

ВТОРОЕ ЗАДАНИЕ

Автор: Маллаев Руслан

От: 11 апреля 2022 г.

Содержание

1	RDF	1
2	Автокоррелятор	1
3	Расчет диффузии	2
4	Из первого задания	3
5	Зависимость от термостата	3
6	Проверка экспериментальной зависимости	4
7	Исправления	4

1 RDF

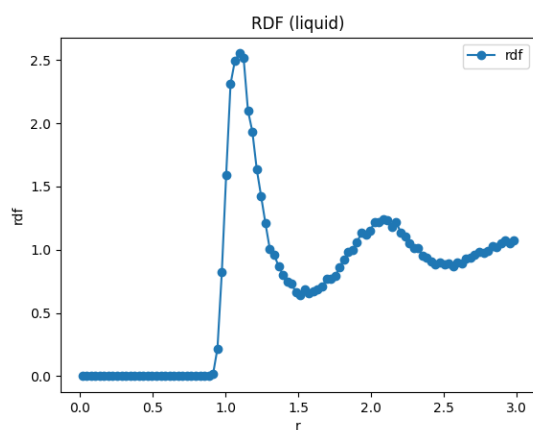


Рис. 1: RDF жидкости при $\rho = 0.8$ и $T = 1$

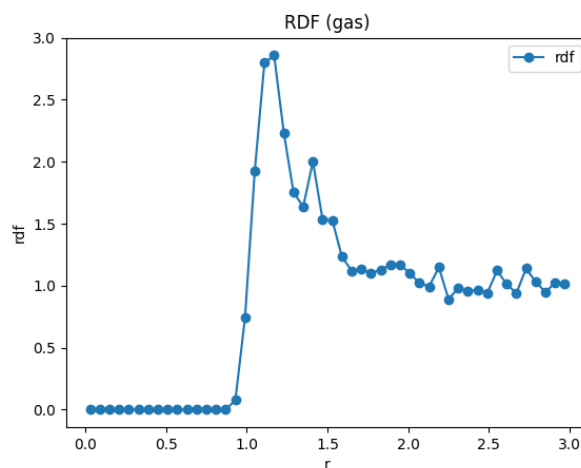


Рис. 2: RDF газа при $\rho = 0.05$ и $T = 1$

Пики у нас получились у жидкости на 3,4 Å, у газа на 3.8 Å. У Yarnell на 3.76 Å. Расхождение может быть обусловлено разными плотностями (сам он вроде не указал при каких).

2 Автокоррелятор

Считаем $N = 4000$ $dt = 0.01$ число шагов $ns = 20000$ $T = 1.0$ $\rho = 0.8$ (0.05 для газа)

Ну тут у нас в разреженном газе он не залезает в отрицательные значения, что ожидаемо. Для жидкости он очень резко падает, но последующие неровности скорее объясняются недостатком усреднения

