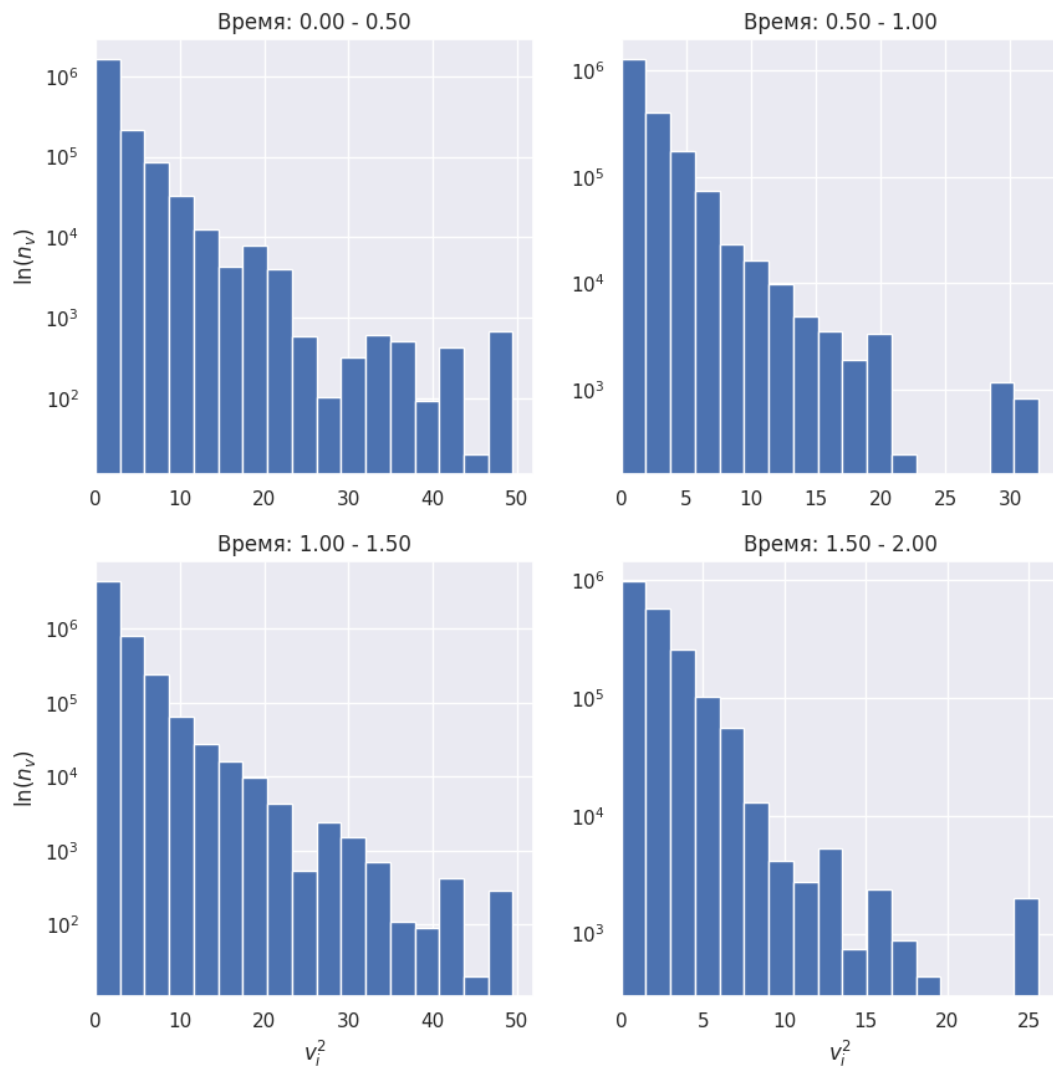


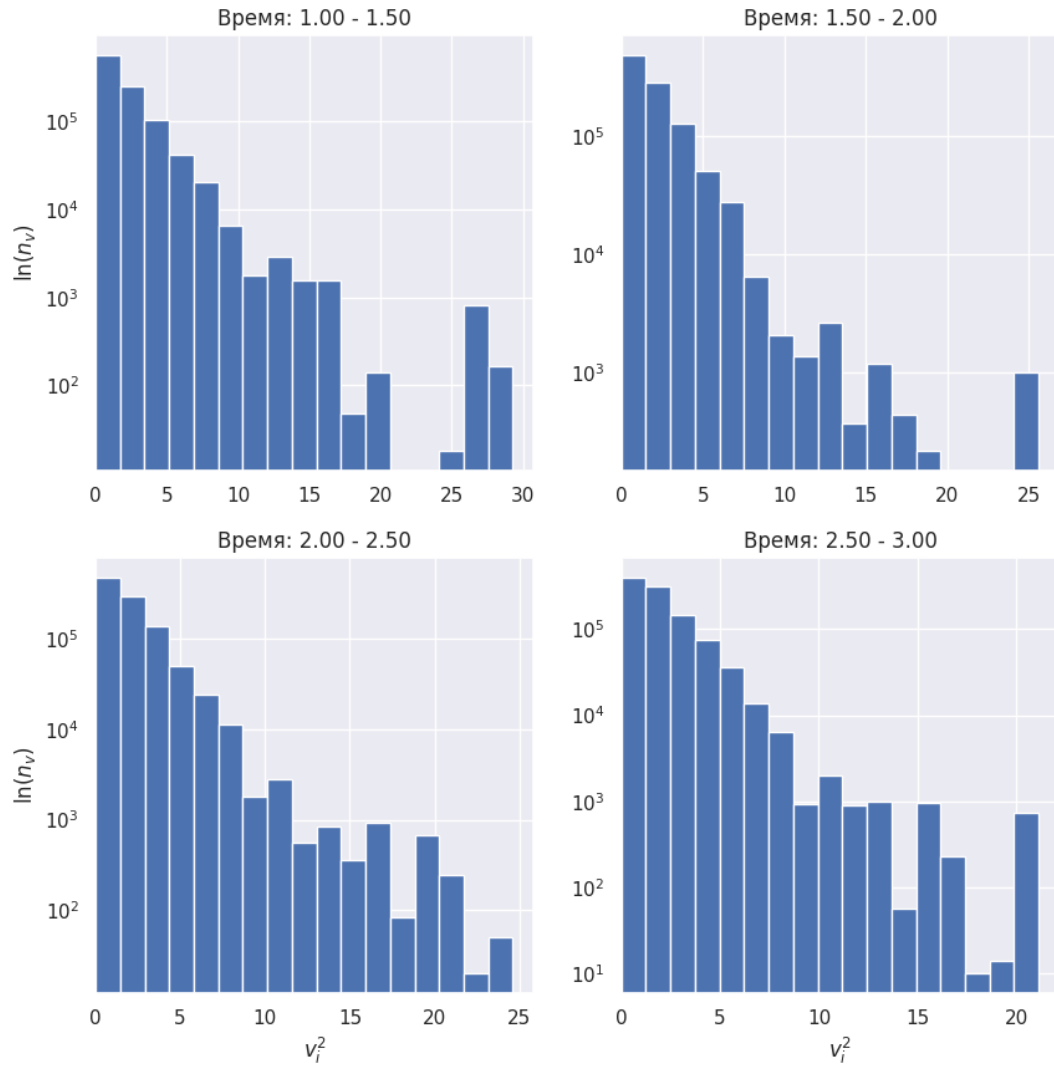
Задание 1

Молекулярная динамика

София Белен Лопес Висенс
Группа Б02-903
Московский физико-технический институт

0.1 Время установления распределения Максвелла





0.2 Время динамической памяти $t_m \approx 3$

$$\langle \Delta r^2(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}'_i(t))^2 \quad (1)$$

$$\langle \Delta v^2(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{v}'_i(t))^2 \quad (2)$$

