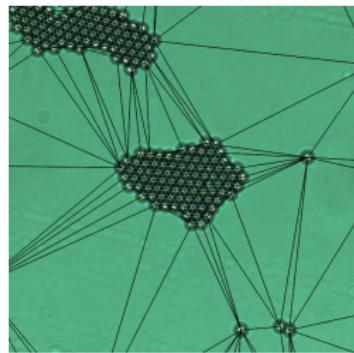


Рис. 1: Триангуляция  
Делоне

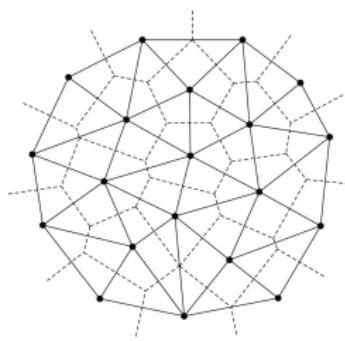


Рис. 2: Проведение  
перпендикуляров

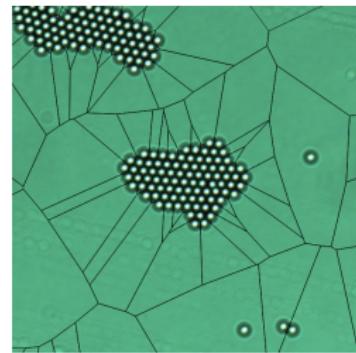


Рис. 3: Ячейки  
Вороного

Введение

ooo

Глава 2

○  
○●  
○○○  
○○

Результаты Главы 2

ooooo  
ooooo

Глава 3

○  
○○  
○○

Результаты Главы 3

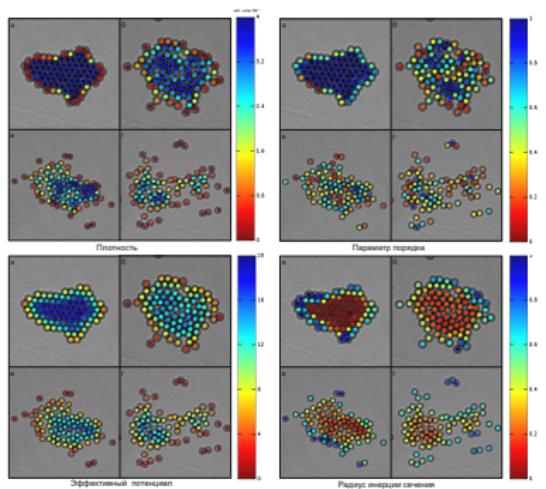
oo  
oo

Итоги ВКР

oo

Разбиение на ячейки вороного

# Разбиение на ячейки вороного



Введение

ooo

Глава 2

o  
o●  
ooo  
oo

Результаты Главы 2

ooooo  
ooooo

Глава 3

o  
oo  
oo

Результаты Главы 3

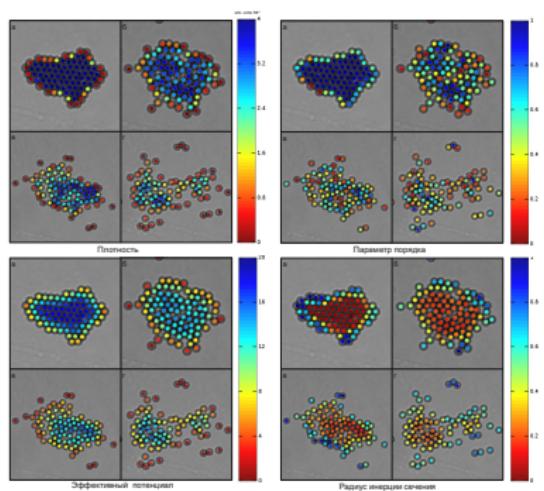
oo  
oo

Итоги ВКР

oo

Разбиение на ячейки вороного

## Разбиение на ячейки вороного



- ▶ Найти соседей каждой частицы
- ▶ Плотности
- ▶ Параметры порядка
- ▶ Эффективные потенциалы
- ▶ Радиусы инерции сечения
- ▶ И т.д.

Введение

ooo

Глава 2

○  
○○  
●○○  
○○

Результаты Главы 2

ooooo  
ooooo

Глава 3

○  
○○  
○○

Результаты Главы 3

oo  
oo

Итоги ВКР

oo

Метод распознавания фаз

## Параметр иррегулярности $R$

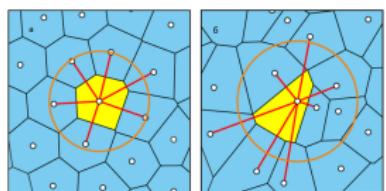


Рис. 4: а) Кристалл б) Газ.

Введение

ooo

Глава 2

○  
○○  
●○○  
○○

Результаты Главы 2

ooooo  
ooooo

Глава 3

○  
○○  
○○

Результаты Главы 3

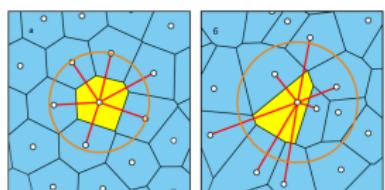
oo  
oo

Итоги ВКР

oo

Метод распознавания фаз

## Параметр иррегулярности $R$



**Рис. 4:** а) Кристалл б) Газ.

$$R_{0i} = \sqrt{\frac{\pi}{2S_i N_{ni}^2} \sum_{i < k}^{N_{ni}} (r_{ij} - r_{ik})^2}, \quad r_{ij} = |r_i - r_j|$$

$$R_i = \frac{1}{N_{ni} + 1} \left( R_{0i} + \sum_{j=1}^{N_{ni}} R_{0j} \right) \quad (1)$$

где  $S_i$  - площадь ячейки,  $N_{ni}$  - количество соседей,  $r_{ij}$  - расстояние от рассматриваемой частицы до соседней.

## Метод распознавания фаз

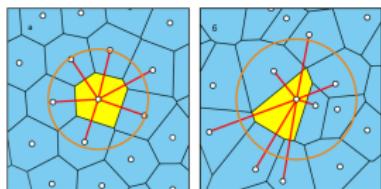
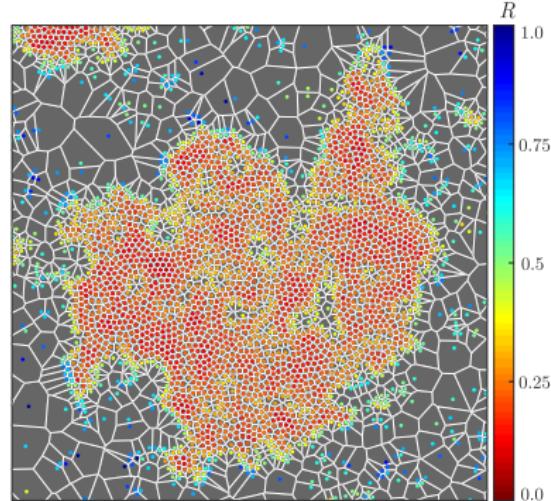
Параметр иррегулярности  $R$ 

Рис. 4: а) Кристалл б) Газ.

$$R_{0i} = \sqrt{\frac{\pi}{2S_i N_{ni}^2} \sum_{i < k}^{N_{ni}} (r_{ij} - r_{ik})^2}, r_{ij} = |r_i - r_j|$$

$$R_i = \frac{1}{N_{ni} + 1} \left( R_{0i} + \sum_{j=1}^{N_{ni}} R_{0j} \right) \quad (1)$$

где  $S_i$  - площадь ячейки,  $N_{ni}$  - количество соседей,  $r_{ij}$  - расстояние от рассматриваемой частицы до соседней.

Рис. 5: Распределение параметра  $R$ .

Введение

ooo

Глава 2

○  
○○  
○●○○  
○○

Результаты Главы 2

ooooo  
ooooo

Глава 3

○  
○○  
○○

Результаты Главы 3

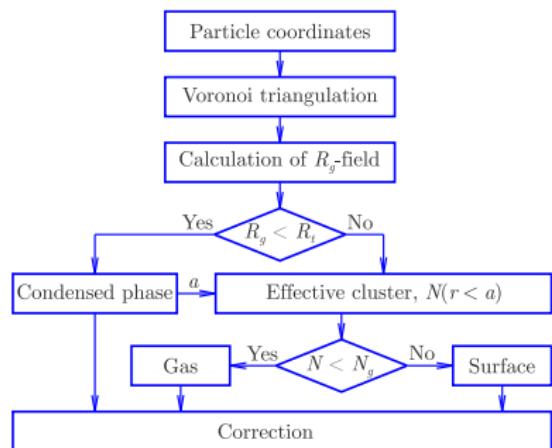
oo  
oo

Итоги ВКР

oo

Метод распознавания фаз

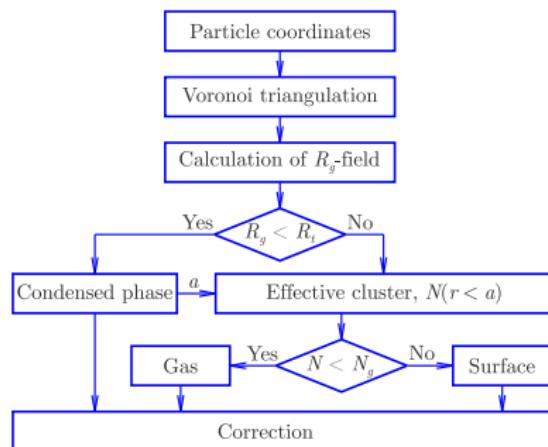
## Корректировка фаз



**Рис. 6:** Полный алгоритм классификации частиц в системе.

Метод распознавания фаз

# Корректировка фаз



Корректировка фаз включает в себя следующие условия:

- ▶ частица конденсата, не имеющая среди своих соседей частиц того же типа, является поверхностью.
- ▶ частица конденсата, которая имеет среди соседних частиц, газовую частицу, является поверхностью.
- ▶ газовая частица, не имеющая соседних частиц того же класса, является поверхностью.
- ▶ частица поверхности, все соседи которой принадлежат к классу "конденсат" или "газ так же принадлежат к этому классу.

