

Sprawozdanie

Ćwiczenie komputerowe z dynamiki molekularnej

Jakub Sobolewski
274437

6 listopada 2018

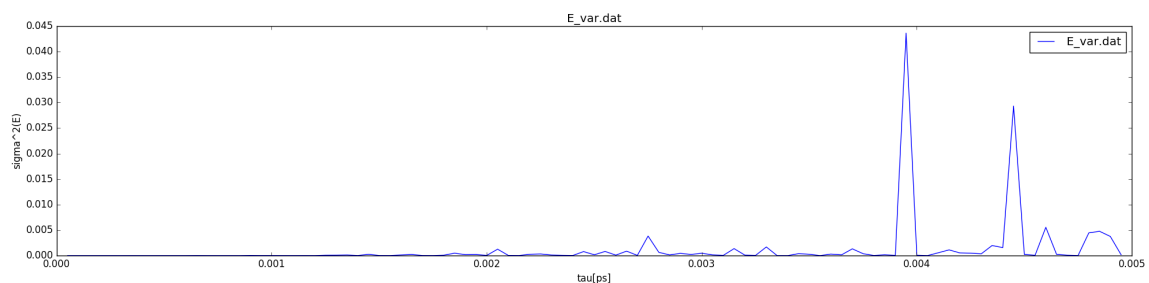
1 Opis oprogramowania

- Do wykonania symulacji wykorzystano język C++11
- Wizualizacja została wykonana w OpenGL
- Wykresy zostały stworzone z pomocą języka Python i biblioteki Matplotlib

1.1 Struktura programu

- *main.cpp* - główna funkcja programu
- *GasSimulation.h* - biblioteka implementująca wszystkie wymagane symulacje
- *Utils.h* - biblioteka implementująca trójwymiarowy wektor, wektor bazowy, oraz szybszą funkcję do obliczania potęgi z wykładnikiem naturalnym dodatnim od funkcji z biblioteki standardowej *std::pow()*
- *plot.py* - skrypt rysujący wykresy

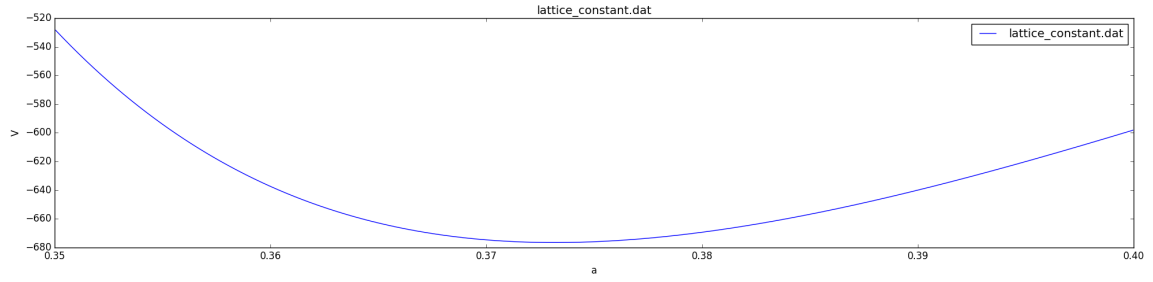
1.2 Stabilność rozwiązania



Rys. 1 Wariancja energii w funkcji kroku czasowego τ .

Widać że dla kroku mniejszego niż 0.001ps symulacja jest stabilna.

1.3 Minimum energii kryształu

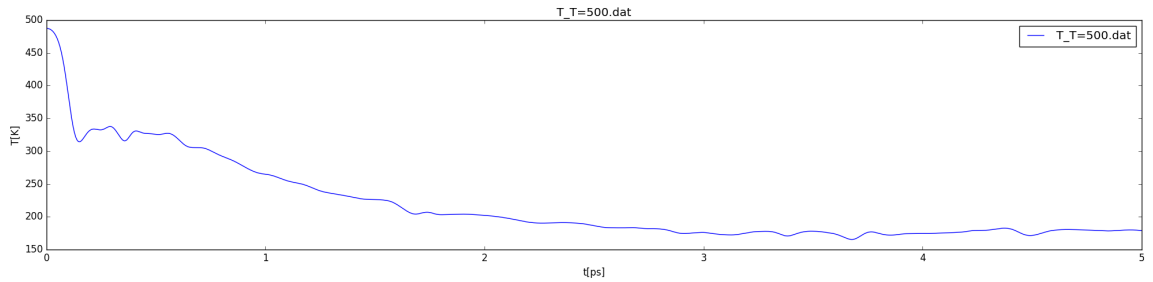


Rys. 2 Wykres energii potencjalnej kryształu w funkcji stałej kryształu.