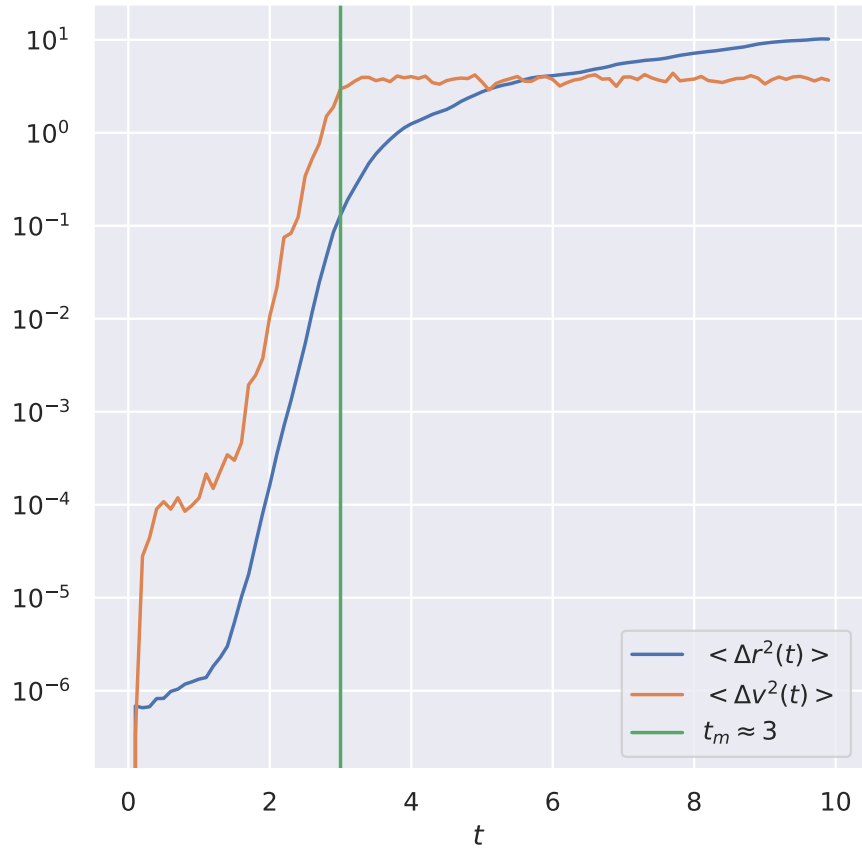


Рис. 1: Усреднённые разбегания координат $\langle \Delta r^2(t) \rangle$ и скоростей $\langle \Delta v^2(t) \rangle$ на двух траекториях, рассчитанных из тождественных начальных условий с шагами $\Delta t_1 = 0.001$ и $\Delta t_2 = 0.0001$. Параметры записаны в таблицу 1.

Таблица 1: Параметры симуляции.

Количество частицы	64
Шаг по времени 1	0.001
Шаг по времени 2	0.0001
Температура	0.44
Плотность	0.5

0.3 Уравнение состояния

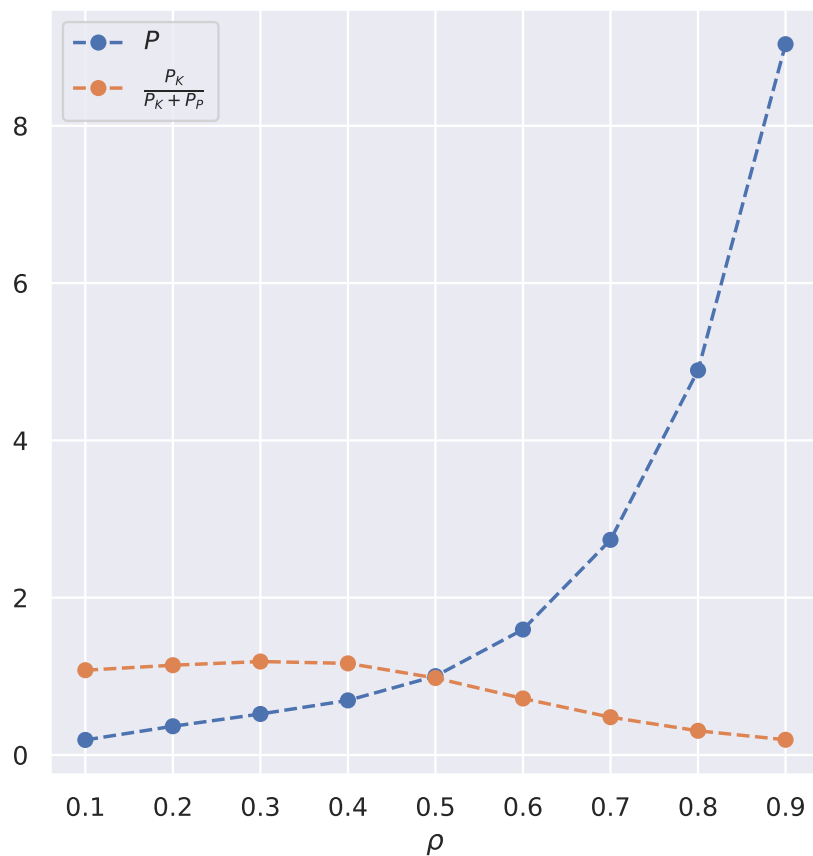


Рис. 2: График зависимости давления P и $P_k/(P_k + P_P)$ от плотностей, где P_k - кинетический вклад в давление и P_P - вириальный вклад. Параметры записаны в таблице 2.