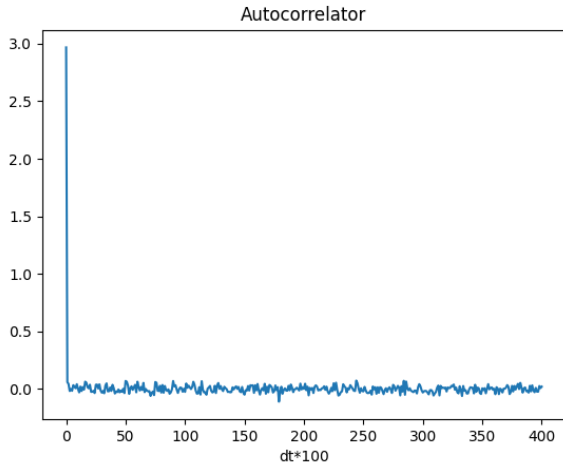


Рис. 3: Автокоррелятор жидкости при $\rho = 0.8$ и $T = 1.0$

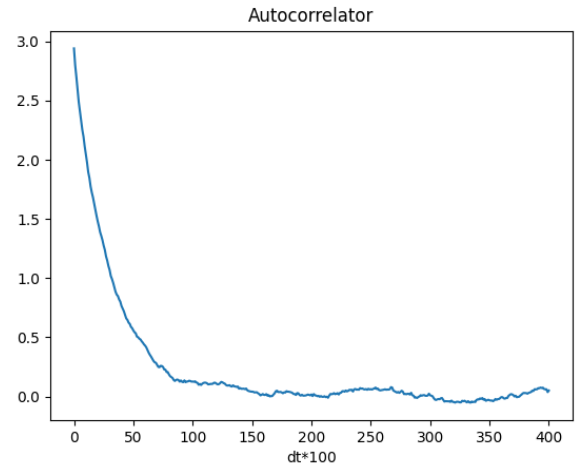


Рис. 4: Автокоррелятор газа при $\rho = 0.005$ и $T = 1$

3 Расчет диффузии СКС

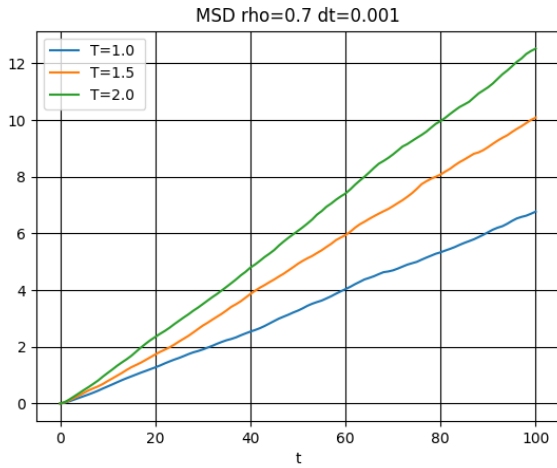


Рис. 5: СКС при $\rho = 0.7$

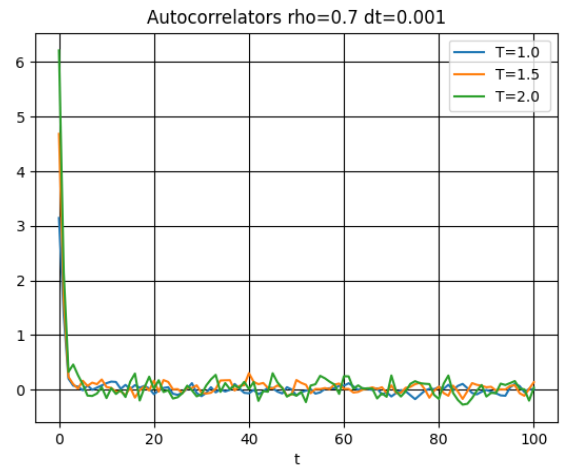


Рис. 6: Автокоррелятор при $\rho = 0.7$

reference Rowley

- $\rho = 0.7$ $T = 1.0$ $D = 0.105$
- $\rho = 0.7$ $T = 1.5$ $D = 0.156$
- $\rho = 0.7$ $T = 2.1$ $D = 0.217$

На первом графике значения диффузии посчитаны по наклону, на втором представлены автокорреляторы. Как видим полученные значения по первому графику сходятся с погрешностью $\pm 10\%$. Теперь проинтегрируем их чтобы получить значения методом Эйнштейна-Смолуховского. Считал в LAMMPS, $dt = 0.001$ $N_{timesteps} = 50000$ усреднял по 1000 фреймам.

Мои значения

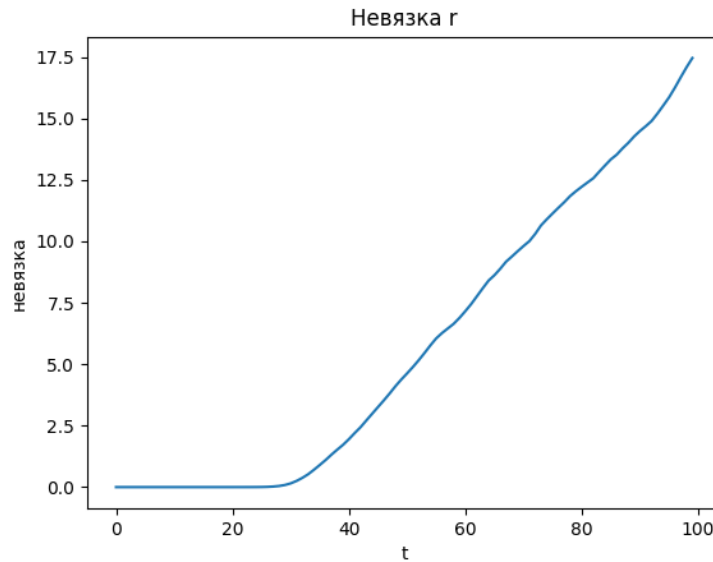
- $\rho = 0.7$ $T = 1.0$ $D_E = 0.113$, $D_G = 0.121$
- $\rho = 0.7$ $T = 1.5$ $D_E = 0.164$, $D_G = 0.171$