**Рис. 6:** Полный алгоритм классификации частиц в системе.

Введение

ooo

Глава 2

○  
○○  
○○●○  
○○

Результаты Главы 2

ooooo  
ooooo

Глава 3

○  
○○

Результаты Главы 3

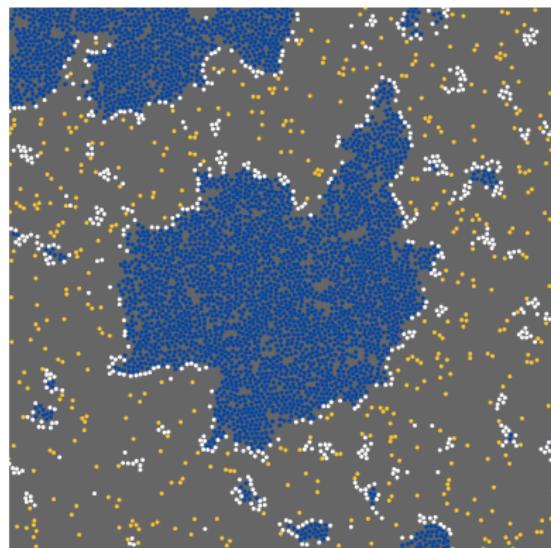
oo  
oo

Итоги ВКР

oo

Метод распознавания фаз

## Недостатки метода распознавания фаз



**Рис. 7:** Результат алгоритма классификации.

Введение

ooo

Глава 2

о  
оо  
оо●о  
оо

Результаты Главы 2

ooooo  
ooooo

Глава 3

о  
oo  
oo

Результаты Главы 3

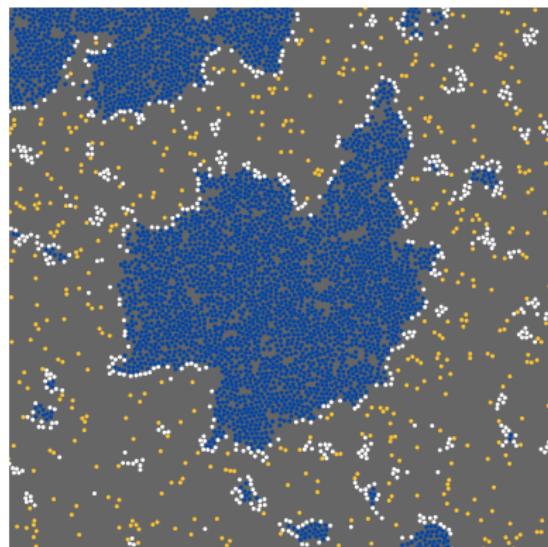
оо  
оо  
оо

Итоги ВКР

оо

Метод распознавания фаз

## Недостатки метода распознавания фаз



Недостатки метода распознавания фаз:

- ▶ распознавание пустот внутри конденсированного кластера, как его часть.
- ▶ скопления поверхностных частиц, которые могут быть небольшими кластерами.
- ▶ нерегулярная граница кластера из поверхностных частиц.
- ▶ частицы на поверхности кластера с низкой плотностью, распознанные как конденсат а не поверхность, вносят ошибку в вычисления мат. ожидания плотности.

**Рис. 7:** Результат алгоритма классификации.

Введение

ooo

Глава 2

○  
○○  
○○○●  
○○

Результаты Главы 2

ooooo  
ooooo

Глава 3

○  
○○

Результаты Главы 3

oo  
oo

Итоги ВКР

oo

Метод распознавания фаз

## Изменения в корректировке фаз

Дополнительные условия в корректировки фаз:

- ▶ частица поверхности, не имеющая среди соседей частиц газа, является конденсатом.
- ▶ поверхностная частица, не имеющая среди соседей частиц конденсата, является газом.
- ▶ частицы конденсата, плотность которых сопоставима с плотностью поверхностных частиц, являются поверхностью. Данная проверка делается дважды (перед всеми остальными и после).
- ▶ частица конденсата, которая имеет меньше 3 соседних частиц, так же принадлежащих к конденсату, является поверхностью.

Введение

ooo

Глава 2

○  
○○  
○○●  
○○

Результаты Главы 2

ooooo  
ooooo

Глава 3

○  
○○

Результаты Главы 3

oo  
oo

Итоги ВКР

oo

Метод распознавания фаз

## Изменения в корректировке фаз

Дополнительные условия в корректировки фаз:

- ▶ частица поверхности, не имеющая среди соседей частиц газа, является конденсатом.
- ▶ поверхностная частица, не имеющая среди соседей частиц конденсата, является газом.
- ▶ частицы конденсата, плотность которых сопоставима с плотностью поверхностных частиц, являются поверхностью. Данная проверка делается дважды (перед всеми остальными и после).
- ▶ частица конденсата, которая имеет меньше 3 соседних частиц, так же принадлежащих к конденсату, является поверхностью.

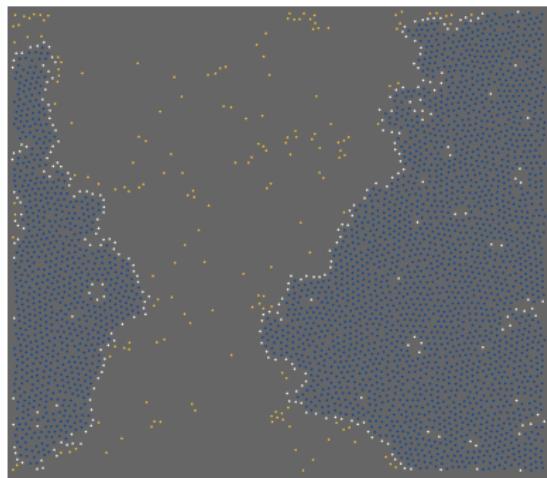


Рис. 8: Результат обновленного алгоритма классификации.

Введение

ooo

Глава 2

○  
○○  
○○○  
●○

Результаты Главы 2

ooooo  
ooooo

Глава 3

○  
○○  
○○

Результаты Главы 3

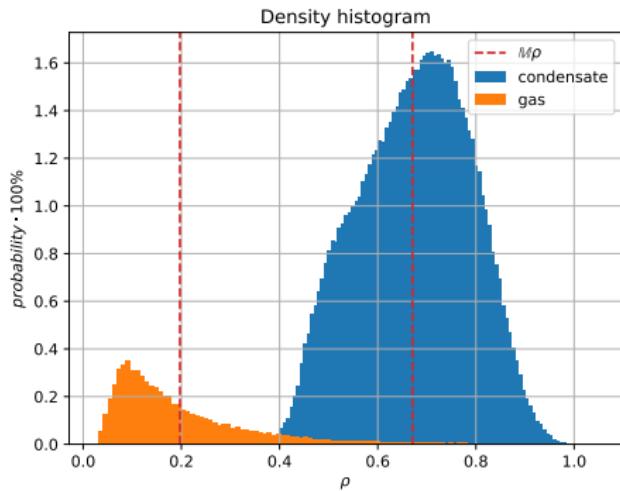
oo  
oo

Итоги ВКР

oo

Построение фазовой диаграммы

## Нахождение точек на фазовой диаграмме



Введение

ooo

Глава 2

○  
○○  
○○○○  
●○

Результаты Главы 2

ooooo  
ooooo

Глава 3

○  
○○  
○○

Результаты Главы 3

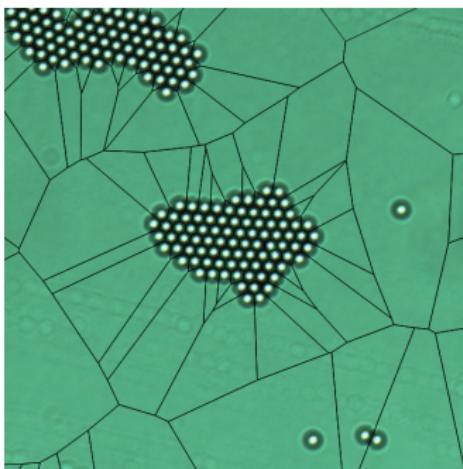
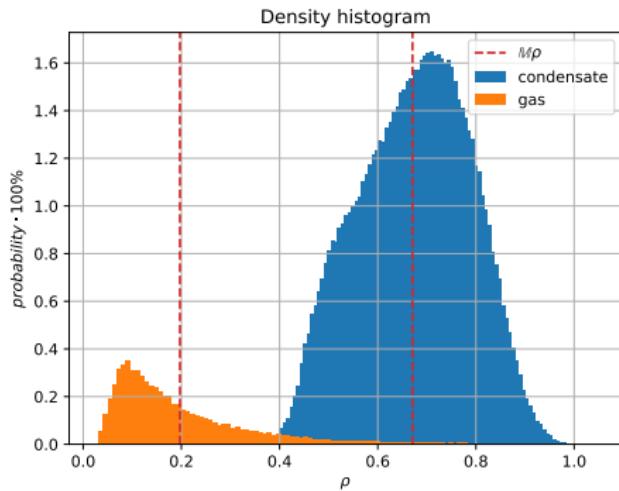
oo  
oo

