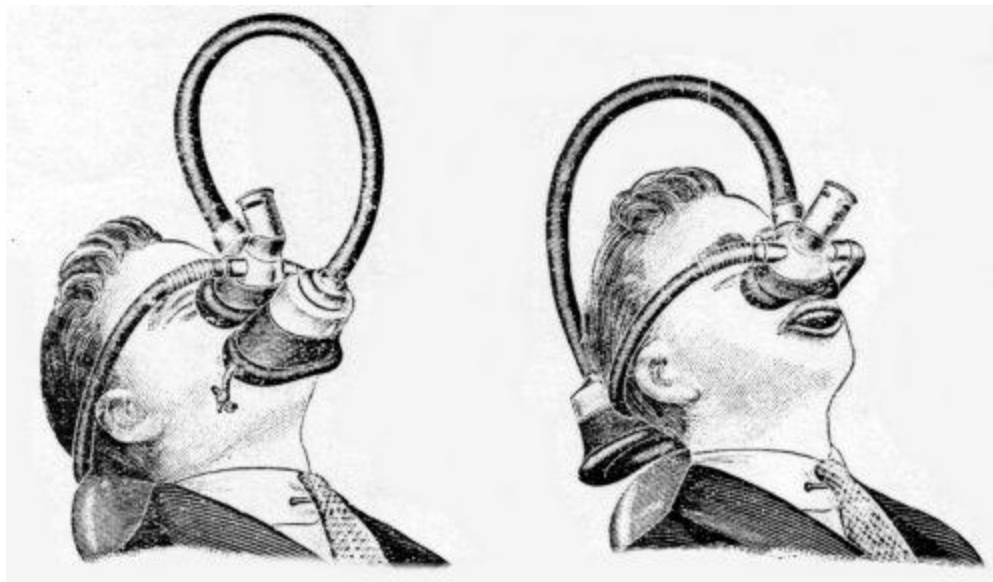


Symulacje komputerowe w fizyce



ĆWICZENIA IV - WIĘCEJ GAZU

Zadania

- **zbadaj diagram fazowy p - 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 [0.5]
- wykorzystaj termostat izokinetyczny do kontroli temperatury (implementacja Browna & Clarka)
- **dochodzenie do równowagi:** narysuj $E(t)$, oszacuj czas dochodzenia do równowagi i **sprawdź rozkład prędkości** w fazie płynnej po dojściu do równowagi (maxwellowski?) [0.5]
- **oblicz $g(r)$** zarówno w fazie stałej jak i płynnej i porównaj obie funkcje [0.2]

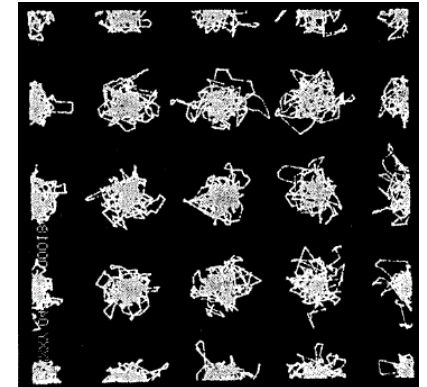
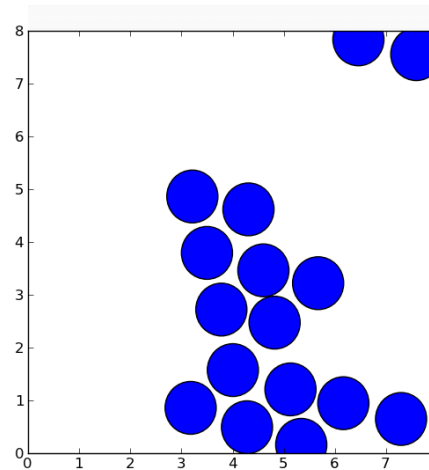
Fazy



