

# **Задание 1**

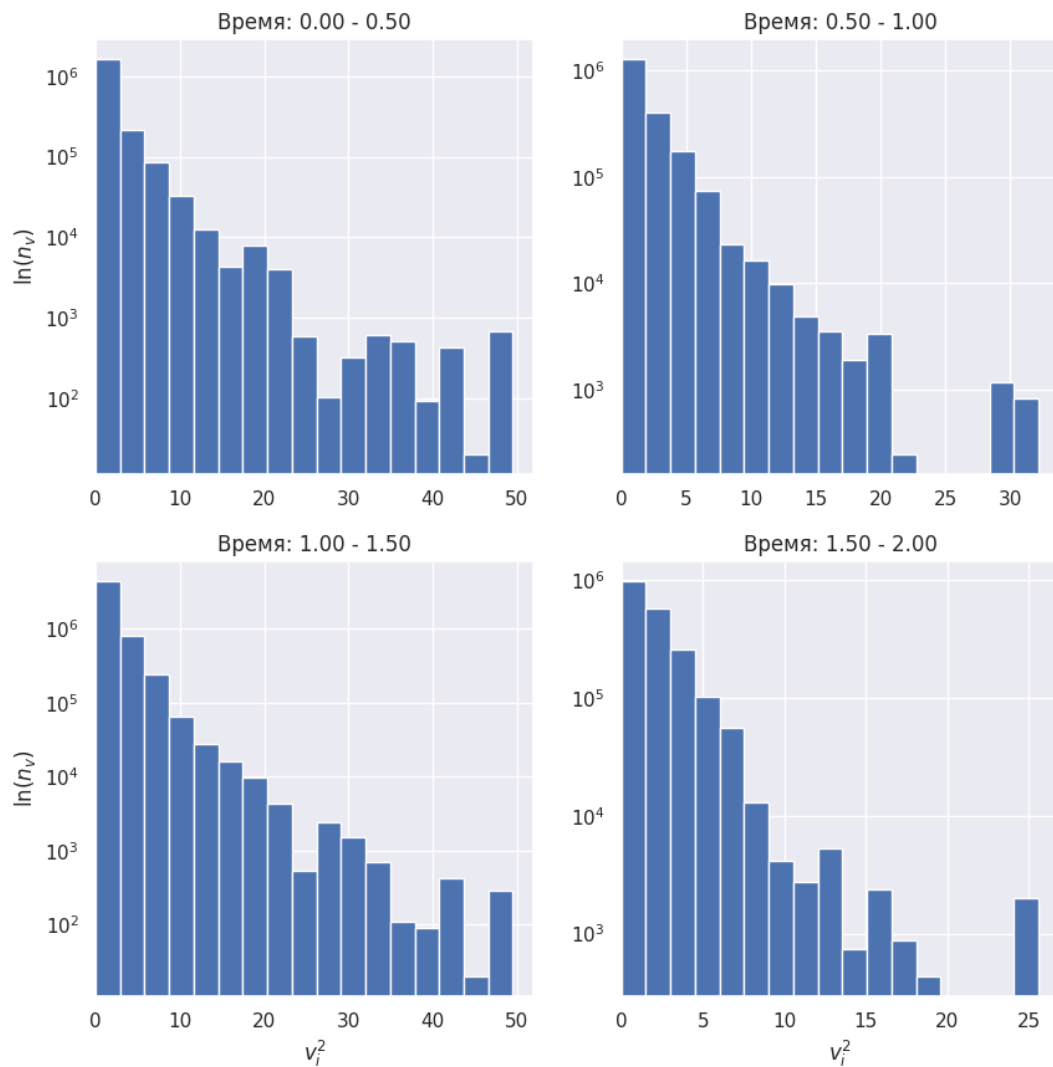
## **Молекулярная динамика**

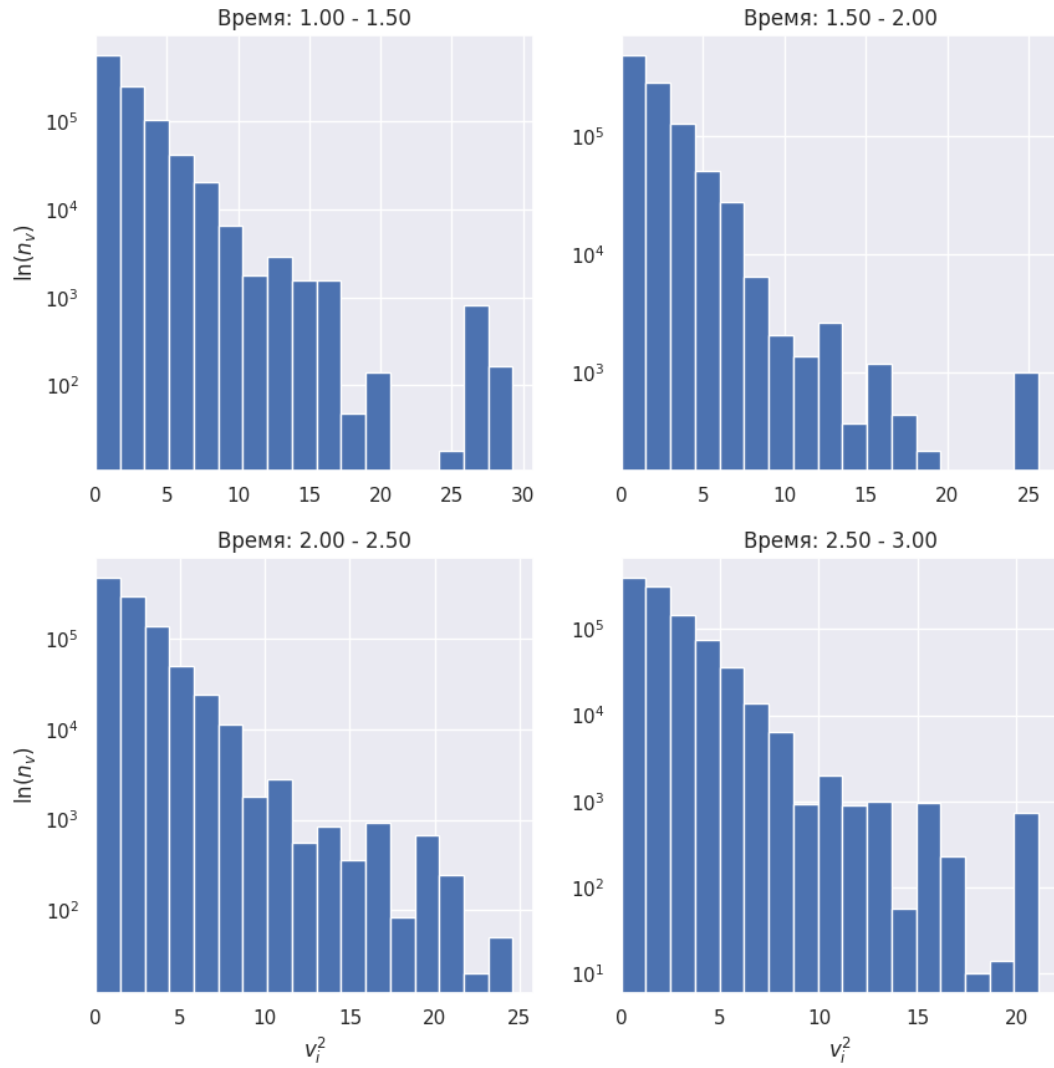
**София Белен Лопес Висенс**  
Группа Б02-903  
Московский физико-технический институт

# Содержание

<b>1</b>	<b>Время установления распределения Максвелла</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Время динамической памяти</b>	<b>4</b>
<b>3</b>	<b>Уравнение состояния</b>	<b>6</b>
3.1	Зависимость давления системы от плотности . . . . .	6
3.2	Зависимость сжимаемости системы от плотности . . . . .	7
3.3	Проверка формулы для поправки давления при обрезке потенциала . . .	8
<b>4</b>	<b>Метод блочных средних</b>	<b>9</b>