- $\rho = 0.7$ $T = 2.1$ $D_E = 0.213$, $D_G = 0.218$

Ну тут тоже попали в значения с максимальной погрешностью 7%, так что все +- норм

4 Из первого задания

Посчитаем диффузию по невязкам из первого задания. У одной модели было $dt = 0.002$ у другой $dt = 0.01$, диввузию считаем как $D = \frac{1}{12}\alpha$, где α наклон графика



По графику D получилось равно 0.209, А по методу Эйнштейна-Смолуховского - 0.216 Как видим данные неплохо согласуются

5 Зависимость от термостата

Построим СКС для разных τ и поймем что происходит что-то случайное, при некотором оптимальном значении выдает стабильное и близкое к правде значение. При маленьких τ средняя ниже, потом завышается и снова уходит вниз

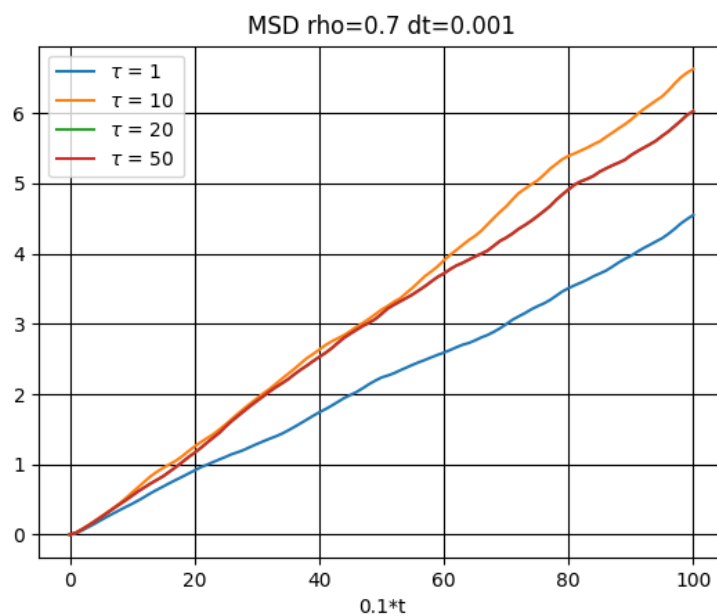


Рис. 7: СКС при $dt = 0.001$

Полученные коэффициенты диффузии:

τ	D
1	0.076
10	0.110
20	0.113
50	0.100

6 Проверка экспериментальной зависимости

На этот раз проводилась симуляция Lammmps с $dt = 0.005$

- при $T = 1.0$ и $\rho = 0.7$ $P = 0.645$ $D = 0.105$
- при $T = 1.0$ и $\rho = 0.5$ $P = 0.131$ $D = 0.216$
- при $T = 0.9$ и $\rho = 0.8$ $P = 1.188$ $D = 0.063$
- при $T = 0.7$ и $\rho = 1.0$ $P = 2.457$ $D = 0.233$
- при $T = 0.5$ и $\rho = 2.0$ $P = 556.3$ $D = - - -$
- при $T = 0.5$ и $\rho = 0.7$ $P = -0.530$ $D = 0.027$
- при $T = 0.3$ и $\rho = 1.5$ $P = 92.68$ $D = 2.38e - 5$

