

Введение

ooo

Глава 2

о
оо
оооо
оо

Результаты Главы 2

ooooo
ooooo

Глава 3

о
оо

Результаты Главы 3

оо
ooo

Итоги ВКР

о

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

о●о

Глава 2о
оо
оооо
оо**Результаты Главы 2**ooooo
oooo**Глава 3**о
оо**Результаты Главы 3**оо
ooo**Итоги ВКР**

о

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 2o
oo
ooo
oo**Результаты Главы 2**ooooo
oooo**Глава 3**o
oo**Результаты Главы 3**oo
ooo**Итоги ВКР**

o

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
ooo

Итоги ВКР

o

ГЛАВА 2

«ВЛИЯНИЕ ДАЛЬНОДЕЙСТВИЯ ПРИТЯЖЕНИЯ НА
ФАЗОВЫЕ ДИАГРАММЫ»

Введение

ooo

Глава 2

○
●○
○○○○
○○

Результаты Главы 2

ooooo
ooooo

Глава 3

○
○○

Результаты Главы 3

oo
ooo

Итоги ВКР

o

Разбиение на ячейки вороного

Разбиение на ячейки вороного

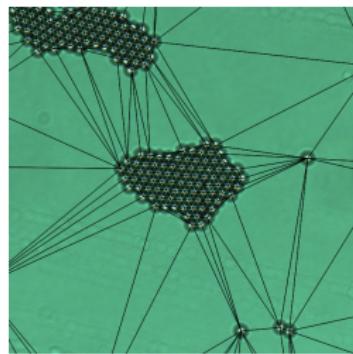


Рис. 1: Триангуляция
Делоне

Введение

ooo

Глава 2

○
●○
○○○○
○○

Результаты Главы 2

ooooo
ooooo

Глава 3

○
○○

Результаты Главы 3

oo
ooo

Итоги ВКР

o

Разбиение на ячейки вороного

Разбиение на ячейки вороного

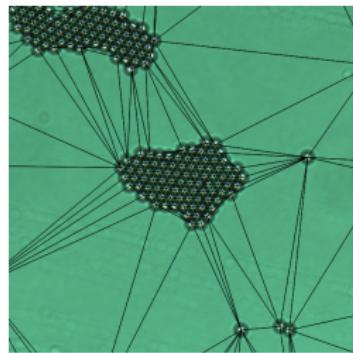


Рис. 1: Триангуляция
Делоне

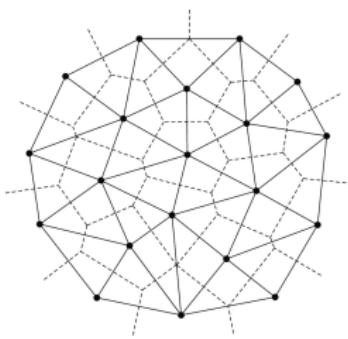


Рис. 2: Проведение
перпендикуляров

Введение

ooo

Глава 2

○
●○
○○○○
○○

Результаты Главы 2

ooooo
ooooo

Глава 3

○
○○

Результаты Главы 3

oo
ooo

Итоги ВКР

○

Разбиение на ячейки вороного

Разбиение на ячейки вороного

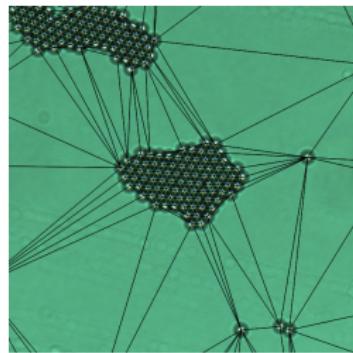


Рис. 1: Триангуляция
Делоне

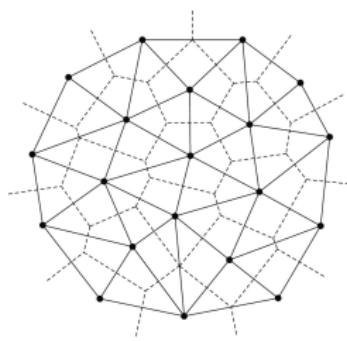


Рис. 2: Проведение
перпендикуляров

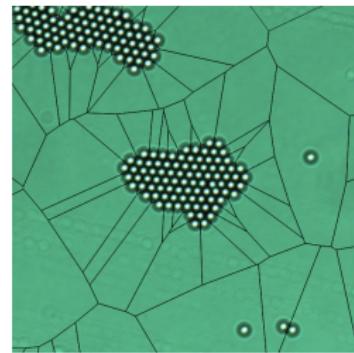


Рис. 3: Ячейки
Вороного

Введение

ooo

Глава 2

○
○●
○○○
○○

Результаты Главы 2

ooooo
ooooo

Глава 3

○
○○
ooo

Результаты Главы 3

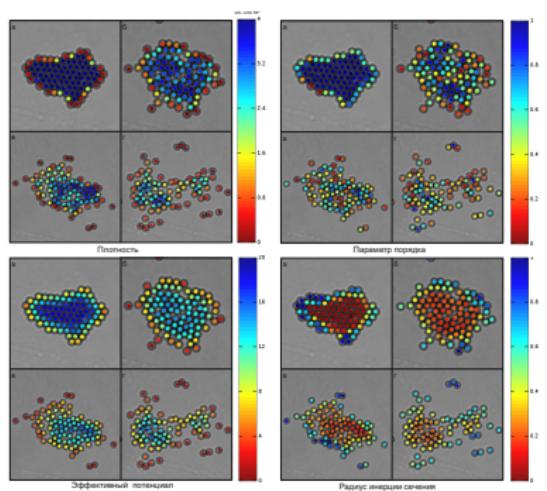
○
oo
ooo

Итоги ВКР

○

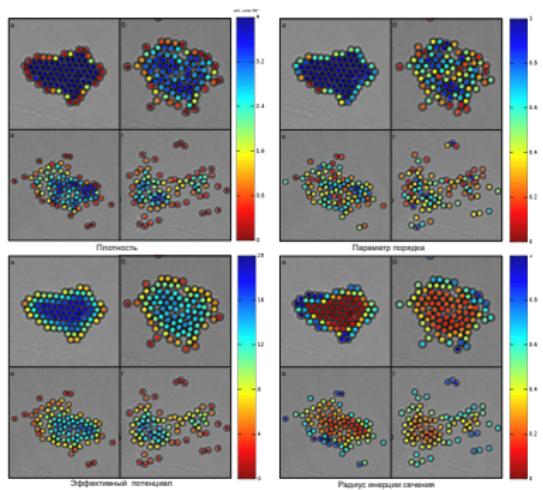
Разбиение на ячейки вороного

Разбиение на ячейки вороного



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

○
○○
ooo

Результаты Главы 3

oo
ooo

Итоги ВКР

○

Метод распознавания фаз

Параметр иррегулярности R

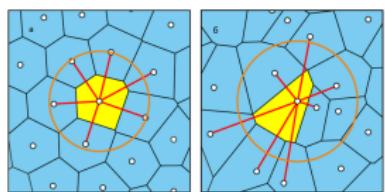


Рис. 4: а) Кристалл б) Газ.

Введение

ooo

Глава 2

○
○○
●○○
○○

Результаты Главы 2

ooooo
ooooo

Глава 3

○
○○

Результаты Главы 3

oo
ooo

Итоги ВКР

○

Метод распознавания фаз

Параметр иррегулярности R

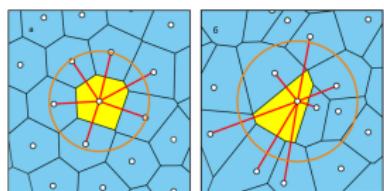


Рис. 4: а) Кристалл б) Газ.