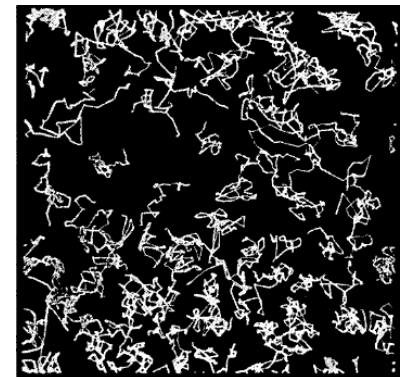
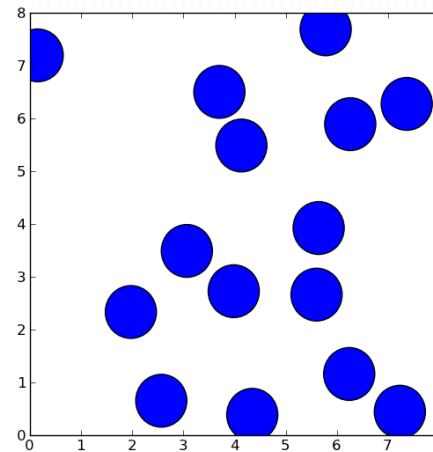
Jak odróżnić płyn od ciała stałego?

- wpatrując się...

ciało
stałe:



płyn:



świat rzeczywisty

nasz kod

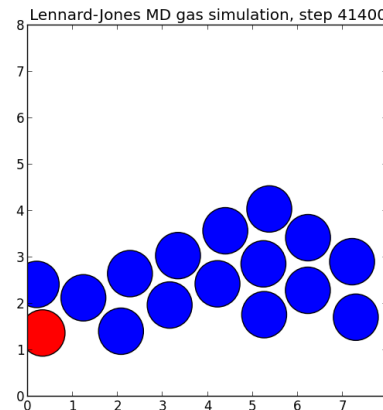
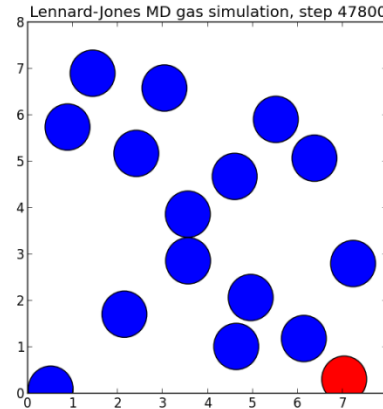
Alder &
Wainwright 1959

Jak odróżnić płyn od ciała stałego?

- obliczając stałą dyfuzji -
średnie przesunięcie
kwadratowe w funkcji czasu

płyn - duże

ciało stałe –
(prawie) zero

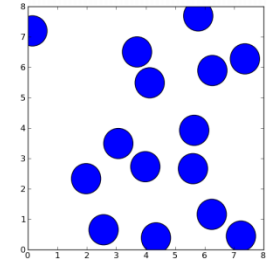
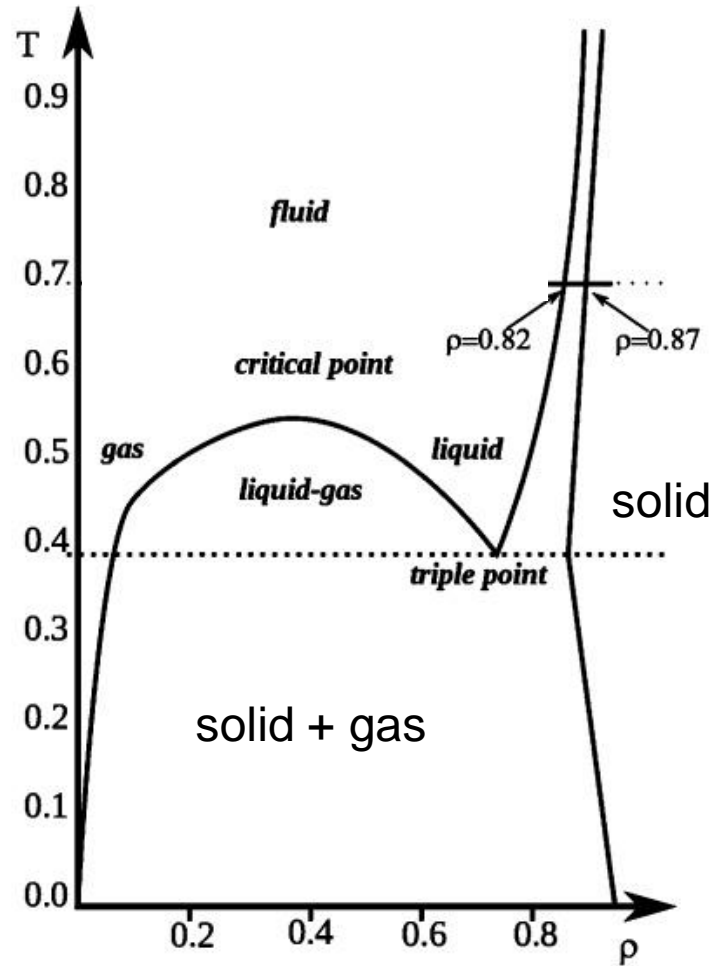