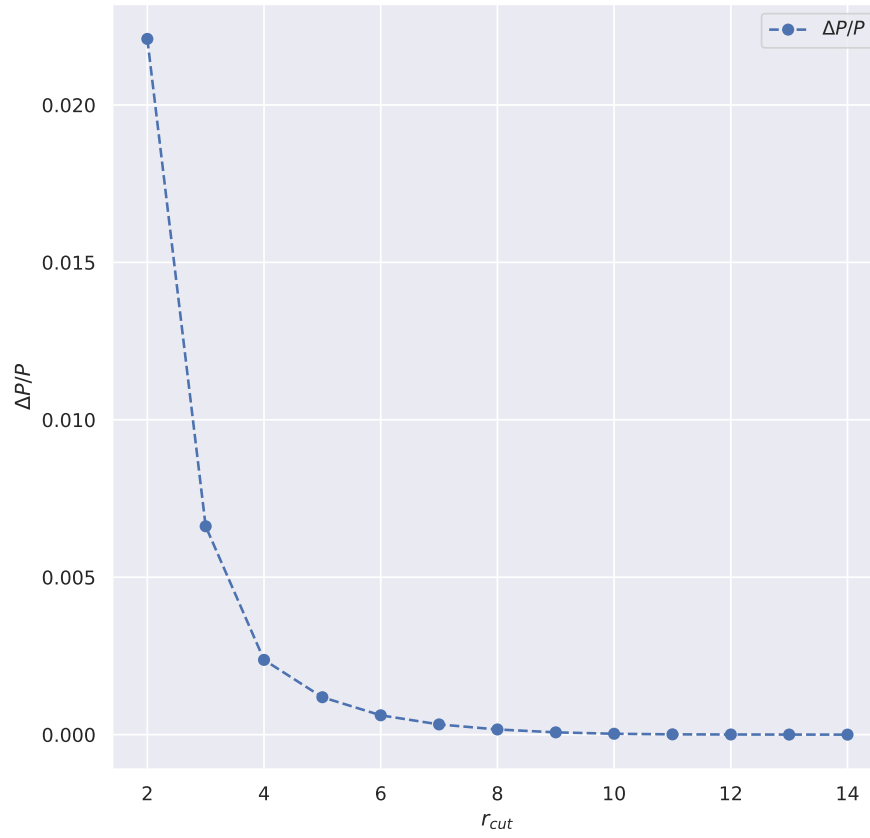


Рис. 3: График зависимости ошибки в давление от обрезки потенциала r_{cut} , где ΔP - это разность между давлением полученное без обрезки и давление полученное с обрезкой потенциала. Параметры записаны в таблице 2.

Таблица 2: Параметры симуляции.