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

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

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

Метод распознавания фаз

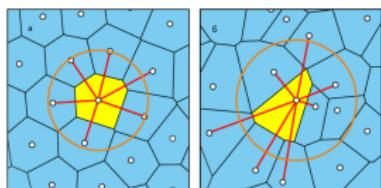
Параметр иррегулярности R 

Рис. 4: а) Кристалл б) Газ.

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

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

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

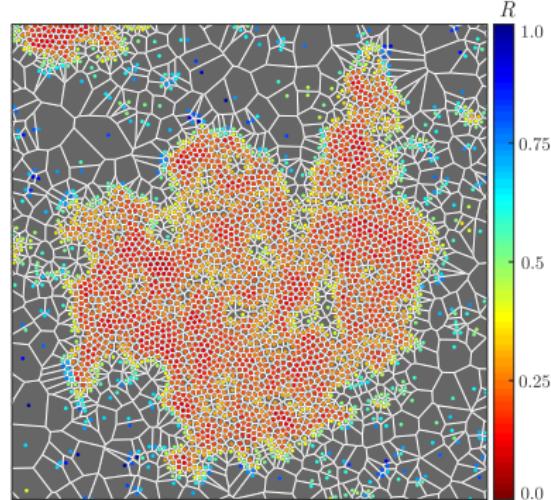


Рис. 5: Распределение параметра R.

Метод распознавания фаз

Корректировка фаз

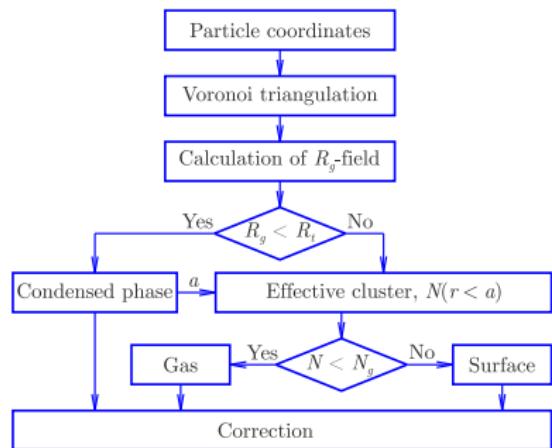
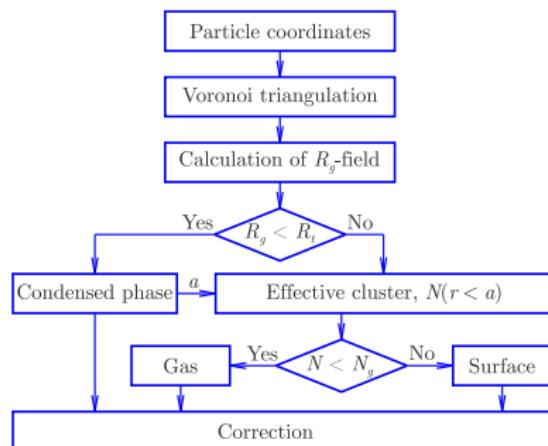


Рис. 6: Полный алгоритм классификации частиц в системе.

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
ooo

Итоги ВКР

○

Метод распознавания фаз

Недостатки метода распознавания фаз

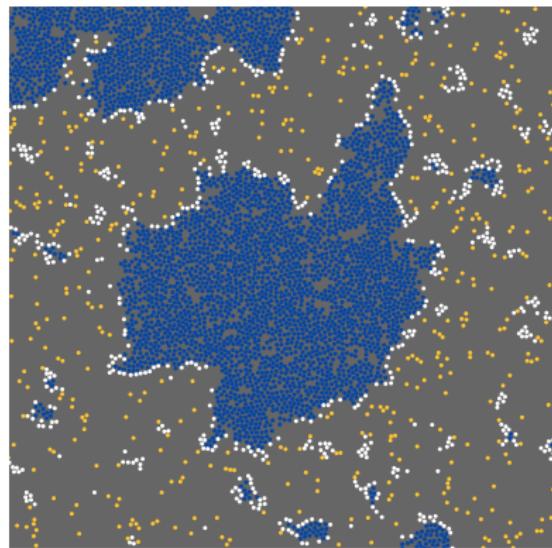


Рис. 7: Результат алгоритма классификации.

Введение

ooo

Глава 2

○
○○
○○●○
○○

Результаты Главы 2

ooooo
ooooo

Глава 3

○
○○

Результаты Главы 3

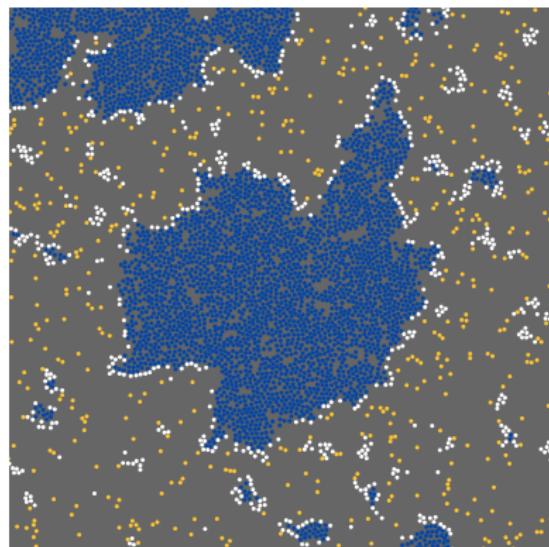
oo
ooo

Итоги ВКР

o

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
ooo

Итоги ВКР

○

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
ooo

Итоги ВКР

○

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.

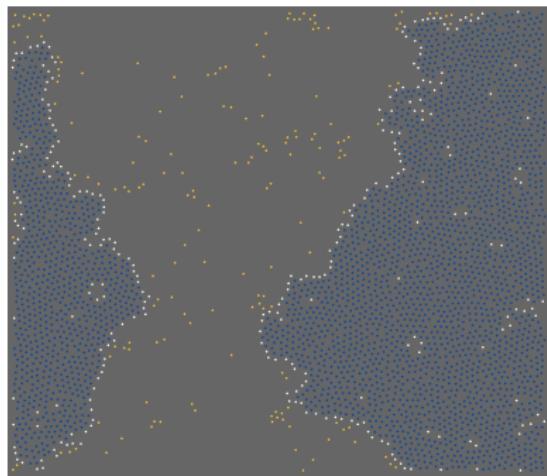


Рис. 8: Результат обновленного алгоритма классификации.