Итоги ВКР

oo

Построение фазовой диаграммы

## Нахождение точек на фазовой диаграмме



Введение

ooo

Глава 2

○  
○○  
○○○○  
○●

Результаты Главы 2

ooooo  
ooooo

Глава 3

○  
○○  
○○

Результаты Главы 3

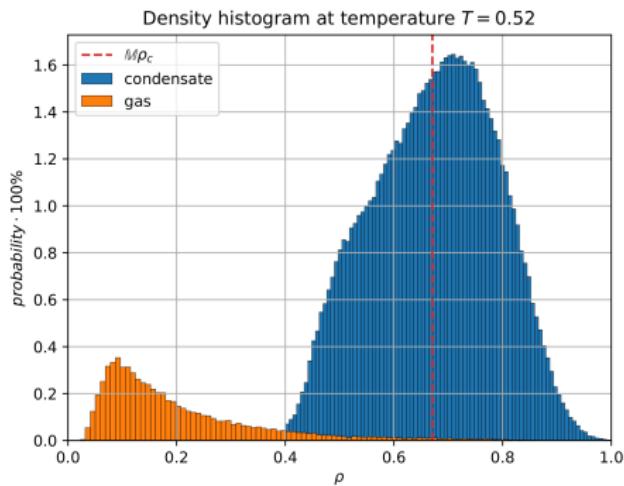
oo  
oo

Итоги ВКР

oo

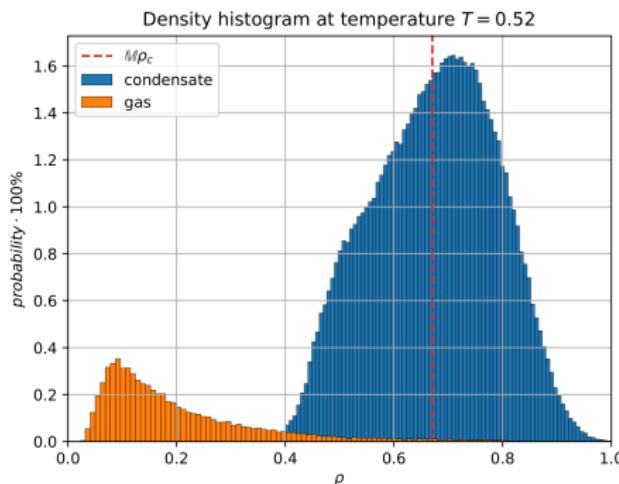
Построение фазовой диаграммы

## Изменения в определении плотности газа



Построение фазовой диаграммы

## Изменения в определении плотности газа



Плотность газа в системе  
вычисляется косвенно по формуле:

$$\rho_{gas} = \frac{N_g}{S - (N_b + N_c)/M\rho_c}, \quad (2)$$

где  $S$  - суммарная площадь всех рассматриваемых кадров,  $N_g$ ,  $N_b$ ,  $N_c$  - суммарное число частиц газа, поверхности и конденсата соответственно на всех рассматриваемых кадрах моделирования,  $M\rho_c$  - мат. ожидание плотности частиц конденсата на всех рассматриваемых кадрах.

Введение

ooo

Глава 2

○  
○○  
○○○○  
○○

Результаты Главы 2

●○○○○  
○○○○○

Глава 3

○  
○○

Результаты Главы 3

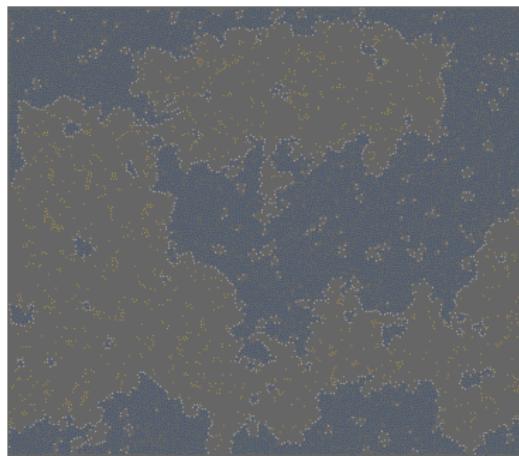
○○  
○○

Итоги ВКР

○○

Построение фазовых диаграмм для различных потенциалов взаимодействия

## Описание симулированных систем



**Рис. 9:** Система LJ 12-6 при  $T/T_{cp} = 0.95$ .

$$U(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^m \right], m = 3, 4, 5, 6. \quad (3)$$

Каждое моделирование проводилось при постоянной температуре и плотности. Статистика собрана по 150 кадрам моделирования, на каждом из которых примерно по 3600 частиц. Все величины на графиках являются обезразмеренными с помощью  $\epsilon = 1$ ,  $\sigma = 1$ ,  $m = 1$ ,  $k_B = 1$ .

|            | LJ12-3 | LJ12-4 | LJ12-5 | LJ12-6 |
|------------|--------|--------|--------|--------|
| $m$        | 3      | 4      | 5      | 6      |
| $\Delta T$ | 0.03   | 0.03   | 0.02   | 0.02   |
| $\rho_0$   | 0.28   | 0.4    | 0.4    | 0.4    |

**Таблица 1:** Параметры моделирования исследуемых систем.  $m$  - степень слагаемого в уравнении 3,  $\Delta T$  - шаг по температуре,  $\rho_0$  - плотность системы в целом.

Введение

ooo

Глава 2

o  
oo  
oooo  
oo

Результаты Главы 2

o●ooo  
oooo

Глава 3

o  
oo  
oo

Результаты Главы 3

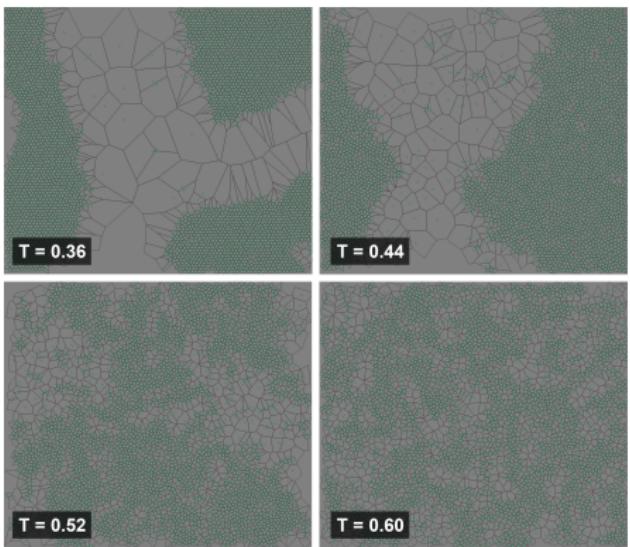
oo  
oo

Итоги ВКР

oo

Построение фазовых диаграмм для различных потенциалов взаимодействия

## Применение метода ячеек Вороного



**Рис. 10:** Разбиение на ячейки Вороного различной температуре исследуемой в данной работе системы на примере потенциала Леннарда-Джонса.

