

# Computersimulering af gasser og væsker

Vi inviterer indenfor hos Fysik på RUC og giver dig mulighed for at lave dine egne simuleringer på en af Danmarks hurtigste supercomputere. Sammen med andre gymnasieelever med interesse for fysik laver du simuleringer, som kan bruges i dit SRP/SOP-projekt. Vores øvelser lægger op til, at du arbejder med din egen faglige vinkel.

I øvelsen arbejdes der med Molecular Dynamics, specifikt med det software der kaldes RUMD, der er udviklet på Roskilde Universitet. Eleven kommer til at opnå indsigt i, hvilke typer af spørgsmål, forskerne typisk leder efter svar på, og i computersimulering af atomer og molekyler - og kommer retur til gymnasiet med resultater fra en eller flere simuleringer i RUMD.

## Hvad kommer du igennem på dagen?

Du får mulighed for selv at lave simuleringer på en af Danmarks hurtigste computere. Du definerer på forhånd hvilket

system, der skal simuleres på dagen, altså hvilke blandinger af atomer/molekyler, temperaturer, tryk og densiteter, der skal en tur gennem RUMD (Roskilde University Molecular Dynamics) og supercomputeren. Vinklen skal være forberedt af dig før fremmøde til SRP/SOP-øvelsen på RUC, så der på forhånd ligger en idé om, hvad der skal undersøges med RUMD og hvorfor.

Vi ser desuden i SRP/SOP-øvelsen nærmere på de simuleringsmetoder, forskerne på Roskilde Universitet anvender i deres forskning, og du kommer til at lære om, hvorfor vi anvender computersimulering, ligesom vi ser på, hvilke indsigter, vi kan få ud af en computersimulering.

## Udarbejdet af:



**Thomas Schröder**  
Lektor i fysik  
Roskilde Universitet

Bruger computerbaserede modeller til at udvikle og teste teorier for materialers egenskaber.



**Nick Bailey**  
Lektor i fysik  
Roskilde Universitet

Udvikler og tester teorier for materialer, herunder væsker og glas, ved brug af supercomputer.

## Målgruppe

For dig som skal skrive studieretningsprojekt (SRP) eller studieområdeprojekt (SOP) i 3.G med fysik som det ene fag.

## Tilmelding

Tilmeldingsfrist og ansøgningsformular finder du på [www.ruc.dk/srp-sop](http://www.ruc.dk/srp-sop).

Pladserne bliver fordelt efter først-til-mølle princippet. Hvis der er mange tilmeldinger, prioriterer vi elever med ABB-niveau i naturfaglige fag.

## Varighed

1 dag

## Antal elever

6 pr. hold

## Hvornår

Afholdes 2 gange årligt: Februar og november. Tilmeldingsfrist og dato for afholdelse annonceres på [www.ruc.dk/srp-sop](http://www.ruc.dk/srp-sop).



## Eksempler

Ædelgasser og blandinger af disse  
 Små molekyler  
 Metaller (fx Cu, Ni, Au, Ag)

## Vinkler

- Hvornår omdannes en gas til væske? (Undersøgelse af fasediagrammer)
- Hvordan fungerer en varmepumpe (Termodynamiske kreds-processer)
- Hvad styrer atomernes tendens til at kondensere fra gas til væske?

## Relevante kombinationsfag

Kemi  
 Matematik  
 Samfundsfag  
 Historie

## Litteratur til forberedelse og yderligere viden

Til download på <https://ruc.dk/undervisningspakke-simulering>

Inden øvelsesdagen forventes du at have læst artiklen og set filmen fra RUC's undervisningspakke i Fysik: "Simulering af gasser og væsker".