Введение

ooo

Глава 2

○
○○
○○○
●○

Результаты Главы 2

ooooo
ooooo

Глава 3

○
○○
ooo

Результаты Главы 3

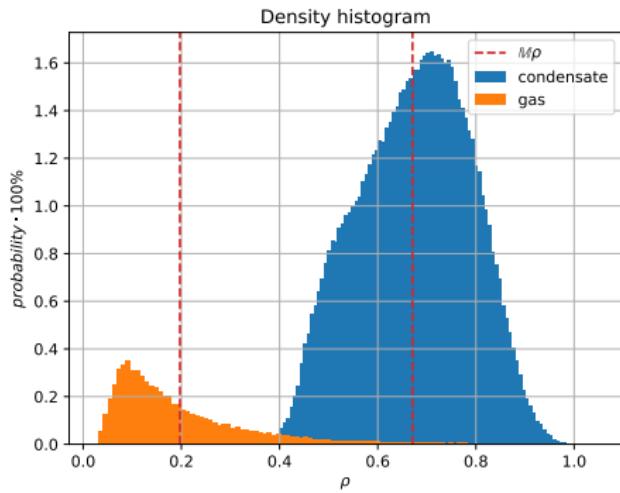
oo
ooo

Итоги ВКР

o

Построение фазовой диаграммы

Нахождение точек на фазовой диаграмме



Введение

ooo

Глава 2

○
○○
○○○
●○

Результаты Главы 2

ooooo
ooooo

Глава 3

○
○○

Результаты Главы 3

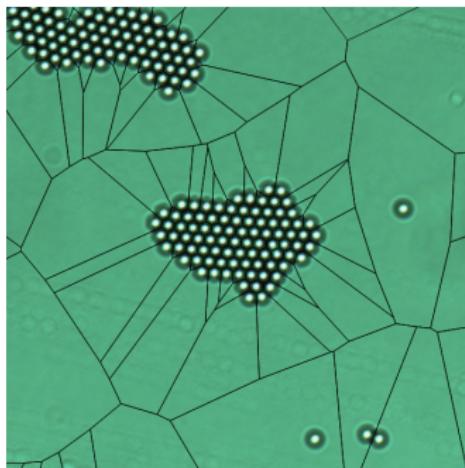
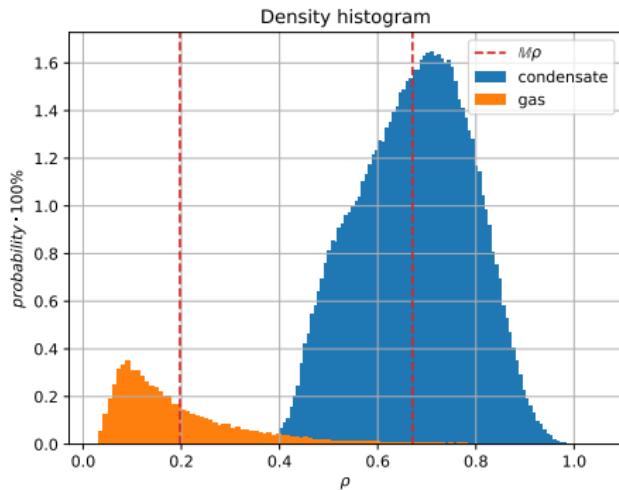
oo
ooo

Итоги ВКР

o

Построение фазовой диаграммы

Нахождение точек на фазовой диаграмме



Введение

ooo

Глава 2

○
○○
○○○○
○●

Результаты Главы 2

ooooo
ooooo

Глава 3

○
○○

Результаты Главы 3

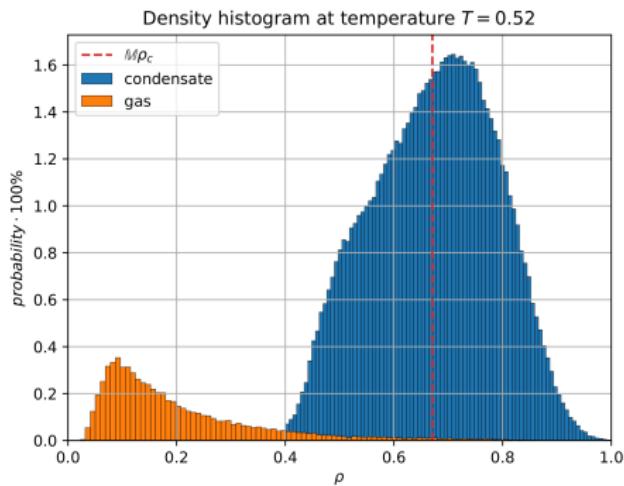
oo
ooo

Итоги ВКР

o

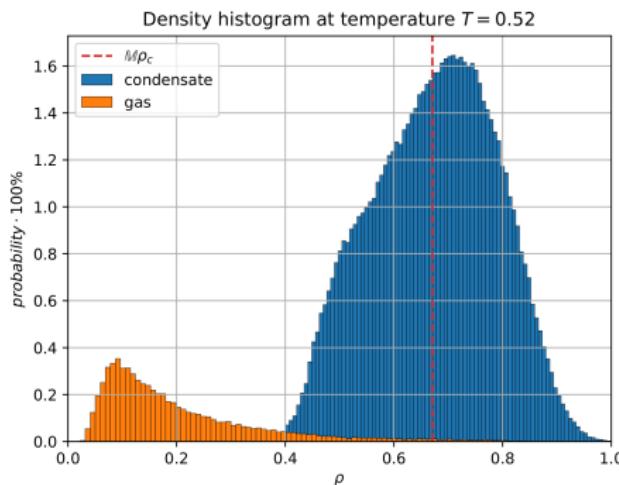
Построение фазовой диаграммы

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

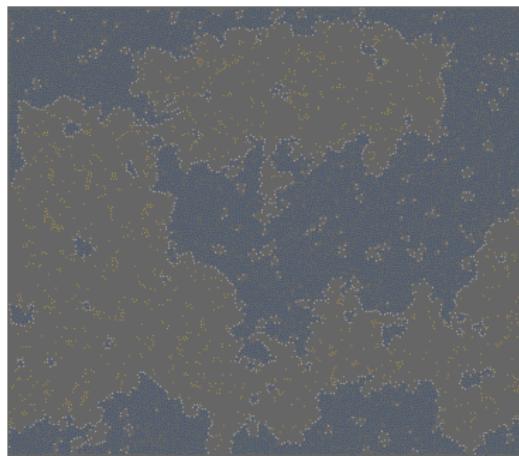


Рис. 9: Система LJ 12-6 при $T/T_{cp} = 0.95$.

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

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
ΔT	0.03	0.03	0.02	0.02
ρ_0	0.28	0.4	0.4	0.4

Таблица 1: Параметры моделирования исследуемых систем. m - степень слагаемого в уравнении 3, ΔT - шаг по температуре, ρ_0 - плотность системы в целом.

Введение

ooo

Глава 2

o
oo
oooo
oo

Результаты Главы 2

o●ooo
oooo

Глава 3

o
oo

Результаты Главы 3

oo
ooo

Итоги ВКР

o

Построение фазовых диаграмм для различных потенциалов взаимодействия

Применение метода ячеек Вороного

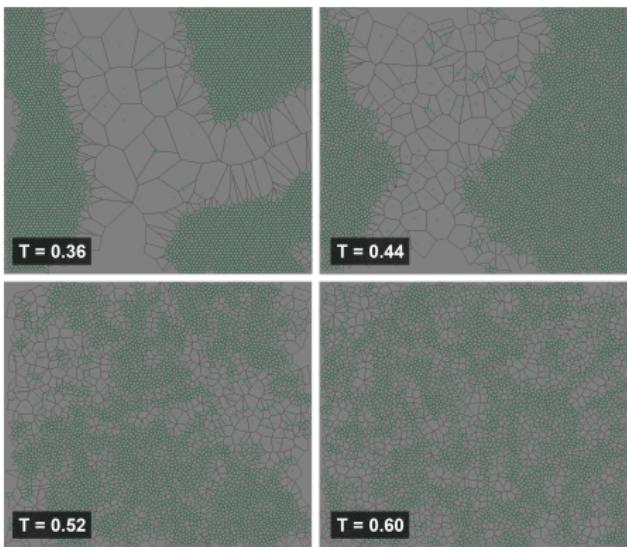


Рис. 10: Разбиение на ячейки Вороного различной температуре исследуемой в данной работе системы на примере потенциала Леннарда-Джонса.