# 1 Время установления распределения Максвелла





## 2 Время динамической памяти

$$t_m \approx 3$$

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

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

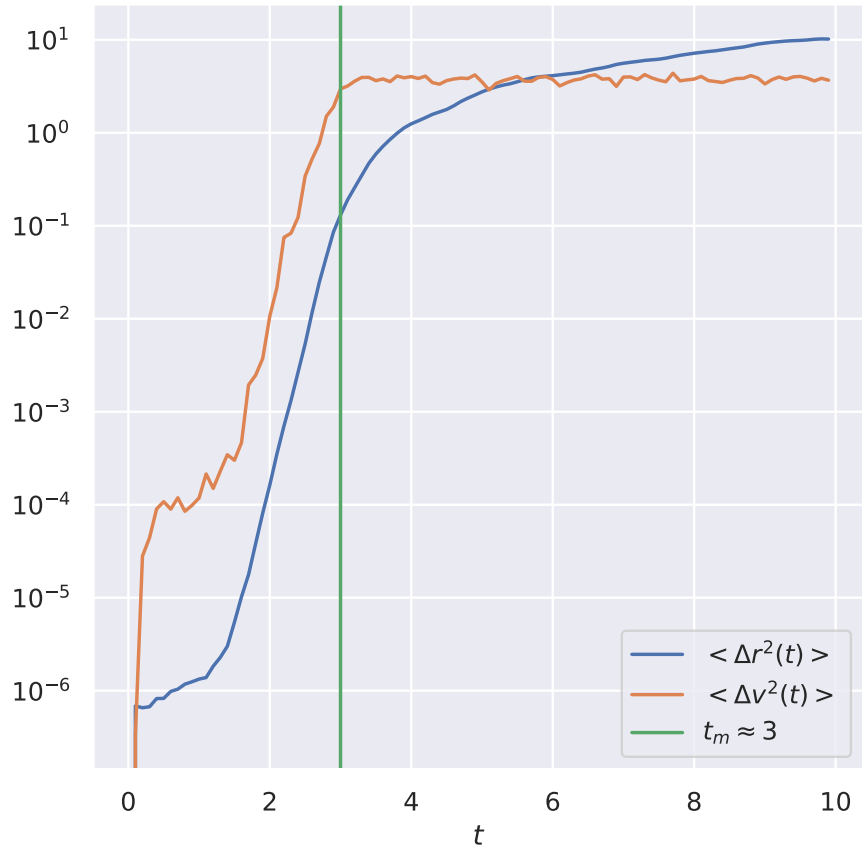


Рис. 1: Усреднённые разбегания координат  $\langle \Delta r^2(t) \rangle$  и скоростей  $\langle \Delta v^2(t) \rangle$  на двух траекториях, рассчитанных из тождественных начальных условий с шагами  $\Delta t_1 = 0.001$  и  $\Delta t_2 = 0.0001$ . Параметры записаны в таблицу 1.

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

### 3 Уравнение состояния

#### 3.1 Зависимость давления системы от плотности

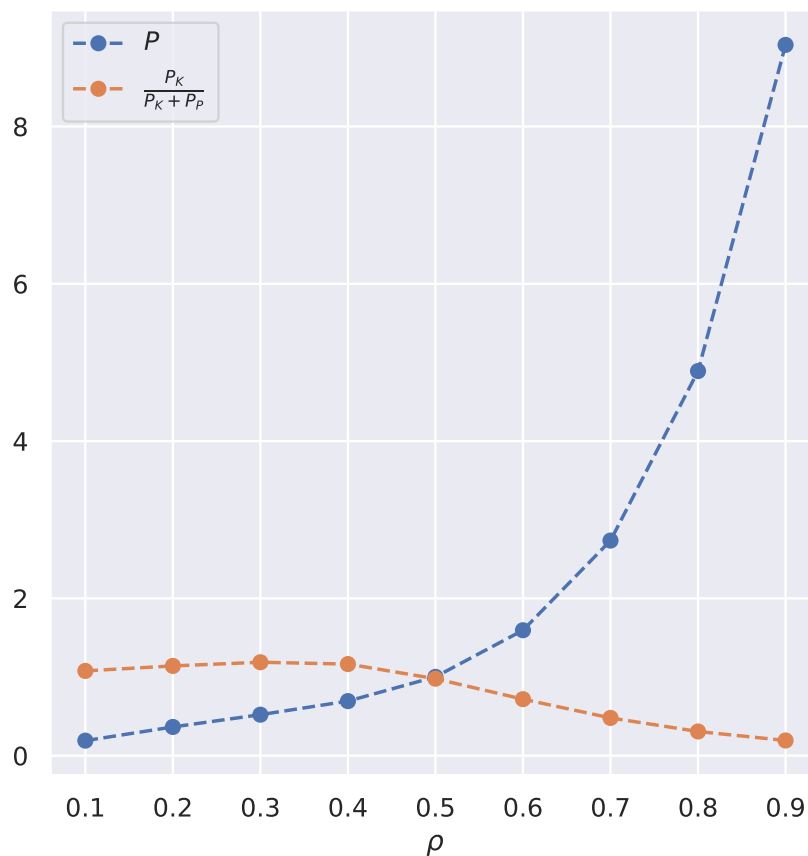


Рис. 2: График зависимости давления  $P$  и  $P_k/(P_k + P_P)$  от плотностей, где  $P_k$  - кинетический вклад в давление и  $P_P$  - вириальный вклад. Параметры записаны в таблице 2.