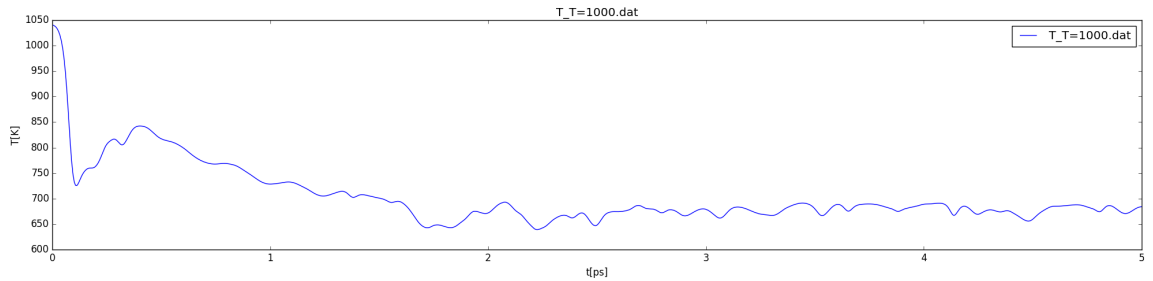
Dla stałej siatki równej $a = 0.372 \text{ nm}$ kryształ znajduje się w minimum energii w temperaturze 0K.

Temperatura układu w trakcie trwania symulacji wzrasta, jest to spowodowane działaniem niezrównoważonych sił na atomy co przyczynia się do ich ruchu.

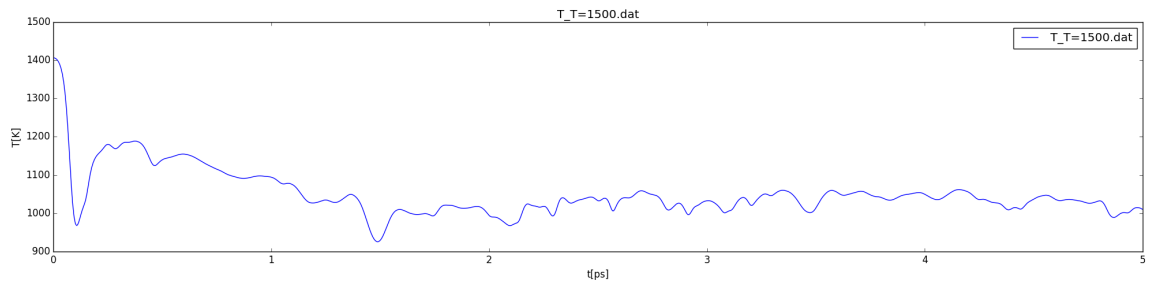
1.4 Zachowanie temperatury i ciśnienia gazu



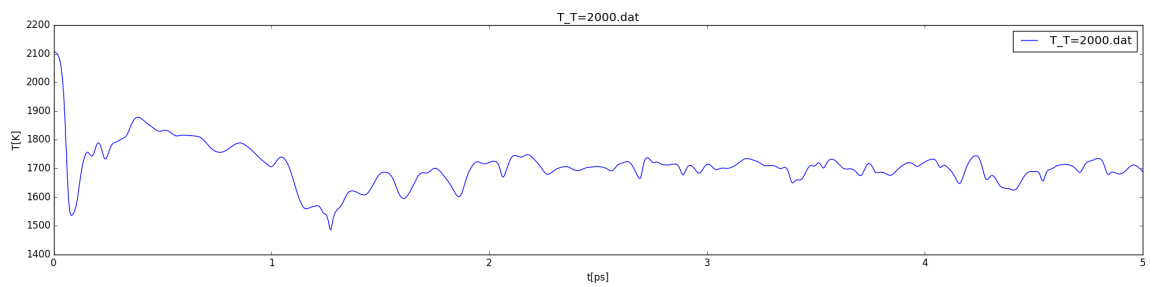
Rys. 3 Wykres funkcji temperatury od czasu, $T_0 = 500K$.



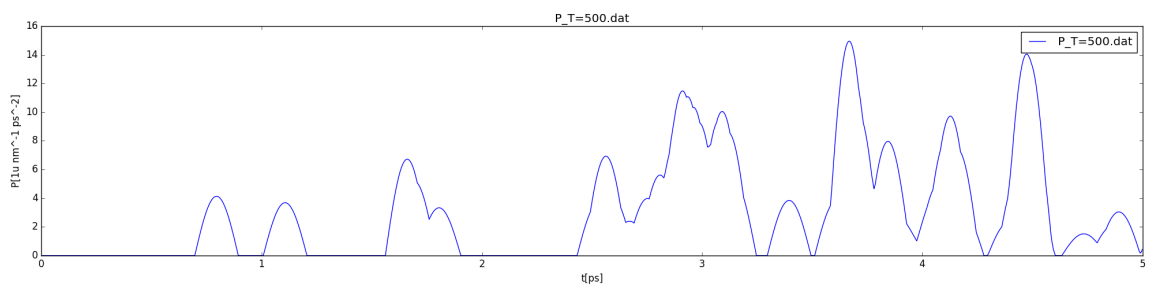
Rys. 4 Wykres funkcji temperatury od czasu, $T_0 = 1000K$.