Введение
ооо

Глава 2
о
оо
оооо
оо

Результаты Главы 2
о●ooo
oooo

Глава 3
о
оо

Результаты Главы 3
оо
ooo

Итоги ВКР
о

Построение фазовых диаграмм для различных потенциалов взаимодействия

Применение метода ячеек Вороного

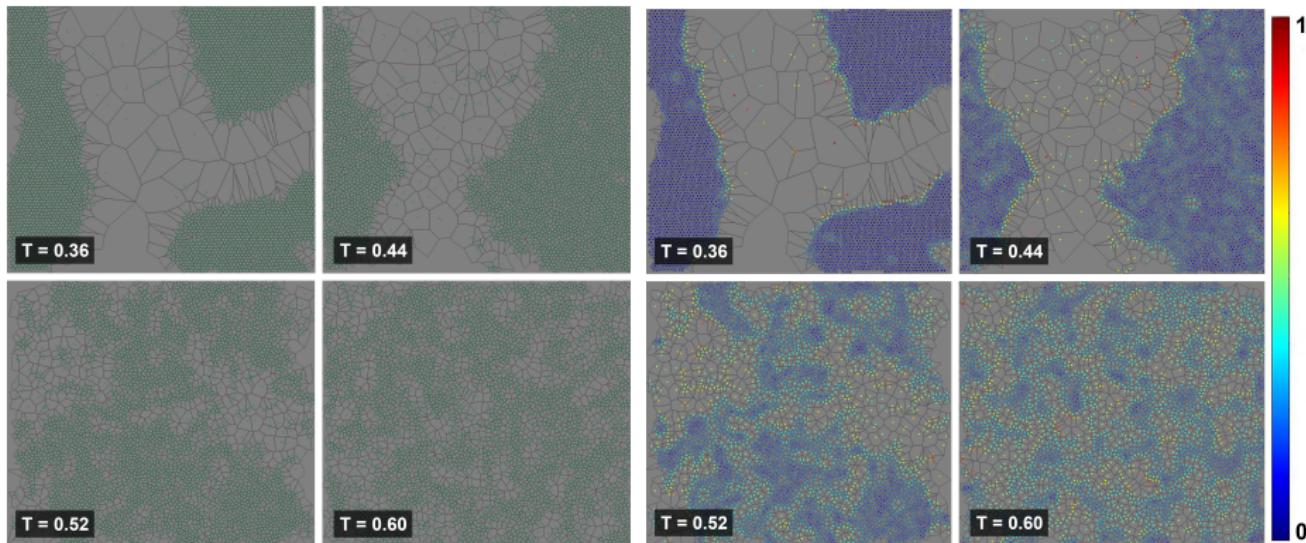


Рис. 10: Разбиение на ячейки Вороного различной температуре исследуемой в данной работе системы на примере потенциала Леннарда-Джонса.

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

Результаты Главы 3

oo
ooo

Итоги ВКР

o

Построение фазовых диаграмм для различных потенциалов взаимодействия

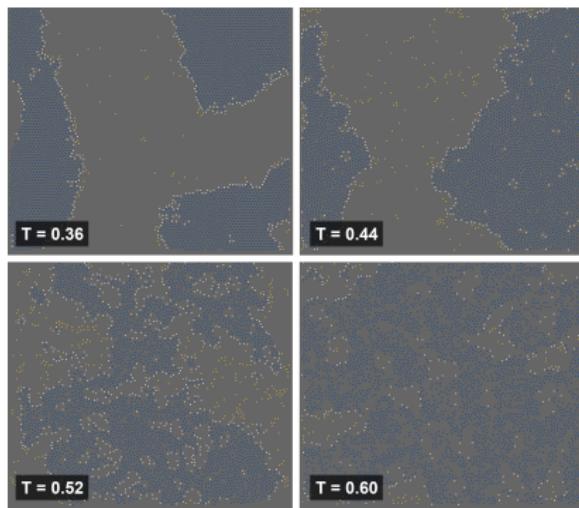


Рис. 12: Классификация частиц в исследуемой системе на примере системы с потенциалом взаимодействия Леннарда-Джонса при различной температуре.

Введение

ooo

Глава 2

 ○
 ○○
 ○○○○
 ○○

Результаты Главы 2

 ○○●○○
 ○○○○○

Глава 3

 ○
 ○○

Результаты Главы 3

 ○○
 ○○○

Итоги ВКР

○

Построение фазовых диаграмм для различных потенциалов взаимодействия

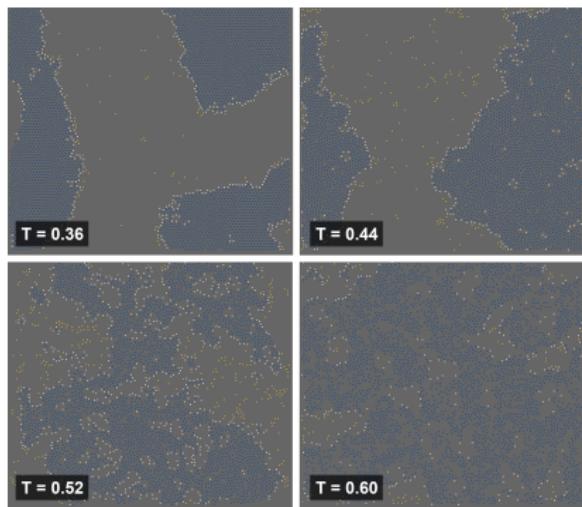


Рис. 12: Классификация частиц в исследуемой системе на примере системы с потенциалом взаимодействия Леннарда-Джонса при различной температуре.

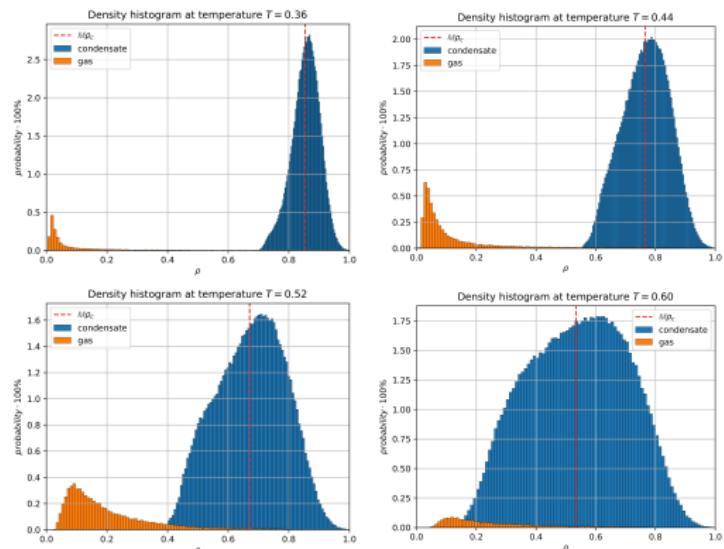


Рис. 13: Распределение плотностей частиц конденсата и газа при различных температурах. Синим цветом обозначен конденсат, оранжевым - газ.

Введение

ooo

Глава 2

-
-
-
-

Результаты Главы 2

- oooo●o
- oooooo

Глава 3

-
-

Результаты Главы 3

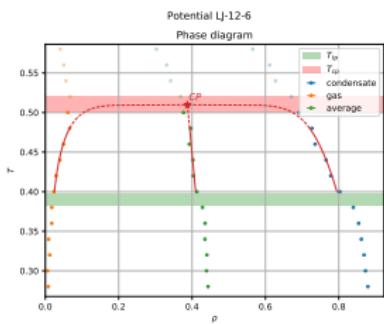
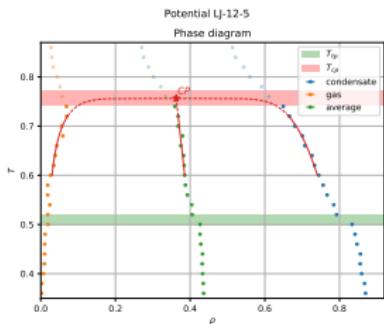
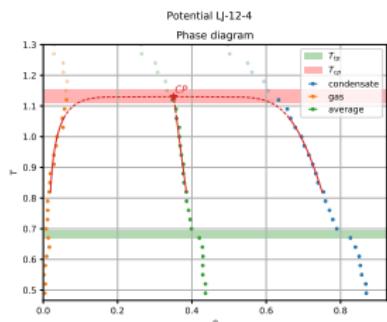
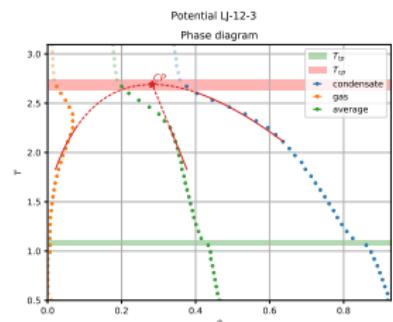
- oo
- ooo