● - śledzona cząstka

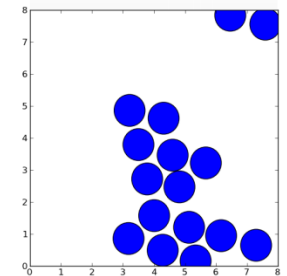
Diagram fazowy dwuwymiarowego układu LJ

T – mierzone w ϵ/k

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



$\rho = 0.25, T = 0.7$



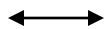
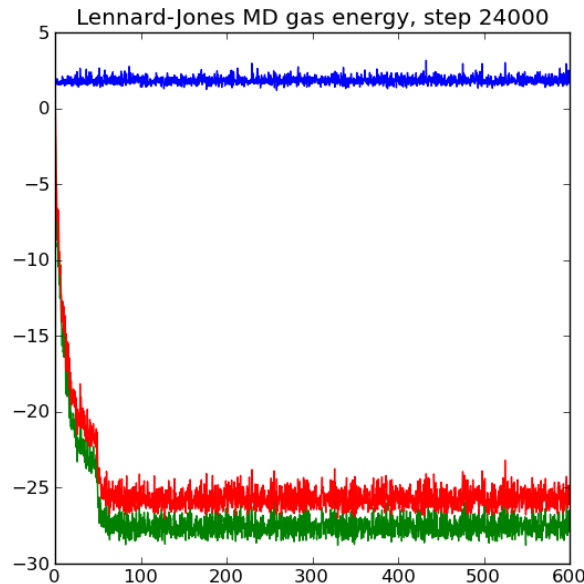
$\rho = 0.25, T = 0.1$

zbadajcie kilka punktów!

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

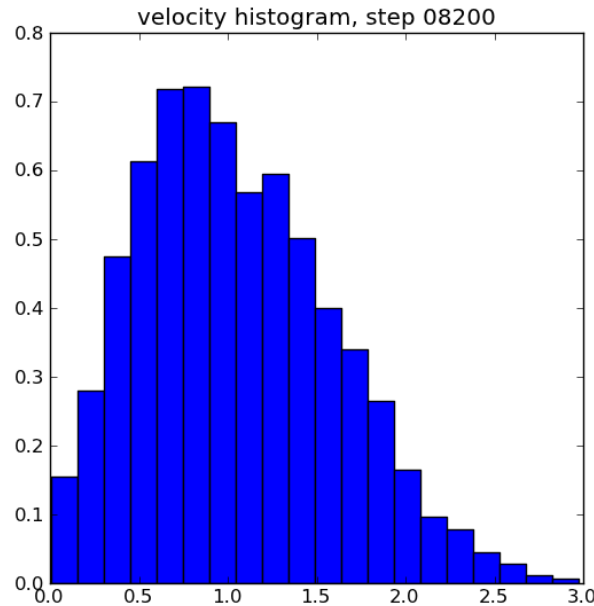
Dochodzenie do równowagi

- narysuj energię w funkcji czasu (kinetyczną, potencjalną, całkowitą) i oszacuj czas dochodzenia do równowagi