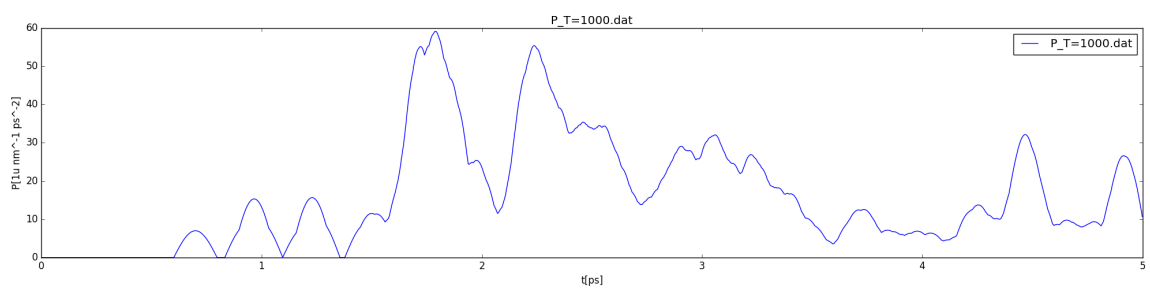
Rys. 5 Wykres funkcji temperatury od czasu, $T_0 = 1500K$.



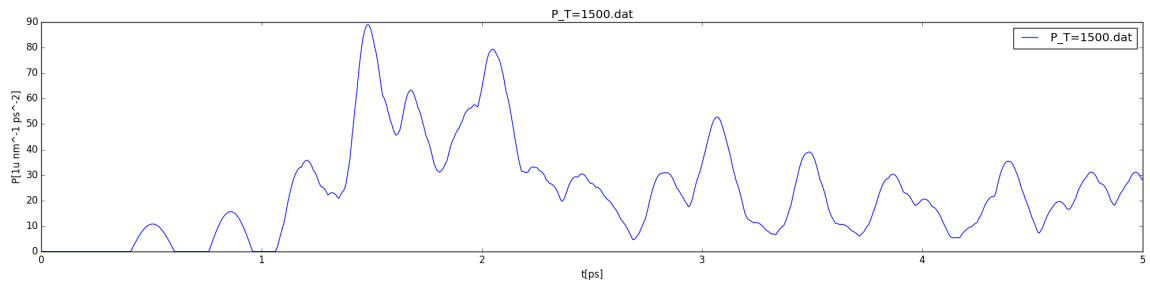
Rys. 6 Wykres funkcji temperatury od czasu, $T_0 = 2000K$.



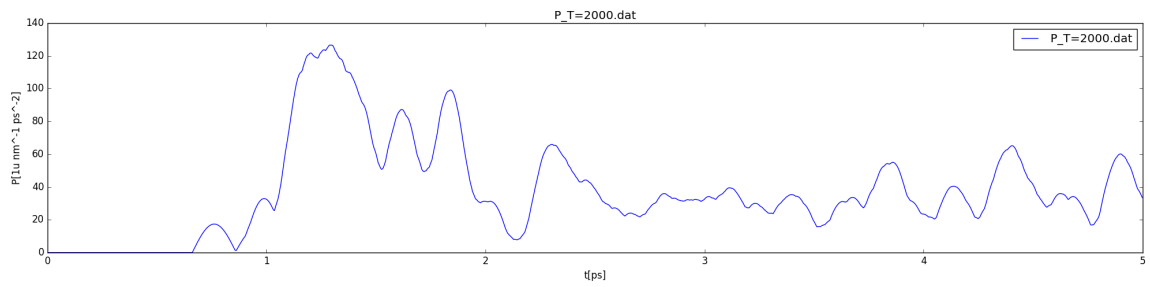
Rys. 7 Wykres funkcji ciśnienia od czasu, $T_0 = 500K$.



Rys. 8 Wykres funkcji ciśnienia od czasu, $T_0 = 1000K$.



Rys. 9 Wykres funkcji ciśnienia od czasu, $T_0 = 1500K$.



Rys. 10 Wykres funkcji ciśnienia od czasu, $T_0 = 2000K$.