Итоги ВКР

o

Построение фазовых диаграмм для различных потенциалов взаимодействия

Фазовые диаграммы при различном притяжении



Введение

ooo

Глава 2

 ○
 ○○
 ○○○○
 ○○

Результаты Главы 2

 ○○○●○
 ○○○○○

Глава 3

 ○
 ○○

Результаты Главы 3

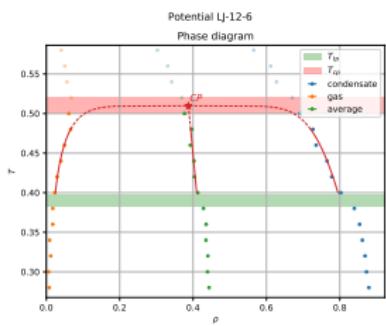
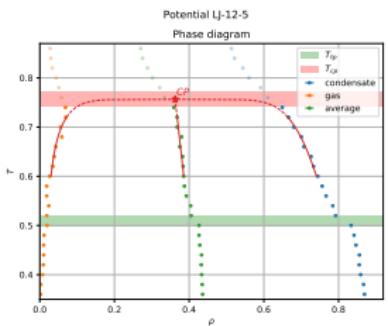
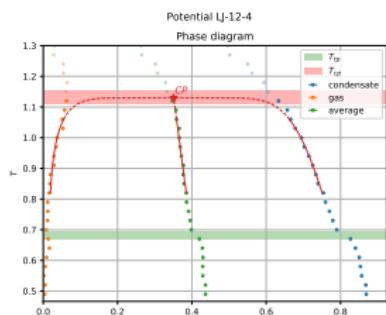
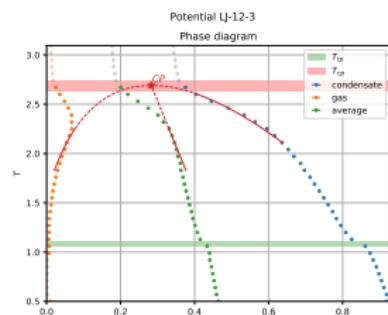
 ○○
 ○○○

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}, ρ_{CP} - эффективная температура и плотность критической точки, A, a - варьируемые параметры, ρ_l, ρ_g - плотность жидкости и газа соответственно, β_c - критический индекс системы.

Введение

ooo

Глава 2

 ○
 ○○
 ○○○○
 ○○

Результаты Главы 2

 ○○○●○
 ○○○○○

Глава 3

 ○
 ○○

Результаты Главы 3

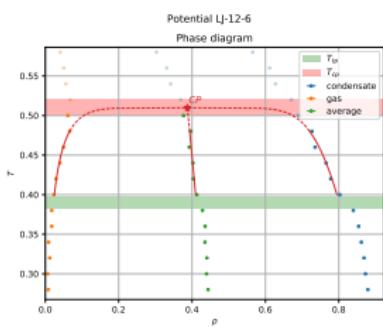
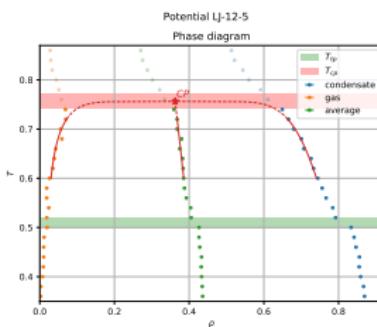
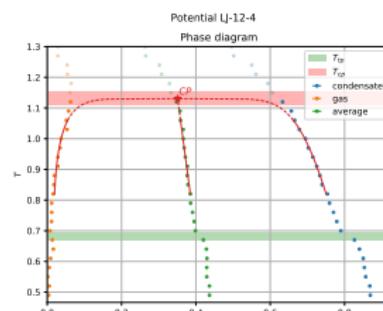
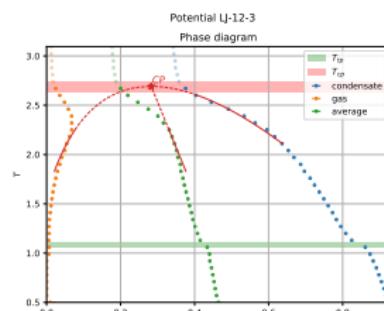
 ○○
 ○○○

Итоги ВКР

○

Построение фазовых диаграмм для различных потенциалов взаимодействия

Фазовые диаграммы при различном притяжении



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

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

где T_{CP} , ρ_{CP} - эффективная температура и плотность критической точки, A , a - варьируемые параметры, ρ_l , ρ_g - плотность жидкости и газа соответственно, β_c - критический индекс системы.

	T_{TP}	T_{CP}	ρ_{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, ρ_{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

Результаты Главы 3

oo
ooo

Итоги ВКР

o

Построение фазовых диаграмм для различных потенциалов взаимодействия

Влияние дальнодействия притяжения

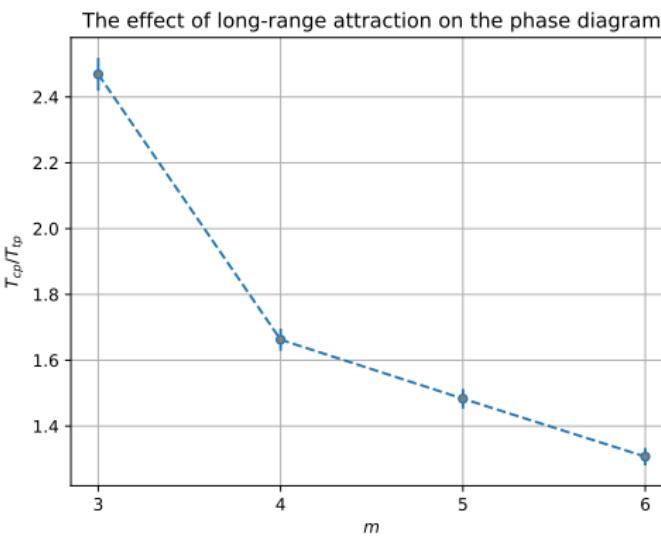


Рис. 14: Отношение температур критической к тройной в зависимости от степени m в уравнении 3 потенциала.

Введение

ooo

Глава 2

○
○○
○○○
○○

Результаты Главы 2

ooooo
●○○○○

Глава 3

○
○○

Результаты Главы 3

oo
ooo

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:

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

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

где ρ_{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 ρ_{max} - плотность максимума распределения.

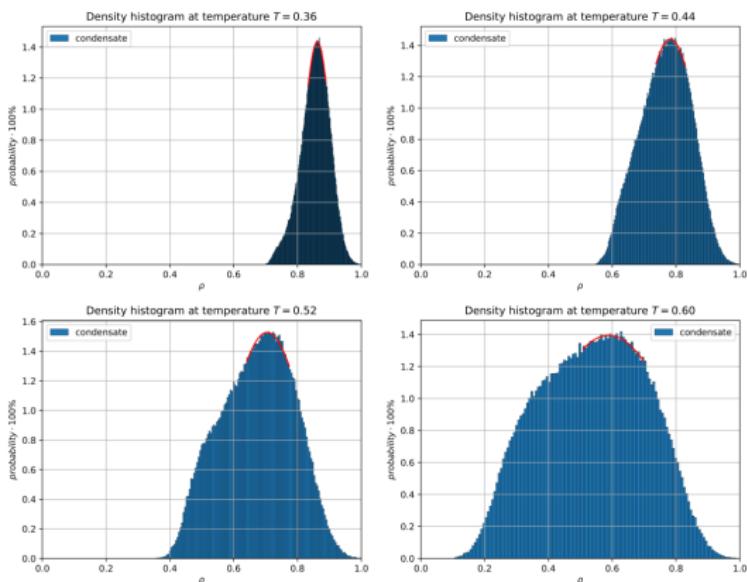


Рис. 15: Аппроксимация пика распределения плотности при различной температуре на примере потенциала LJ12-6.