### 3.2 Зависимость сжимаемости системы от плотности

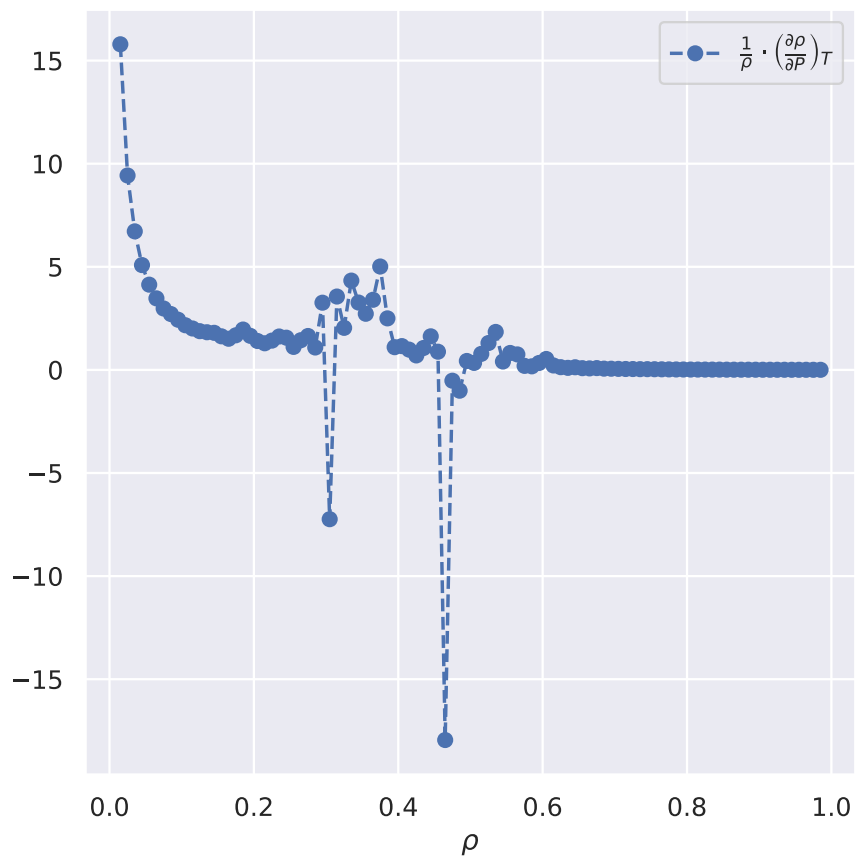


Рис. 3: График зависимости сжимаемости от плотности  $T = 2$ . Параметры записаны в таблице 2.