Введение

ooo

Глава 2

o  
oo  
oooo  
oo

Результаты Главы 2

o●ooo  
oooo

Глава 3

o  
oo  
oo

Результаты Главы 3

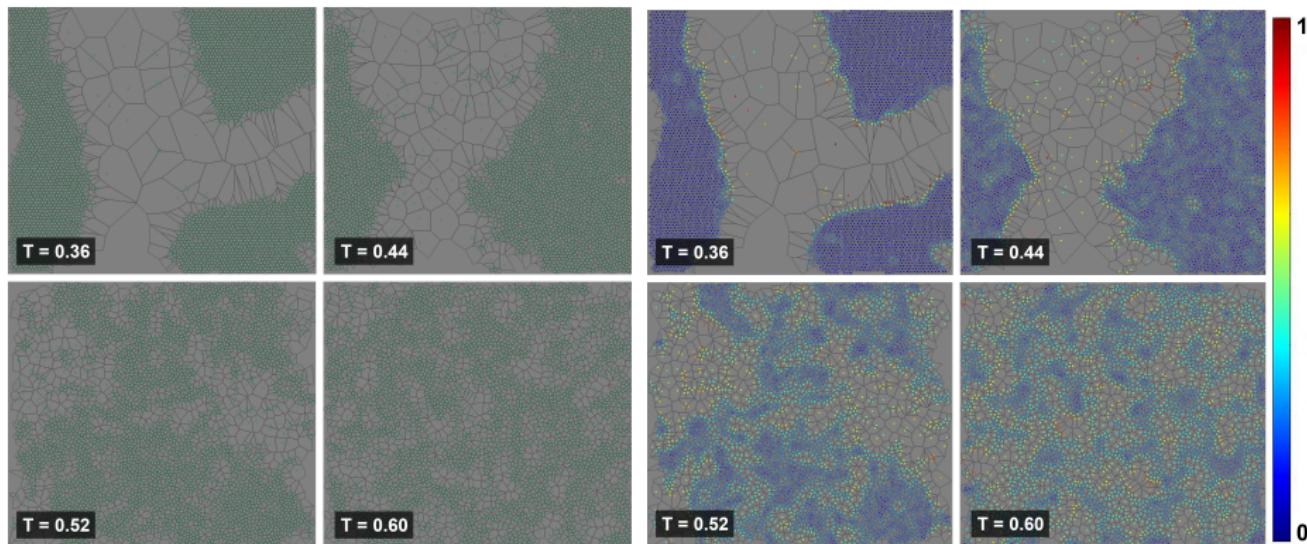
oo  
oo  
oo

Итоги ВКР

oo

Построение фазовых диаграмм для различных потенциалов взаимодействия

## Применение метода ячеек Вороного



**Рис. 10:** Разбиение на ячейки Вороного различной температуре исследуемой в данной работе системы на примере потенциала Леннарда-Джонса.

**Рис. 11:** Параметр иррегулярности  $R$  в исследуемой системе, на примере потенциала взаимодействия Леннарда-Джонса при различной температуре.

Введение

ooo

Глава 2

o  
oo  
oooo  
oo

Результаты Главы 2

oo●oo  
oooo

Глава 3

o  
oo  
oo

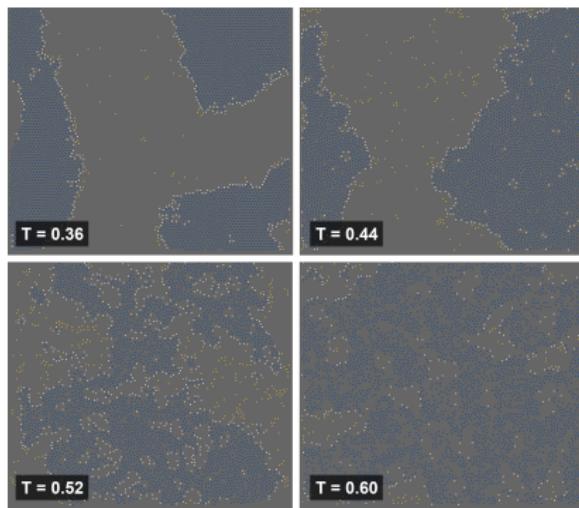
Результаты Главы 3

oo  
oo

Итоги ВКР

oo

Построение фазовых диаграмм для различных потенциалов взаимодействия



**Рис. 12:** Классификация частиц в исследуемой системе на примере системы с потенциалом взаимодействия Леннарда-Джонса при различной температуре.

ooo

○  
○○  
○○○○  
○○

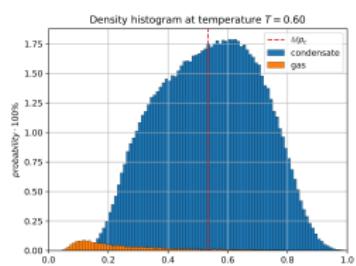
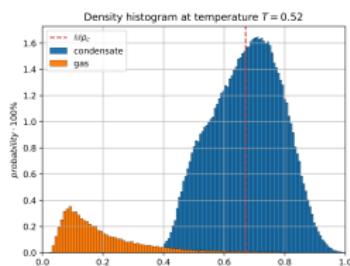
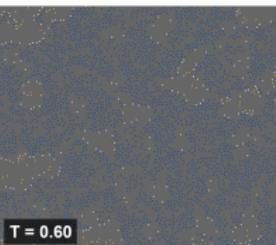
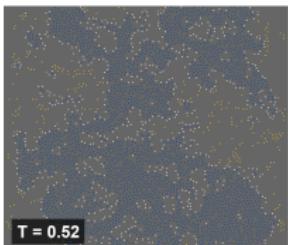
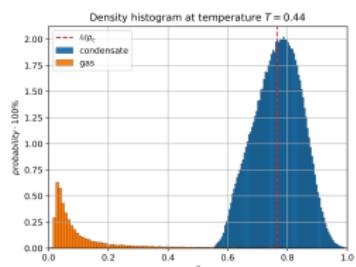
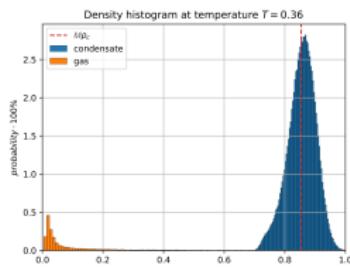
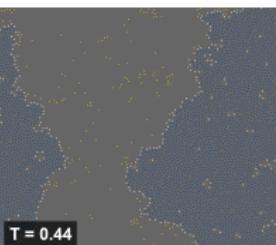
○○●○○  
○○○○○

○

○○

○○

### Построение фазовых диаграмм для различных потенциалов взаимодействия



**Рис. 12:** Классификация частиц в исследуемой системе на примере системы с потенциалом взаимодействия Леннарда-Джонса при различной температуре.

**Рис. 13:** Распределение плотностей частиц конденсата и газа при различных температурах. Синим цветом обозначен конденсат, оранжевым - газ.

## Введение

ooo

## Глава 2

 ○  
 ○○  
 ○○○○  
 ○○

## Результаты Главы 2

 ○○○●○  
 ○○○○○

## Глава 3

 ○  
 ○○

## Результаты Главы 3

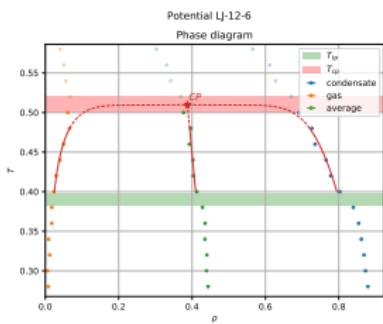
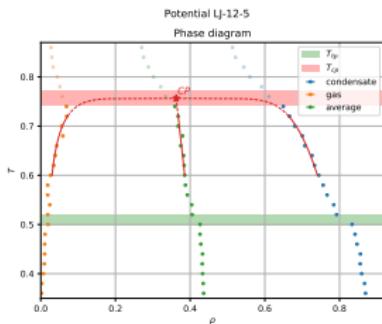
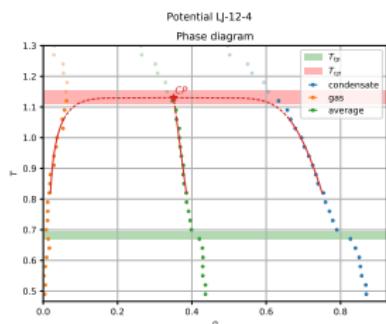
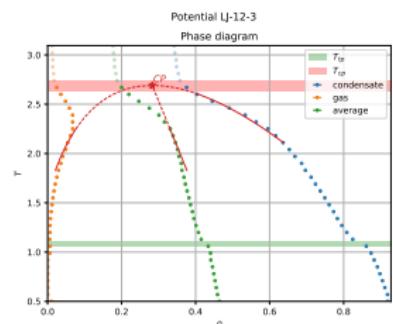
○○