Введение

ooo

Глава 2

-
-
-
-

Результаты Главы 2

-
-

Глава 3

-
-

Результаты Главы 3

-
-

Итоги ВКР

○

Анализ гистограмм распределения плотностей

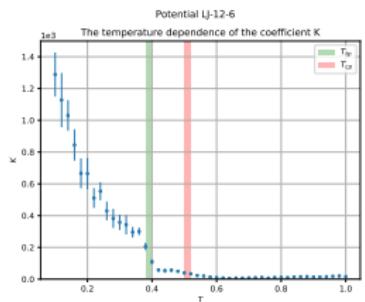
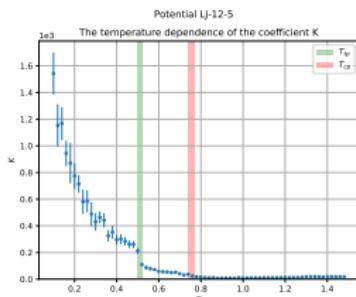
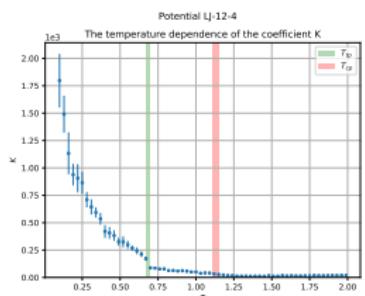
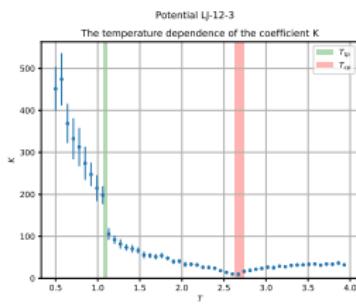


Рис. 16: Температурная зависимость коэффициента K .

Введение

ooo

Глава 2

-
-
-
-

Результаты Главы 2

- ooooo
-

Глава 3

-
-

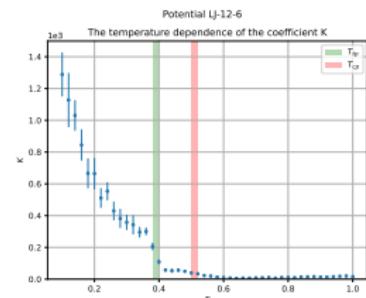
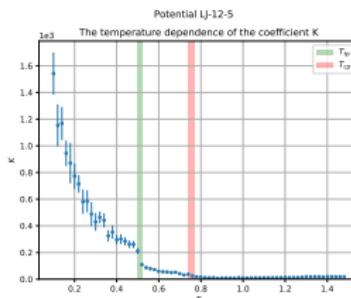
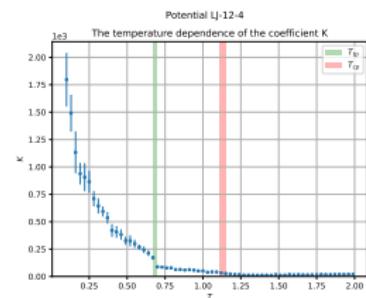
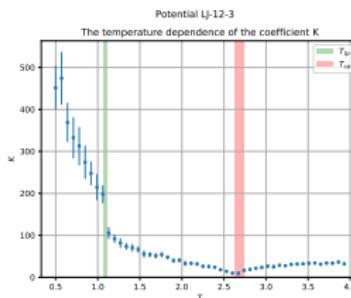
Результаты Главы 3

- oo
- ooo

Итоги ВКР

o

Анализ гистограмм распределения плотностей

Рис. 16: Температурная зависимость коэффициента K .

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 β - сжимаемости, C - скорость звука в веществе.

Выразив данные величины через коэффициент K , получим следующие формулы:

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

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

Введение

ooo

Глава 2

○
○○
○○○
○○

Результаты Главы 2

○○○○○
○○●○○

Глава 3

○
○○

Результаты Главы 3

○○
○○○

Итоги ВКР

○

Анализ гистограмм распределения плотностей

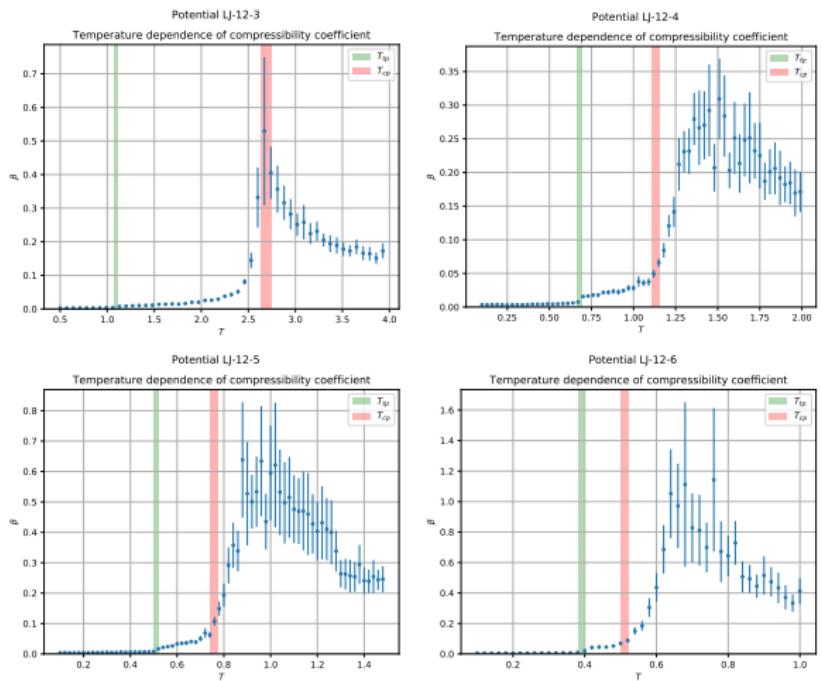


Рис. 17: Температурная зависимость β при различных потенциалах.

Введение

ooo

Глава 2

○
○○
○○○○
○○

Результаты Главы 2

○○○○○
○○○●○

Глава 3

○
○○

Результаты Главы 3

○○
○○○

Итоги ВКР

○

Анализ гистограмм распределения плотностей

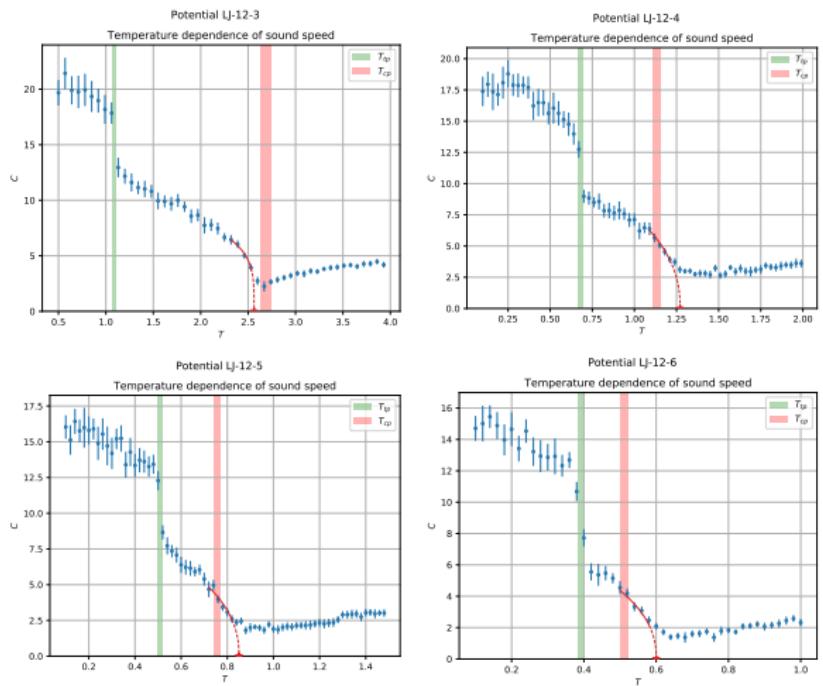


Рис. 18: Температурная зависимость скорости звука при различных потенциалах.