Нужно проверить уравнение

$$\text{Log}_{10}D = 0.05 + 0.07P - \frac{1.04 + 0.1P}{T} \quad (1)$$

$$-1.06 = -1.09$$

$$-0.95 = -0.99$$

$$-1.15 = -1.21$$

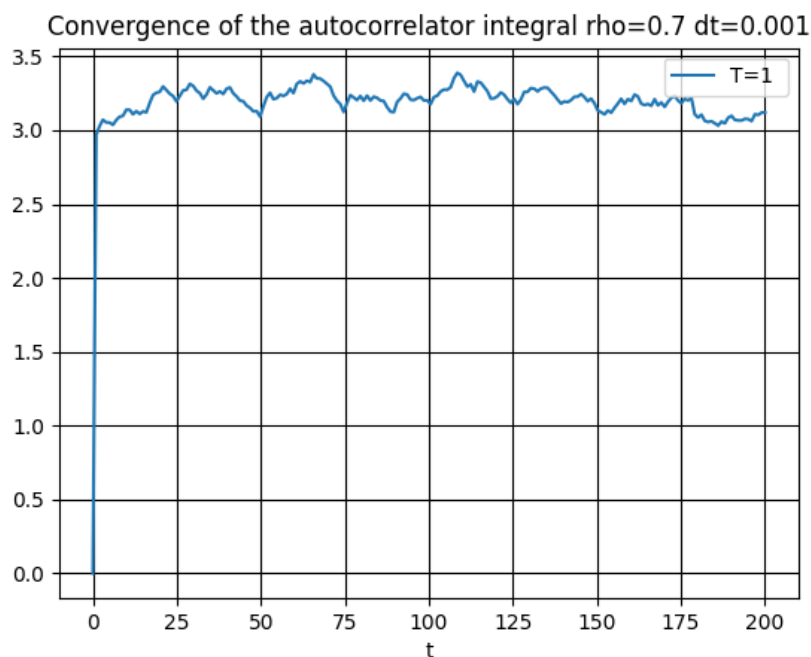
$$-1.63 = -1.61$$

...

Получается, оно сошлось.

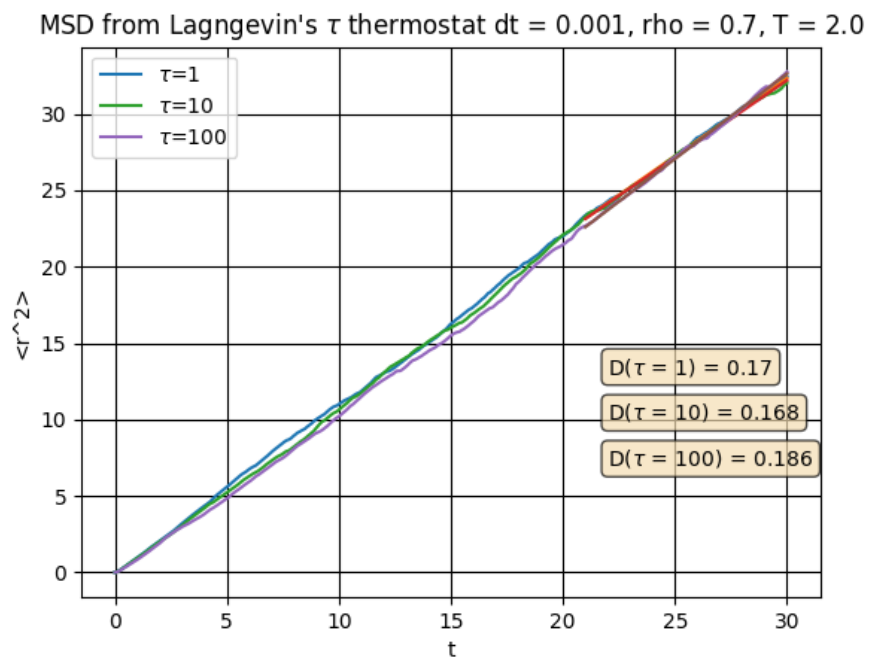
7 Исправления

Пороверил сходимость иинтеграла автокореллятора:



Как видно, интеграл сходится.

Также построим зависимость СКС от параметра τ термостата Ланжевена:



Значения примерно одинаковые и наблюдается что то похожее с ранее сделанным.