## Итоги ВКР

○○

Построение фазовых диаграмм для различных потенциалов взаимодействия

## Фазовые диаграммы при различном притяжении



## Введение

ooo

## Глава 2

 ○  
 ○○  
 ○○○○  
 ○○

## Результаты Главы 2

 ○○○●○  
 ○○○○○

## Глава 3

 ○  
 ○○  
 ○○

## Результаты Главы 3

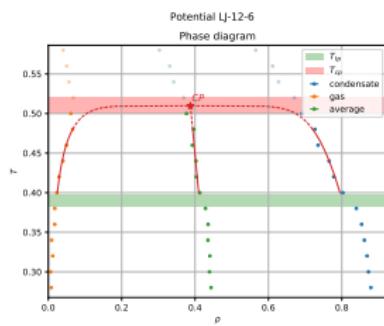
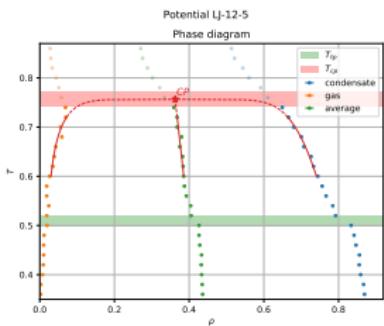
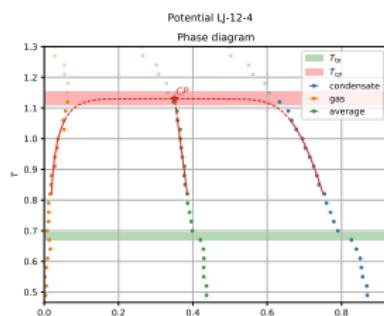
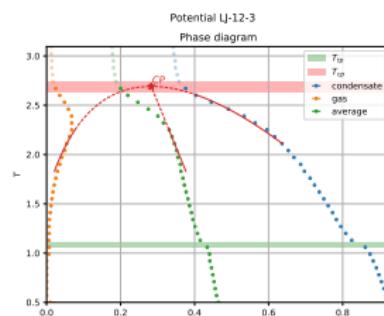
 ○○  
 ○○

## Итоги ВКР

○○

Построение фазовых диаграмм для различных потенциалов взаимодействия

# Фазовые диаграммы при различном притяжении



$$\begin{aligned} \rho_l - \rho_g &\simeq A(T_{CP} - T)^{\beta_c} \\ \frac{\rho_l + \rho_g}{2} &\simeq \rho_{CP} + a(T_{CP} - T) \end{aligned} \quad (4)$$

где  $T_{CP}$ ,  $\rho_{CP}$  - эффективная температура и плотность критической точки,  $A$ ,  $a$  - варьируемые параметры,  $\rho_l$ ,  $\rho_g$  - плотность жидкости и газа соответственно,  $\beta_c$  - критический индекс системы.

## Введение

ooo

## Глава 2

 ○  
 ○○  
 ○○○○  
 ○○

## Результаты Главы 2

 ○○○●○  
 ○○○○○

## Глава 3

 ○  
 ○○

## Результаты Главы 3

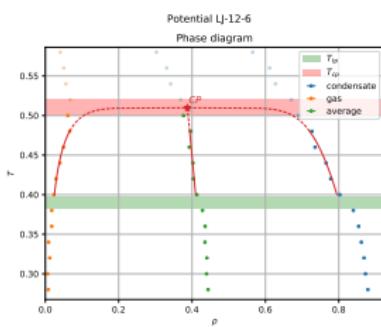
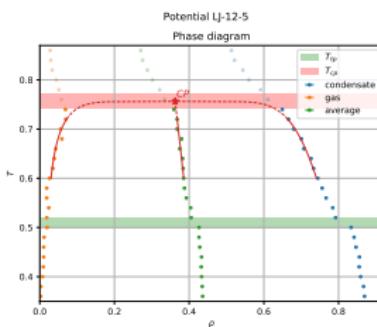
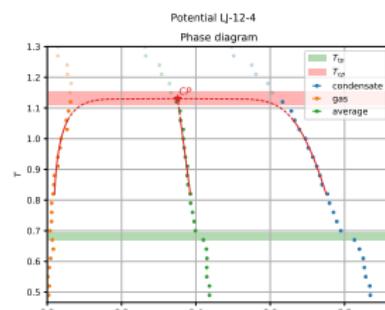
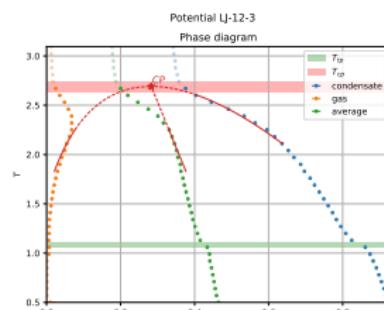
○○

## Итоги ВКР

○○

Построение фазовых диаграмм для различных потенциалов взаимодействия

## Фазовые диаграммы при различном притяжении



$$\rho_l - \rho_g \simeq A(T_{CP} - T)^{\beta_c}$$

$$\frac{\rho_l + \rho_g}{2} \simeq \rho_{CP} + a(T_{CP} - T)$$
(4)

где  $T_{CP}$ ,  $\rho_{CP}$  - эффективная температура и плотность критической точки,  $A$ ,  $a$  - варьируемые параметры,  $\rho_l$ ,  $\rho_g$  - плотность жидкости и газа соответственно,  $\beta_c$  - критический индекс системы.

|        | $T_{TP}$ | $T_{CP}$ | $\rho_{CP}$ |
|--------|----------|----------|-------------|
| LJ12-3 | 1.09     | 2.69     | 0.28        |
| LJ12-4 | 0.68     | 1.13     | 0.35        |
| LJ12-5 | 0.51     | 0.76     | 0.36        |
| LJ12-6 | 0.40     | 0.51     | 0.39        |

**Таблица 2:** Параметры фазовых диаграмм для различных потенциалов взаимодействия.  $T_{CP}$  - критическая температура,  $\rho_{CP}$  - критическая плотность системы,  $T_{TP}$  - температура тройной точки.

Введение

ooo

Глава 2

o  
oo  
oooo  
oo

Результаты Главы 2

oooo●  
oooo

Глава 3

o  
oo  
oo

Результаты Главы 3

oo  
oo

Итоги ВКР

oo

Построение фазовых диаграмм для различных потенциалов взаимодействия

## Влияние дальнодействия притяжения

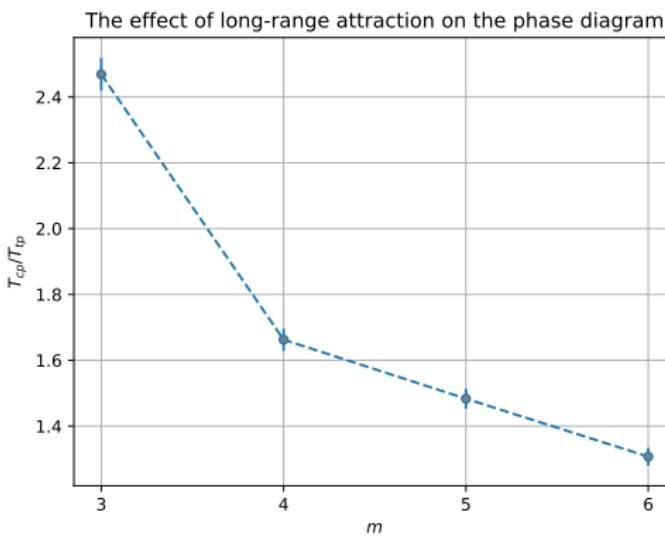


Рис. 14: Отношение температур критической к тройной в зависимости от степени  $m$  в уравнении 3 потенциала.

Введение

ooo

Глава 2

○  
○○  
○○○  
○○

Результаты Главы 2

ooooo  
●○○○○

Глава 3

○  
○○

Результаты Главы 3

oo  
oo

Итоги ВКР

oo

Анализ гистограмм распределения плотностей

## Анализ гистограмм распределения плотностей

Равновесные колебания вблизи среднего значения объема определяются уравнением состояния системы, и соответствующая функция распределения вероятности  $p(V)$  равна:

$$p(V) \propto \exp \left[ \frac{1}{2T} \left( \frac{\partial P}{\partial V} \right) (V - V_0)^2 \right], \quad (5)$$

где  $P$  - давление,  $V_0$  - максимум распределения объема,  $V$  - объем.

Сделав замену  $V = 1/\rho$ , получим следующее уравнение для аппроксимации верхушки гистограмм:

$$p(\rho) \propto \exp \left[ -K (\rho_{max} - \rho)^2 \right] \quad (6)$$

$$K = \frac{1}{2T\rho_{max}^2} \left( \frac{\partial P}{\partial \rho} \right)$$

где  $\rho_{max}$  - плотность максимума распределения.