Введение

ooo

Глава 2

-
-
-
-

Результаты Главы 2

- ooooo
- oooo●

Глава 3

-
-

Результаты Главы 3

- oo
- ooo

Итоги ВКР

o

Анализ гистограмм распределения плотностей

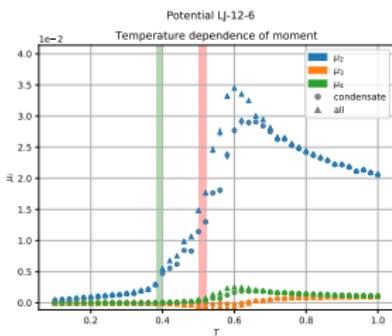
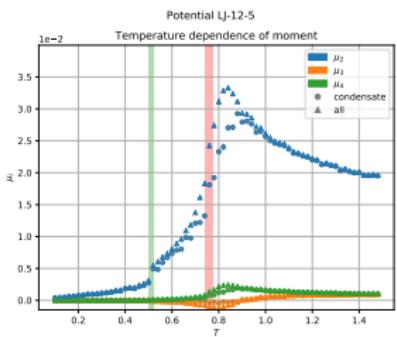
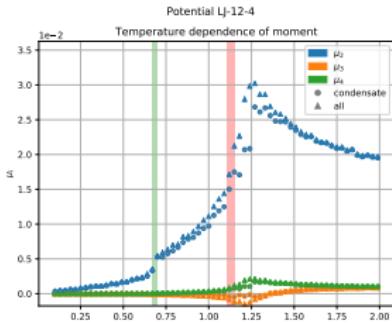
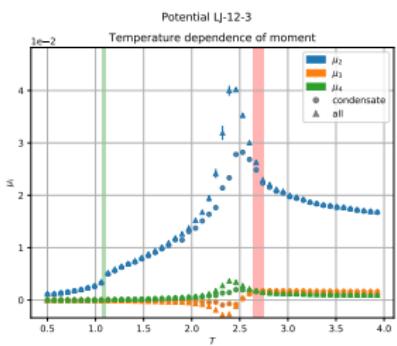


Рис. 19: Температурная зависимость моментов величины $\mu_i = M \left[|\rho - M\rho|^i \right]$.

Введение

ooo

Глава 2

о
оо
оооо
оо

Результаты Главы 2

ooooo
oooo

Глава 3

●
oo

Результаты Главы 3

oo
ooo

Итоги ВКР

о

ГЛАВА 3

«ДИФФУЗИЯ ОТ ТРОЙНОЙ ДО
КРИТИЧЕСКОЙ ТОЧКИ»

Введение
ooo

Глава 2
o
oo
oooo
oo

Результаты Главы 2
ooooo
ooooo

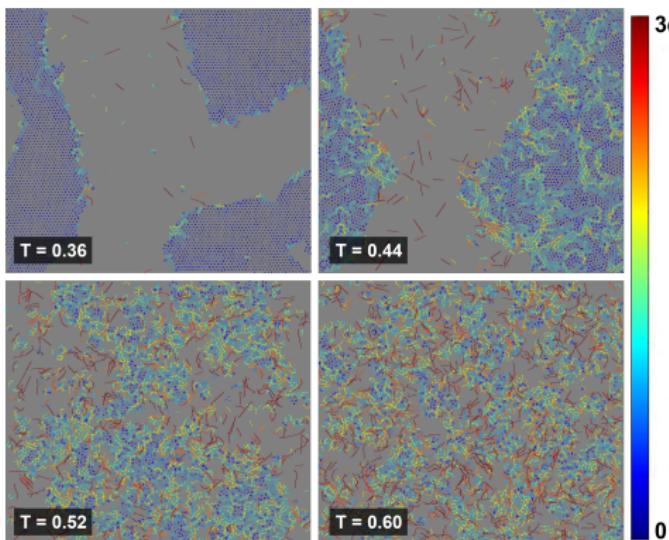
Глава 3
o
●o

Результаты Главы 3
oo
ooo

Итоги ВКР
o

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 σ (единица измерения длины).

Вычисление параметров переноса

Вычисление коэффициента диффузии методами МД

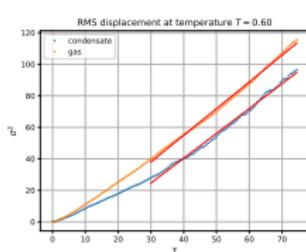
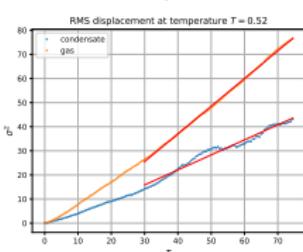
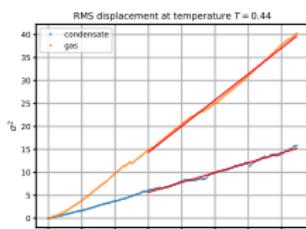
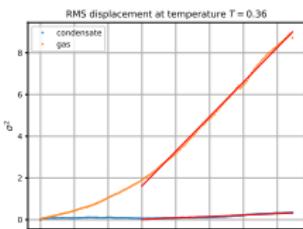


Рис. 21: Временная зависимость среднеквадратичного смещения частиц для различных температур на примере потенциала Леннарда-Джонса.

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 μ - мобильность частиц.

Введение

ooo

Глава 2

-
-
-
-

Результаты Главы 2

- ooooo
- ooooo

Глава 3

-
-

Результаты Главы 3

-
- ooo

Итоги ВКР

○

Температурная зависимость диффузии и мобильности

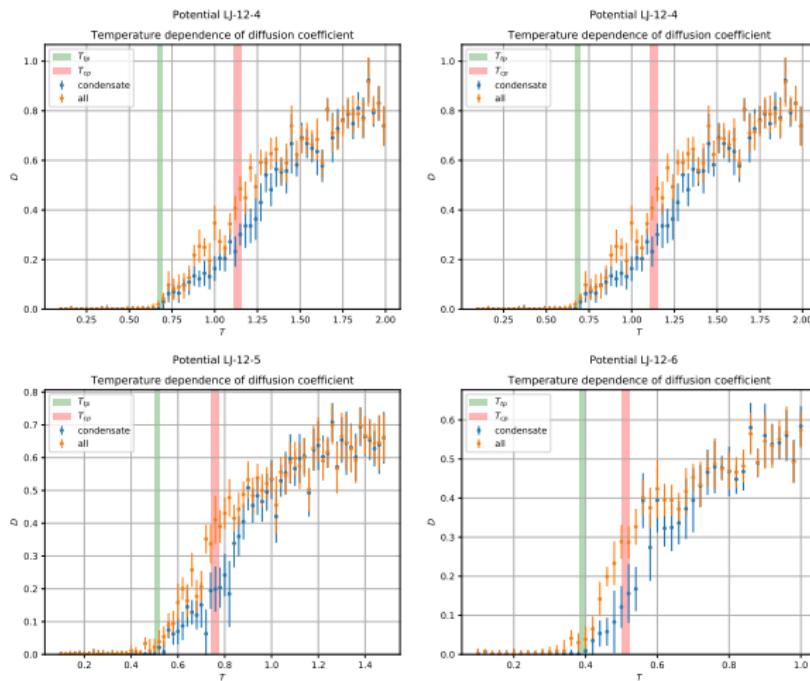


Рис. 22: Температурная зависимость коэффициента диффузии для различных потенциалов взаимодействия. Не доделана!