czas dochodzenia do
równowagi

Rozkład prędkości



- zacznij zbierać dane po osiągnięciu stanu równowagi
- do uzyskania gładkiego histogramu średnij po wielu krokach czasowych
- do narysowania histogramu użyj: **plt.hist(velocities, bins=20, normed=True)**
- porównaj z dwuwymiarowym rozkładem Maxwella $P(v) = \frac{mv}{kT} e^{-mv^2/2kT}$

sprawdź czy maksimum jest w dobrym miejscu

Radialna funkcja rozkładu

```
delg=0.1 # grubość warstwy
bins=arange(0,boxsize/2.0,delg) # zliczamy tylko do boxsize/2
histp,bin_edges=histogram(radials,bins=bins,normed=True)
# robimy znormalizowany histogram odległości międzycząstkowych
histn=[0]*len(histp) # pusta lista
for i in range(0,len(histp)):
    fg=pi*(((i+1)**2-i**2)*delg**2)*particleNumber/(boxsize**2)
    histn[i]=histp[i]/(fg)
```

skalujemy przez liczbę
cząstek gazu doskonałego
w tej warstwie

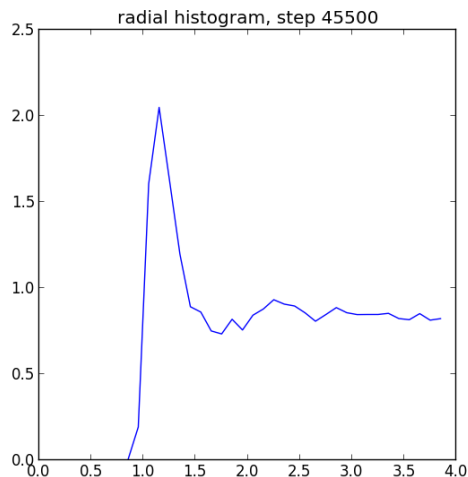
pole między
powłoką i a i+1

gęstość

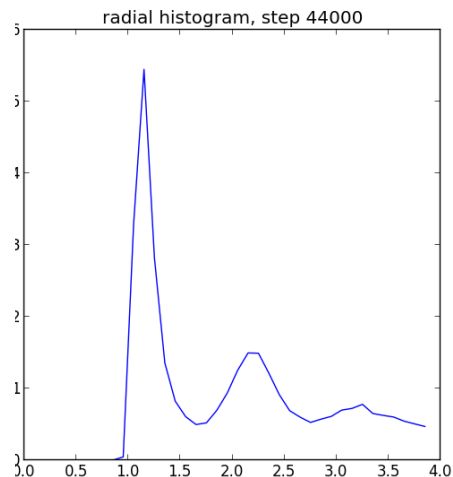
```
plt.plot(.5*(bin_edges[1:]+bin_edges[:-1]), histn) # rysujemy histogram

plt.savefig('radial.png')
```

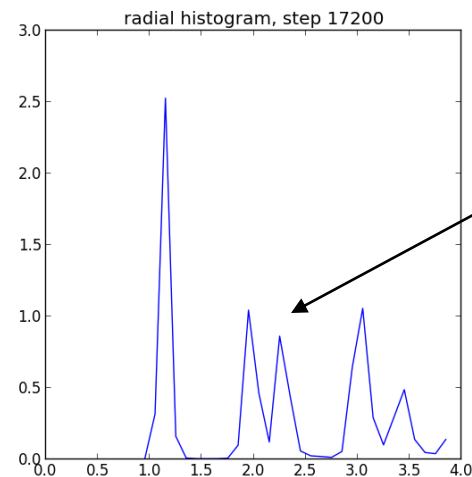
Radialna funkcja rozkładu - przykłady



gaz



ciecz



ciało s.

struktura
periodyczna
(heksagonalna)

tu znika