## Введение

ooo

## Глава 2

 ○  
 ○○  
 ○○○  
 ○○

## Результаты Главы 2

 ○○○○○  
 ●○○○○

## Глава 3

 ○  
 ○○

## Результаты Главы 3

 ○○  
 ○○

## Итоги ВКР

○○

## Анализ гистограмм распределения плотностей

## Анализ гистограмм распределения плотностей

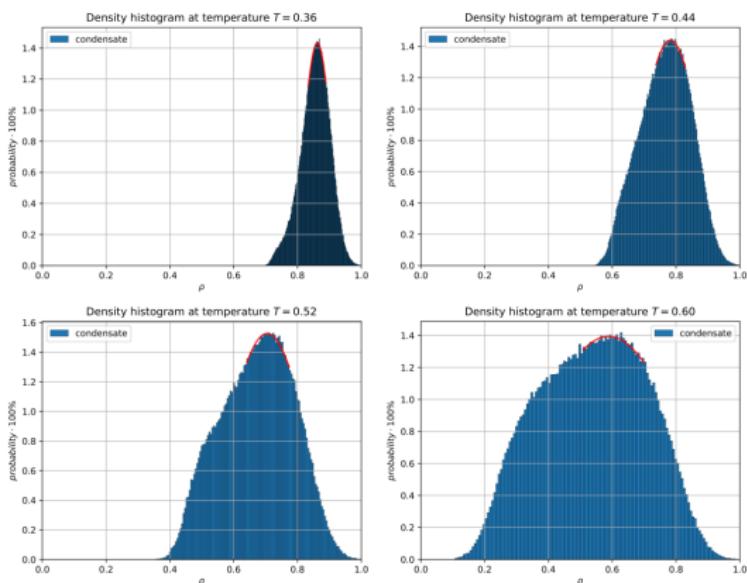
Равновесные колебания вблизи среднего значения объема определяются уравнением состояния системы, и соответствующая функция распределения вероятности  $p(V)$  равна:

$$p(V) \propto \exp \left[ \frac{1}{2T} \left( \frac{\partial P}{\partial V} \right) (V - V_0)^2 \right], \quad (5)$$

где  $P$  - давление,  $V_0$  - максимум распределения объема,  $V$  - объем. Сделав замену  $V = 1/\rho$ , получим следующее уравнение для аппроксимации верхушки гистограмм:

$$p(\rho) \propto \exp \left[ -K (\rho_{max} - \rho)^2 \right] \\ K = \frac{1}{2T \rho_{max}^2} \left( \frac{\partial P}{\partial \rho} \right) \quad (6)$$

где  $\rho_{max}$  - плотность максимума распределения.



**Рис. 15:** Аппроксимация пика распределения плотности при различной температуре на примере потенциала LJ12-6.

## Введение

ooo

## Глава 2

- 
- 
- 
- 

## Результаты Главы 2

- ooooo
- 

## Глава 3

- 
- 

## Результаты Главы 3

- oo
- oo

## Итоги ВКР

oo

## Анализ гистограмм распределения плотностей

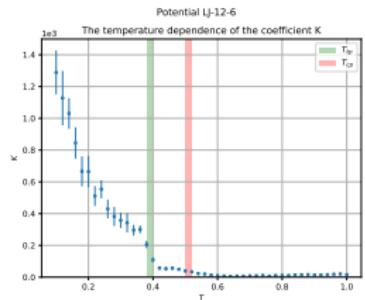
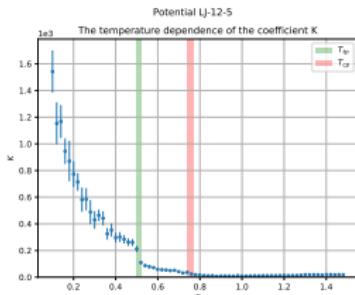
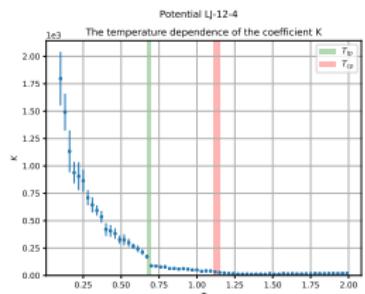
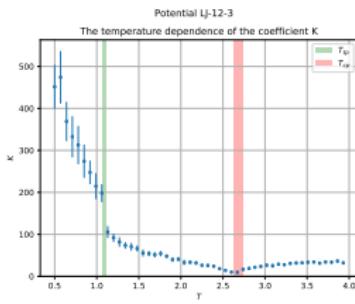


Рис. 16: Температурная зависимость коэффициента  $K$ .

## Введение

ooo

## Глава 2

- 
- 
- 
- 

## Результаты Главы 2

- ooooo
- 

## Глава 3

- 
- 

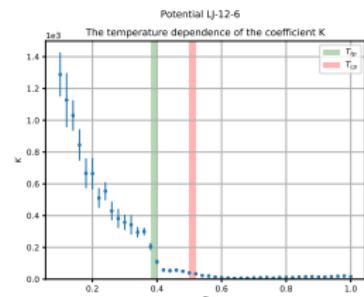
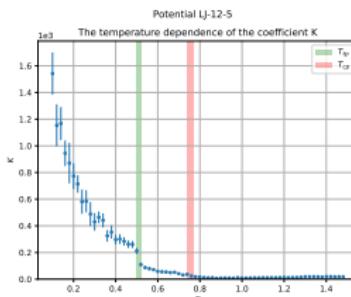
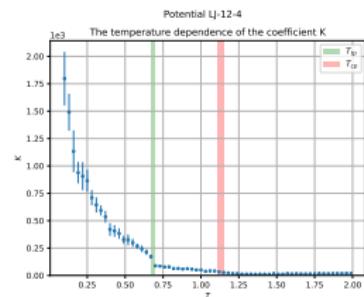
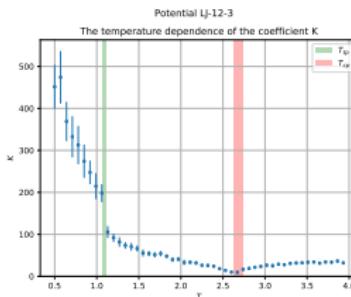
## Результаты Главы 3

- oo
- oo

## Итоги ВКР

oo

## Анализ гистограмм распределения плотностей



По коэффициенту  $K$  можно определить сжимаемость и адиабатическая скорость звука:

$$\beta = \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \rho}{\partial P}$$

$$C = \sqrt{\frac{\partial P}{\partial \rho}}, \quad (7)$$

где  $\beta$  - сжимаемости,  $C$  - скорость звука в веществе.

Выразив данные величины через коэффициент  $K$ , получим следующие формулы:

$$\beta = \frac{1}{2T\rho_0\rho_{max}^2 K} \quad (8)$$

$$C = \rho_{max} \sqrt{2TK}$$

Рис. 16: Температурная зависимость коэффициента  $K$ .

## Введение

ooo

## Глава 2

○  
○○  
○○○○  
○○

## Результаты Главы 2

○○○○○  
○○●○○

## Глава 3

○  
○○  
○○

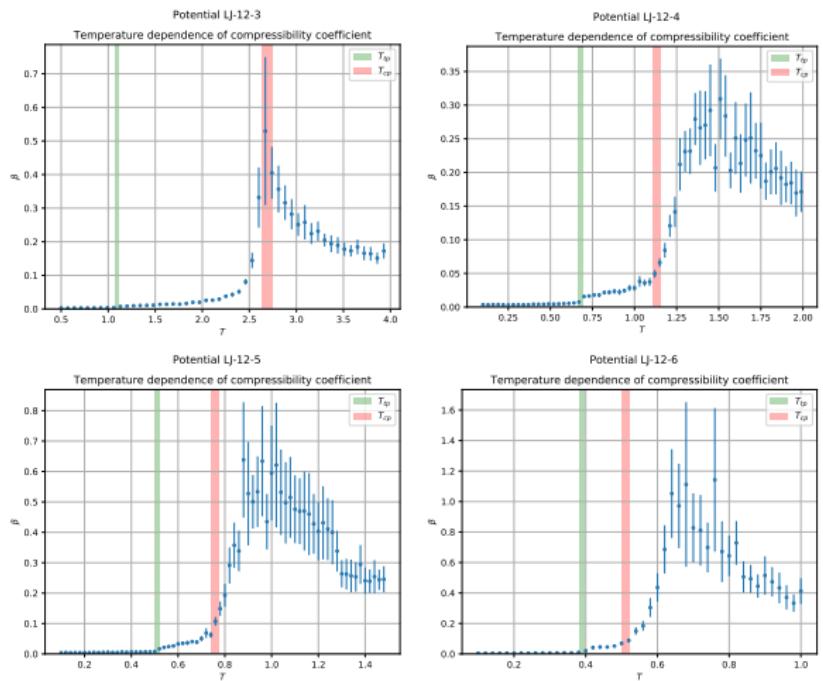
## Результаты Главы 3

○○  
○○

## Итоги ВКР

○○

## Анализ гистограмм распределения плотностей



**Рис. 17:** Температурная зависимость  $\beta$  при различных потенциалах.

Введение

ooo

Глава 2

○  
○○  
○○○○  
○○

Результаты Главы 2

○○○○○  
○○○●○

Глава 3

○  
○○

Результаты Главы 3

○○  
○○

Итоги ВКР

○○

### Анализ гистограмм распределения плотностей

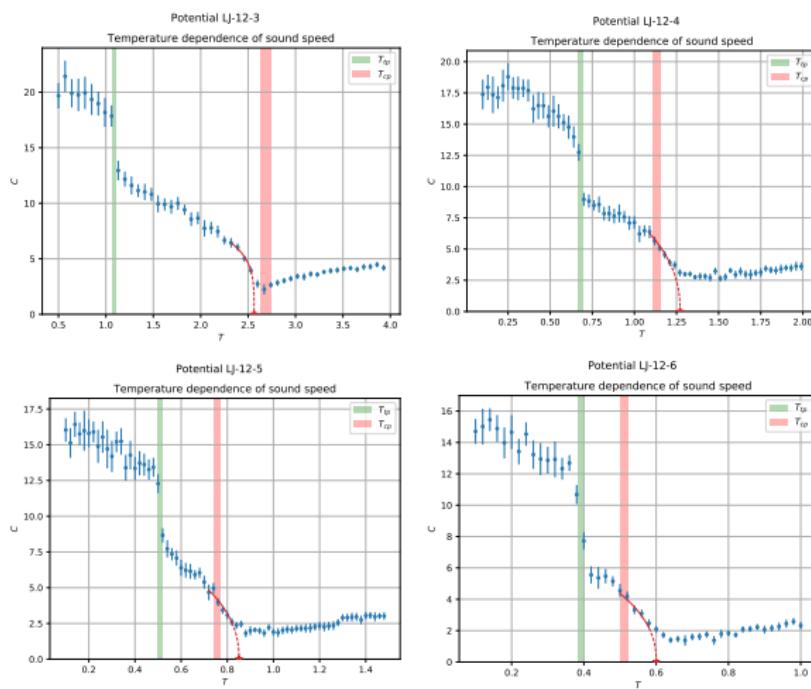


Рис. 18: Температурная зависимость скорости звука при различных потенциалах.

