

- Друга рачунарска вежба из рачунарских метода у Статистичкој термодинамици -

## II. Једначина стања аргона симулирана Монте- Карло методом

Монте Карло методе чини група рачунарских алгоритама који се ослањају на понављање случајних покушаја како би се добили нумерички резултати. Често се користе у решавању физичких и математичких проблема и веома су корисне у случајевима када је немогуће употребити друге математичке методе. Ове методе се најчешће користе у три класе случаја: математичкој оптимизацији, нумеричкој интеграцији и генерирању узорака код расподеле вероватноће. Циљ ове вежбе је упознавање са могућом применом Метрополисове Монте Карло методе у одређивању термодинамичких параметара стања за систем честица (гас аргона) који интереагују Ленард-Џонсоновим потенцијалом.

### *Упутство:*

У овој вежби се користи програм **MCargon\_NVT.m** који симулира систем честица аргона применом Метрополисове Монте Карло методе. У циљу налажења термодинамичких параметара неопходно је испитати (N,V,T), тј. канонски конфигурациони простор и израчунати виријал система. Конфигурациони простор се испituје тако што се у сваком кораку једна по једна чешица помера у насумичним правцима . Максималан померај чешица је одређен параметром **MaxDisp**. Током извршења програма у командном прозору исписују се вредности параметара симулације у SI јединицама. У програму су имплементирани гранични периодични услови, као и ограничени Ленард-Џонсонов потенцијал.

Извршењем програма добијају се следећи параметри: потенцијална енергија по чешици, укупна енергија по чешици, притисак, топлотни капацитет по чешици. Извршењем програма добијају се следеће графичке зависности: тренутна вредност потенцијалне енергије и тренутна вредност средње потенцијалне енергије у функцији броја корака у симулацији.

**Задаци вежбе:**

- Упознати се са кодом и објаснити које променљиве је неопходно дефинисати на самом почетку како би програм могао успешно да се покрене.
- Избор погодне дужине корака за насумична измештања честица је врло битан. Кратке дужине корака се лако прихватају али споро испитују конфигурациони простор док веће дужине корака боље испитују конфигурациони простор али се и теже прихватају. Проценити максималан померај атома (**MaxDisp**) који је неопходан како би проценат прихваћених корака био приближно 80%. За остале параметре симулације користити:

```
Nparticles = 100  
T = 1,2  
ro = 0,8  
Nsampel = 10000  
Nsteps = 30000  
freq_uzorak = 1000
```

Да ли већи проценат прихваћених корака значи да се конфигурациони простор боље испитује?

- Испитати начин на који број атома утиче на симулацију. Покренути програм користећи 10, 20, 80, 100, 160, и 200 атома и упоредити потенцијалне енергије по атому. За остале параметре симулације користити:

```
T = 1,8  
ro = 0,9  
Nsampel = 1000000  
Nsteps = 2000000  
freq_uzorak = 1000  
MaxDisp = 0,2
```

Графички приказати зависности времена извршења програма и потенцијалне енергије по атому у функцији броја атома. Шта се из добијених резултата може закључити? Прокоментарисати флуктуације средње потенцијалне енергије и промене тренутне потенцијалне енергије у времену.

- Одредити притисак и потенцијалну енергију по атому аргона за следеће густине: 0,1; 0,2; 0,3; 0,4; 0,5; 0,6; 0,7; 0,8; 0,9; 1,0. За остале параметре симулације користити:

```
Nparticles = 100  
T = 2  
Nsampel = 1000000  
Nsteps = 2000000  
freq_uzorak = 5000
```

За максималне помераје атома (**MaxDisp**) узети следеће вредности: 1,5; 1,0; 0,5; 0,4; 0,3; 0,3; 0,2; 0,2; 0,2; 0,2, респективно у односу на густине.

Добијене резултате прокоментарисати и упоредити са резултатима из табеле 1. конструисањем зависности честичне густине од притиска/потенцијалне енергије по атому за табличне и израчунате податке на једном графику.

*Табела 1. Вредности притиска и потенцијалне енергије по атому за различите честичне густине.*

$\rho$	$P^{[1]}$	$v^{[1]}$
0,1	0,1777(2)	-0,667(1)
0,2	0,3290(6)	-1,306(1)
0,4	0,705(1)	-2,538(2)
0,5	1,069(3)	-3,149(2)
0,6	1,756(7)	-3,746(2)
0,7	3,024(7)	-4,300(2)
0,8	5,28(1)	-4,753(3)
0,9	9,09(2)	-5,030(4)

<sup>[1]</sup> Johnson, J. Karl; Zollweg, John A.; Gubbins, Keith E. „The Lennard-Jones equation of state revisited.” Molecular Physics, 78, 3, 1993., pp 591-618.

---

## Упутство за извештај са вежби:

- Извештај се припрема у слободној форми на рачунару.
- Рок за предају срећених вежби је 18.1.2021.
- Срећене вежбе се предају у електронској форми (**.pdf**) на e-mail адресу [branislavm@ffh.bg.ac.rs](mailto:branislavm@ffh.bg.ac.rs).

Извештај треба да садржи:

- Кратак теоријски увод о Метрополисовој верзији Монте Карло методе и о коришћеном Ленард-Џонсоновом потенцијалу.
- Срећене податке (графици, табеле, нумерички подаци ...) са одговорима на питања.

Вежба се оцењује у процентима и заједно са остале две вежбе носи максимално 10 поена.