### 3.3 Проверка формулы для поправки давления при обрезке потенциала

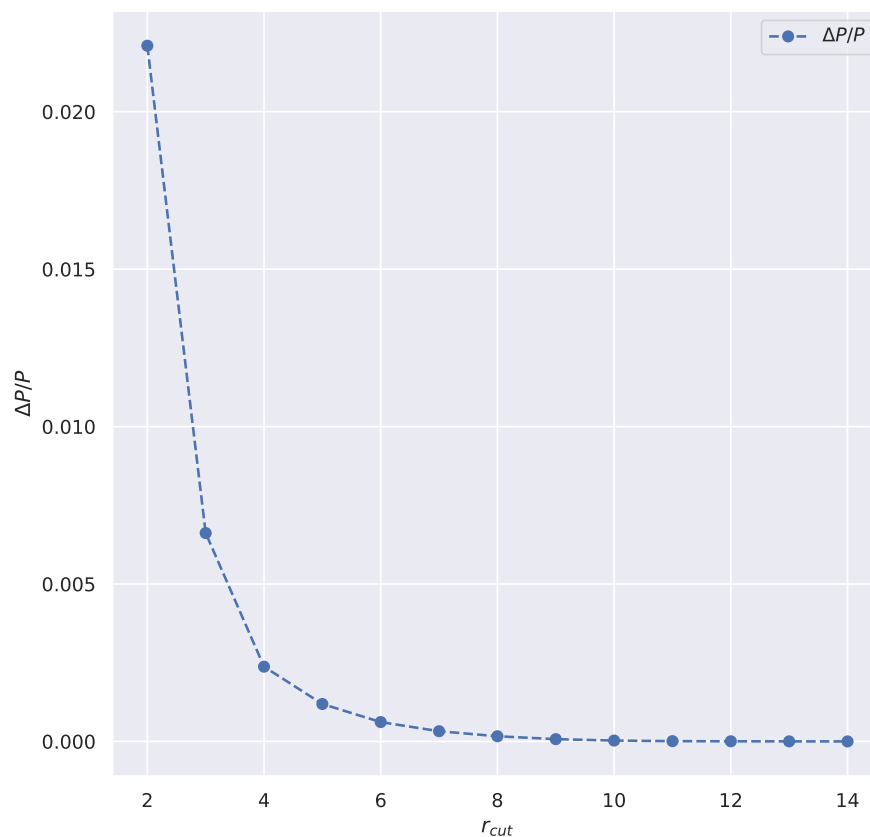


Рис. 4: График зависимости ошибки в давлении от обрезки потенциала  $r_{cut}$ , где  $\Delta P$  - это разность между давлением полученное без обрезки и давлением полученное с обрезкой потенциала. Параметры записаны в таблице 2.

Таблица 2: Параметры симуляции.

Количество частицы	512
Шаг по времени	0.001
Температура	2
Плотность	0.1



## 4 Метод блочных средних

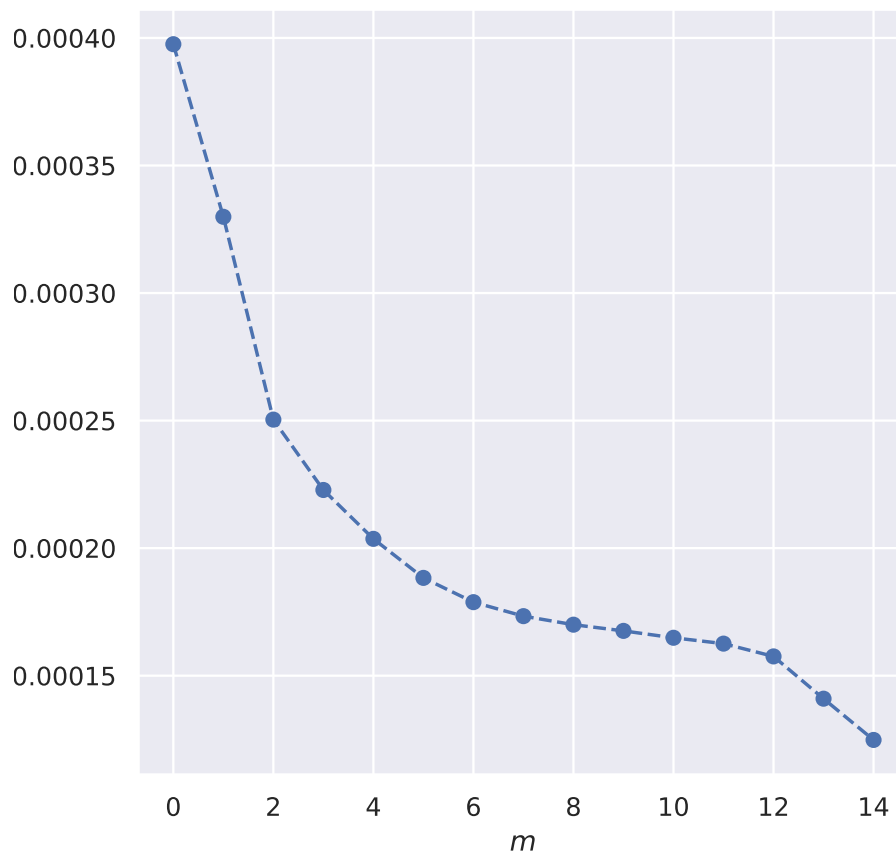


Рис. 5: График зависимости стандартного отклонения полной энергии от количества операций. Параметры записаны в таблице 3.

Таблица 3: Параметры симуляции.

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