Введение

ooo

Глава 2

o
oo
oooo
oo

Результаты Главы 2

ooooo
oooo

Глава 3

o
oo
ooo

Результаты Главы 3

o●
ooo

Итоги ВКР

o

Температурная зависимость диффузии и мобильности

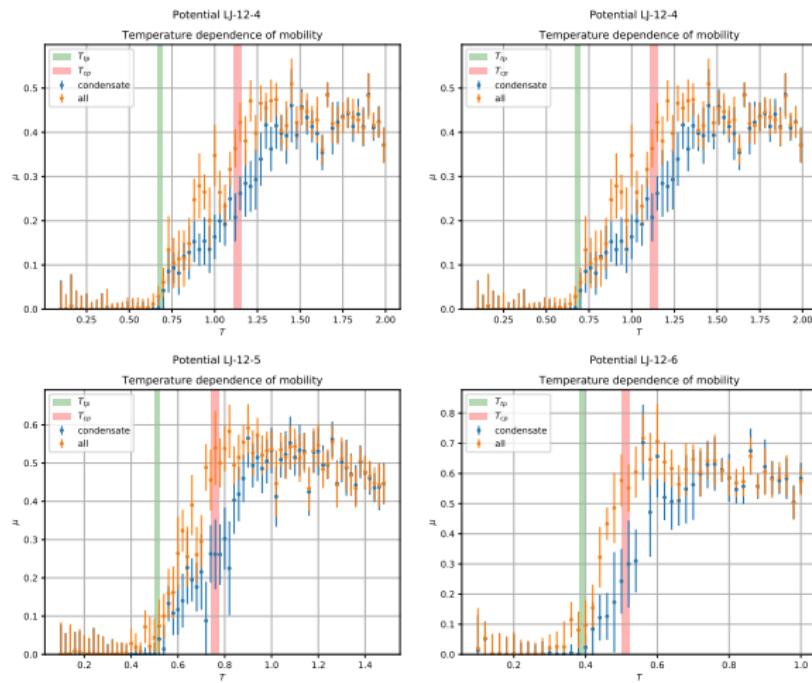


Рис. 23: Температурная зависимость мобильности для различных потенциалов взаимодействия. Не доделана!

Введение

ooo

Глава 2

-
-
-
-

Результаты Главы 2

- ooooo
- ooooo

Глава 3

-
-

Результаты Главы 3

-
-

Итоги ВКР

○

Взаимосвязь термодинамических параметров, и параметров переноса

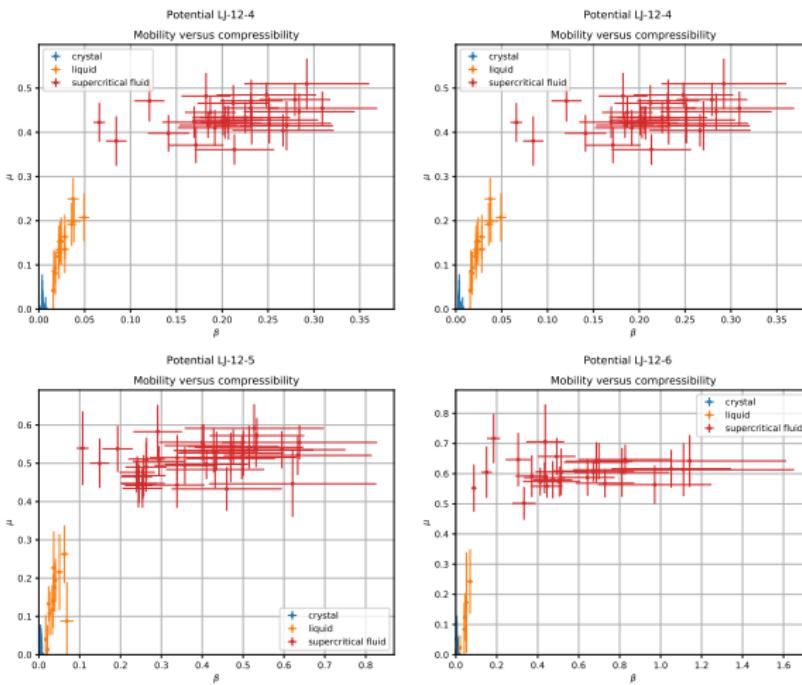


Рис. 24: Зависимость мобильности от сжимаемости для различных потенциалов. Не доделана!

Введение

ooo

Глава 2

 ○
 ○○
 ○○○
 ○○

Результаты Главы 2

 ○○○○○
 ○○○○

Глава 3

 ○
 ○○

Результаты Главы 3

 ○
 ○●○

Итоги ВКР

○

Взаимосвязь термодинамических параметров, и параметров переноса

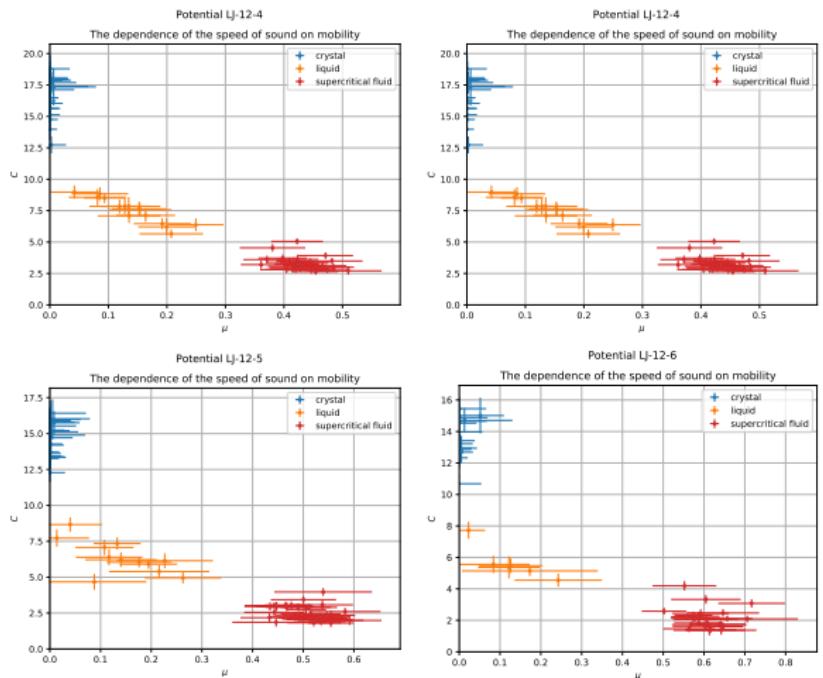


Рис. 25: Зависимость скорости звука от мобильности для различных потенциалов. Не доделана!

Введение

ooo

Глава 2

о
оо
оооо
оо

Результаты Главы 2

ooooo
ooooo

Глава 3

о
оо

Результаты Главы 3

оо●

Итоги ВКР

о

Взаимосвязь термодинамических параметров, и параметров переноса

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

о
оо
оооо
оо

Результаты Главы 2

ooooo
oooo

Глава 3

о
оо

Результаты Главы 3

оо
ooo

Итоги ВКР

●

Спасибо за внимание!