## Введение

ooo

## Глава 2

- 
- 
- 
- 

## Результаты Главы 2

- ooooo
- oooo●

## Глава 3

- 
- 

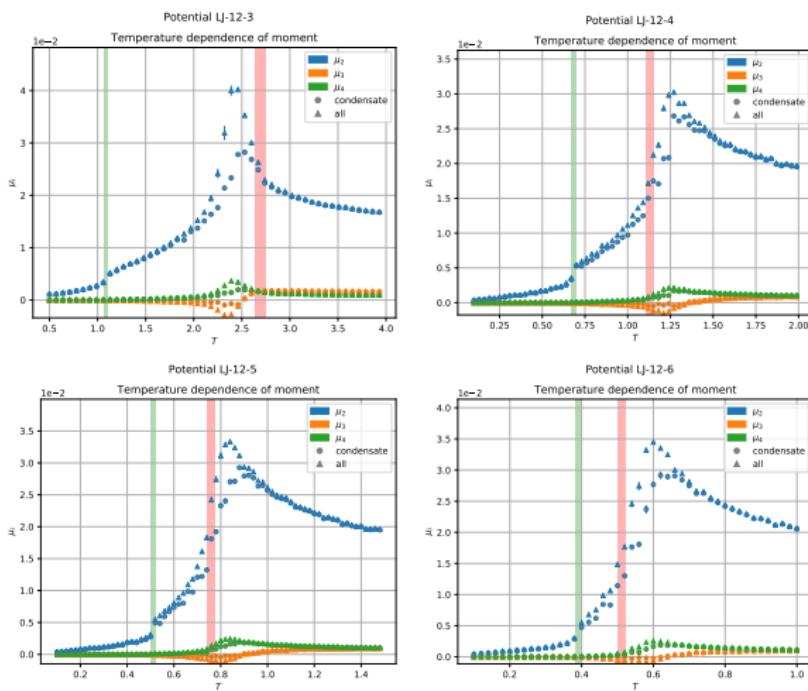
## Результаты Главы 3

- oo
- oo

## Итоги ВКР

oo

## Анализ гистограмм распределения плотностей



**Рис. 19:** Температурная зависимость моментов величины  $\mu_i = M[|\rho - M\rho|^i]$ .

Введение

ooo

Глава 2

о  
оо  
оооо  
оо

Результаты Главы 2

ooooo  
oooo

Глава 3

●  
oo

Результаты Главы 3

oo  
oo

Итоги ВКР

oo

## ГЛАВА 3

«ДИФФУЗИЯ ОТ ТРОЙНОЙ ДО  
КРИТИЧЕСКОЙ ТОЧКИ»

Введение  
ooo

Глава 2  
o  
oo  
oooo  
oo

Результаты Главы 2  
oooo  
oooo

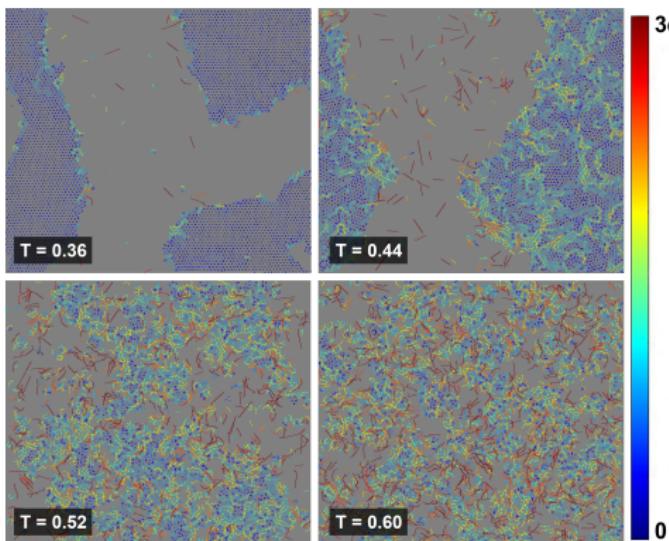
Глава 3  
o  
●o

Результаты Главы 3  
oo  
oo

Итоги ВКР  
oo

Вычисление параметров переноса

## Вычисление коэффициента диффузии методами МД



Зная смещения всех частиц от их изначального положения в системе, с  $t = 0$ , можно рассчитать среднеквадратичное смещение частиц с помощью уравнения:

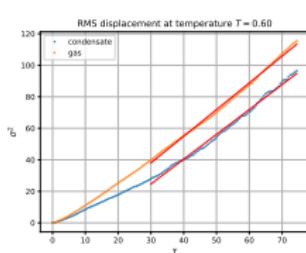
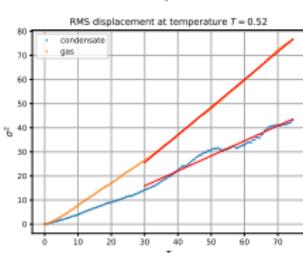
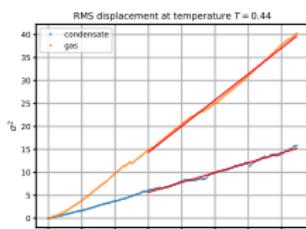
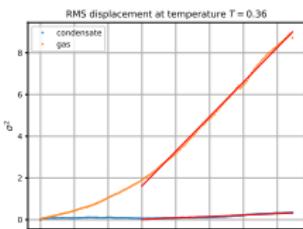
$$\sigma^2(t) = \sum_{\alpha=1}^{N(t)} (r_{\alpha}(t) - r_{\alpha}(0))^2 / N(t), \quad (9)$$

где  $\sigma^2(t)$  - среднеквадратичное смещение частиц,  $N(t)$  - количество частиц в данный момент времени в кадре,  $r_{\alpha}(t)$  - положение частицы в момент времени  $t$ ,  $r_{\alpha}(0)$  - положение частицы в начальный момент времени  $t = 0$ .

**Рис. 20:** Смещение частиц от начального положения за 10 кадров моделирования. Цветом показана величина смещения в  $\sigma$  (единица измерения длины).

## Вычисление параметров переноса

## Вычисление коэффициента диффузии методами МД



**Рис. 21:** Временная зависимость среднеквадратичного смещения частиц для различных температур на примере потенциала Леннарда-Джонса.

Так как для двумерной системы верно равенство  $\sigma^2(t) = 4Dt$ , то коэффициент диффузии выражается следующей формулой:

$$D = \frac{\sigma^2(t)}{4t}, \quad (10)$$

где  $D$  - коэффициент диффузии в веществе.

Его можно получить путем аппроксимации среднеквадратичного смещения функцией  $\sigma^2(t) = 4Dt + a$ , где  $a$  - подгоночный коэффициент.

Кроме диффузии можно вычислить мобильность частиц в системе, которая определяется следующим уравнением:

$$\mu = \frac{D}{T}, \quad (11)$$

где  $\mu$  - мобильность частиц.