Количество частицы	512
Шаг по времени	0.001
Температура	2
Плотность	0.1

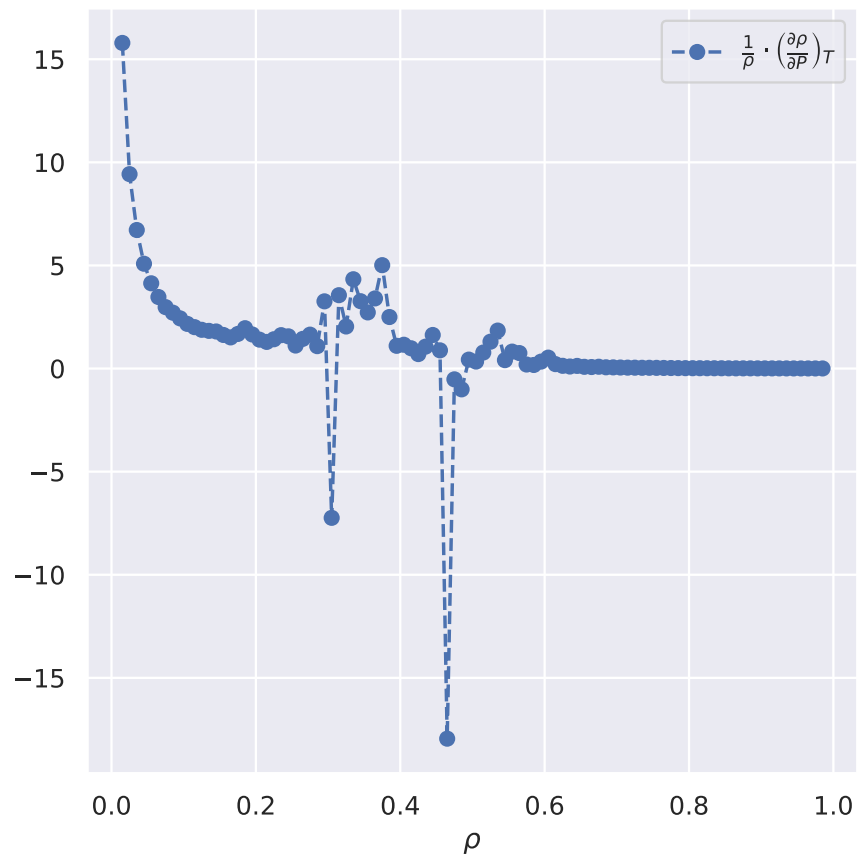


Рис. 4: График зависимости сжимаемости от плотности $T = 2$. Параметры записаны в таблице 2.

0.4 Метод блочных средних

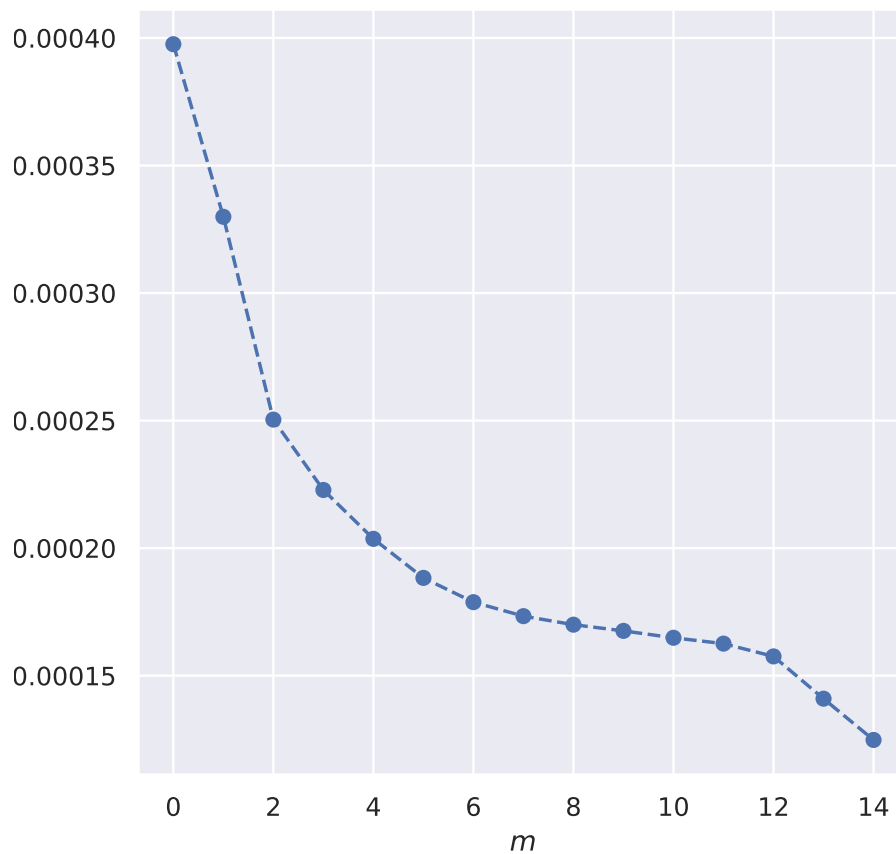


Рис. 5: График зависимости стандартного отклонения полной энергии от количества операций. Параметры записаны в таблице 3.

Таблица 3: Параметры симуляции.

Количество шагов	1000000
Количество частицы	64
Шаг по времени	0.001
Плотность	0.1