## Введение

ooo

## Глава 2

- 
- 
- 
- 

## Результаты Главы 2

- ooooo
- ooooo

## Глава 3

- 
- 

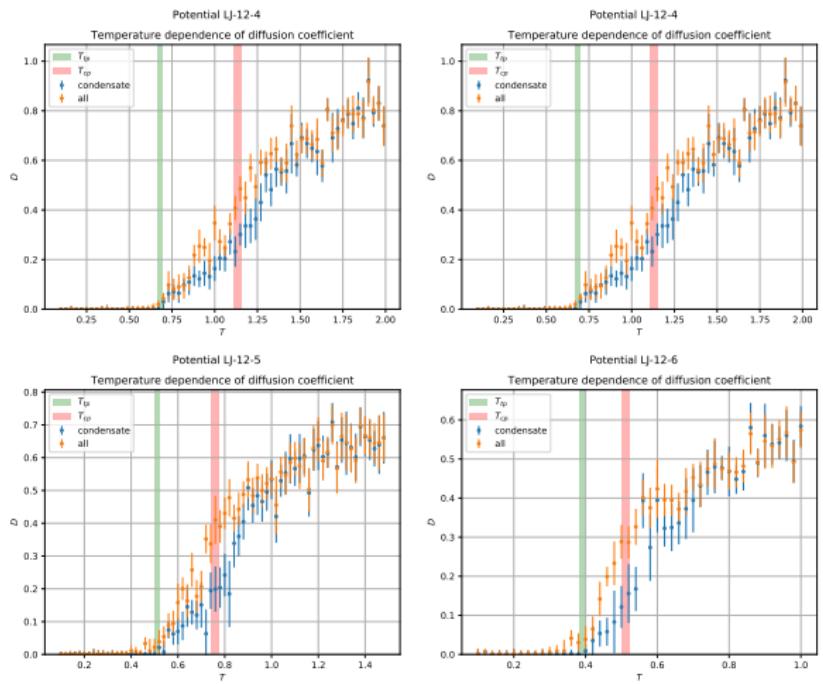
## Результаты Главы 3

- 
- 

## Итоги ВКР

oo

## Температурная зависимость диффузии и мобильности



**Рис. 22:** Температурная зависимость коэффициента диффузии для различных потенциалов взаимодействия. Не доделана!

Введение

ooo

Глава 2

o  
oo  
oooo  
oo

Результаты Главы 2

ooooo  
oooo

Глава 3

o  
oo

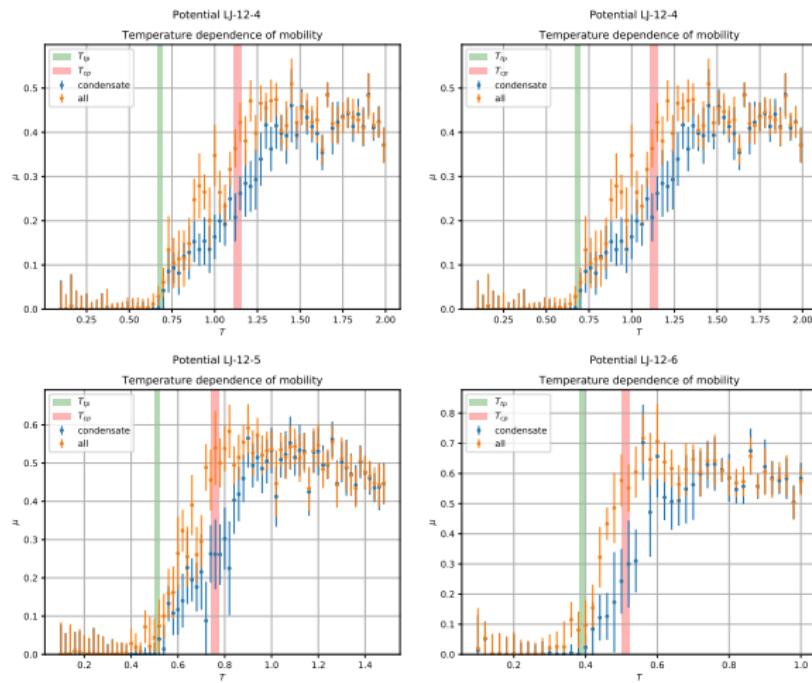
Результаты Главы 3

o●  
oo

Итоги ВКР

oo

## Температурная зависимость диффузии и мобильности



**Рис. 23:** Температурная зависимость мобильности для различных потенциалов взаимодействия. Не доделана!

## Введение

ooo

## Глава 2

- 
- 
- 
- 

## Результаты Главы 2

- ooooo
- ooooo

## Глава 3

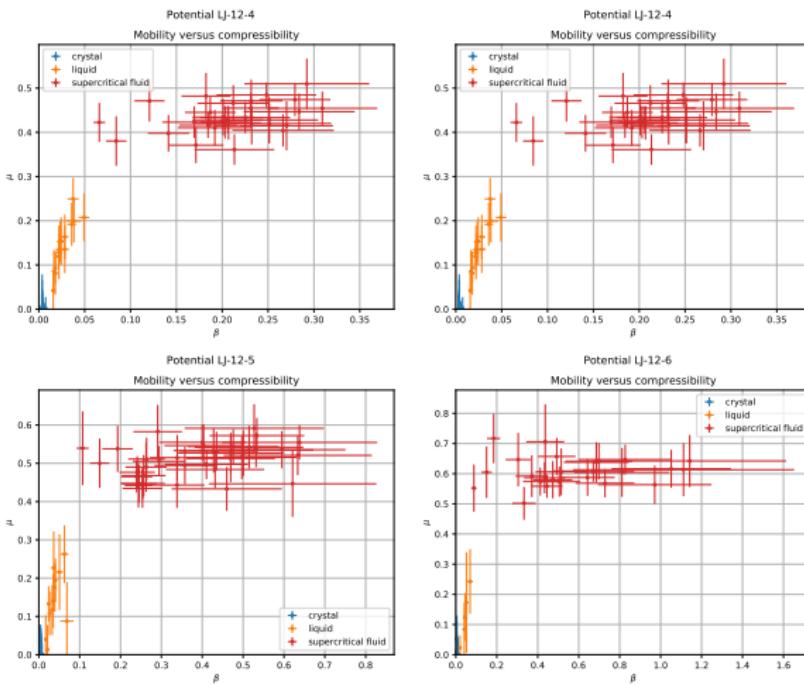
- 
- 
- 

## Результаты Главы 3

## Итоги ВКР

oo

## Взаимосвязь термодинамических параметров, и параметров переноса



**Рис. 24:** Зависимость мобильности от сжимаемости для различных потенциалов. Не доделана!

## Введение

ooo

## Глава 2

 ○  
 ○○  
 ○○○  
 ○○

## Результаты Главы 2

 ○○○○○  
 ○○○○

## Глава 3

 ○  
 ○○  
 ○●

## Результаты Главы 3

## Итоги ВКР

○○

## Взаимосвязь термодинамических параметров, и параметров переноса

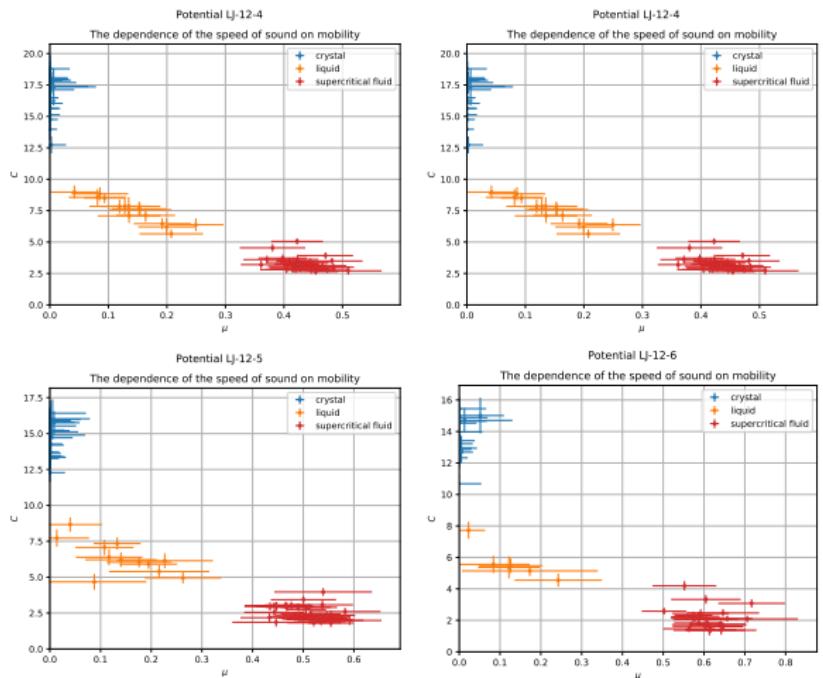


Рис. 25: Зависимость скорости звука от мобильности для различных потенциалов. Не доделана!

Введение

ooo

Глава 2

о  
оо  
оооо  
оо

Результаты Главы 2

ooooo  
ooooo

Глава 3

о  
оо

Результаты Главы 3

оо  
оо

Итоги ВКР

●о

## Выводы работы

1. Была проведена модернизация алгоритма классификации и определение плотностей фаз в системе.
2. Установлена роль притяжения на фазовые диаграммы систем с потенциалом обобщенного Леннарда - Джонса.
3. Представлен способ определения сжимаемости и скорости звука в веществе, используя только распределение плотностей ячеек вороного, а так же способ определения линии Уидома для плотности.
4. Показано, что температурная зависимость мобильности частиц зависит линейно от температуры в промежутке между тройной и критической точкой.
5. Кроме того, была рассмотрена связь термодинамических свойств системы с параметрами переноса в веществе, предложен способ классификации с помощью нейронной сети.

Введение

ooo

Глава 2

o  
oo  
ooo  
oo

Результаты Главы 2

ooooo  
oooo

Глава 3

o  
oo

Результаты Главы 3

oo  
oo

Итоги ВКР

o●

Спасибо за внимание!