گزارش کار تمرین یازدهم شبیه‌سازی رایانه‌ای در فیزیک

علی اکرامیان – 99100563

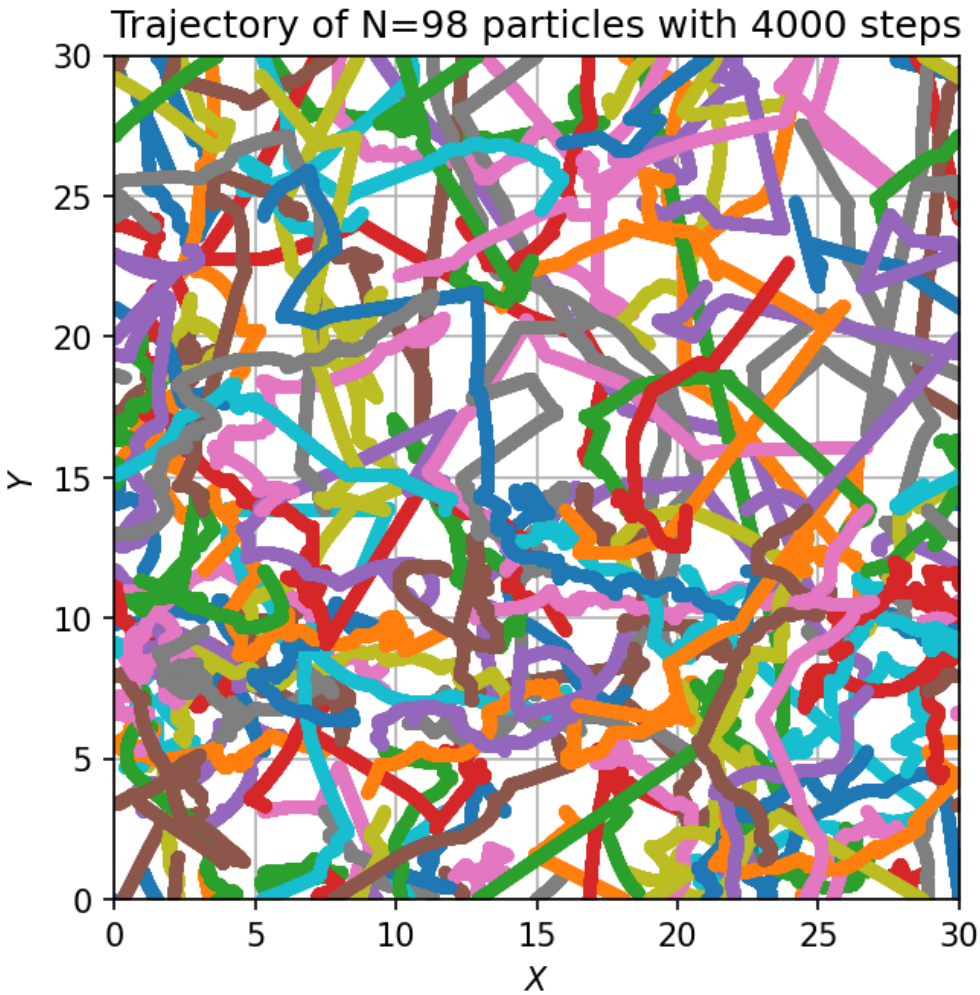
در این تمرین من ابتدا مقادیر اولیه را تعریف کرده‌ام و طبق واحدهای کاهیده نیز جلو رفته‌ام که جرم و طول مشخصه و انرژی مشخصه را یک گرفته‌ام. تعداد را 98 گرفتم که بهتر چیده شود! و عملا همان 100 است و سایز جعبه نیز 30 * 30 است پس همان‌چیزی است که خواسته شده است. سپس h را 0.005 گرفتم. می‌توان کوچک‌تر نیز گرفت ولی چون ران‌تایم کد زیاد است من مقداری h را بزرگ‌تر کردم! شعاع قطع را نیز همان 2.5 * sigma گرفتم. حجم سیستم که عملا همان مساحت است نیز Area است. حال به سراغ توابع می‌روم. ابتدا تابع u(r) و f(r) را تعریف کرده‌ام که به ترتیب پتانسیل و نیرو را (نیرو برداری و در جهت xi است) بر می‌گرداند. سپس تابع init را دارم که شبکه‌ی مکان‌های اولیه برای 98 ذره و سرعت‌های رندوم آن‌ها را از بین V_max تا منفی V_max می‌دهد و شرایط اولیه در این تابع است. قسمتی که کامنت شده نیز برای صفر کردن سرعت مرکز جرم است که فعلا قرارش ندادم. تابع بعدی تابع فاصله d(r1,r2) است که فاصله‌ی بین دو بردار r1 و r2 را محاسبه می‌کند. این تابع بدین صورت کار می‌کند که اگر اختلاف ایکس‌ها یا وای‌های دو ذره از نصف طول جعبه بیشتر شد، این مقدار اختلاف را منهای طول جعبه در جهت بردار دلتا ایکس می‌کنم. برای دلتا وای نیز به همین صورت است (این تابع را من با کمک "فاطمه رمضان‌زاده" زدم). این تابع نیز فاصله را به طور دایره‌ای (نه مربعی) برمی‌گرداند و همچنین جهت بردار فاصله را نیز برمی‌گرداند با اسم r12. حال تابع U(R) را داریم که مکان تمامی ذرات را به صورت یک بردار 2 * N می‌گیرد و پتانسیل دو به دو را حساب کرده و به صورت یک بردار N تایی برمی‌گرداند. شعاع cutoff نیز همان rc است که ابتدای کد تعریف شده بود. تابع Force نیز تقریبا شبیه ب پتانسیل است تنها فرق آن برداری بودن آن و اعمال قانون سوم نیوتن در آن است. شعاع قطع نیز مانند پتانسیل در نظر گرفته شده است. این تابع نیز نیرو را به صورت یک بردار 2 * N تایی برمی‌گرداند که ستون اول آن نیرو در جهت x و ستون دوم آن نیروها در جهت y هستند. تابع بعدی pr(R) است که برای محاسبه‌ی بسط ویریال است. که نیروها ضرب در بردارهای فاصله را محاسبه و روی همه‌ی ذرات جمع می‌زند و این مقدار را برمی‌گرداند. تابع بعدی حل است که verlet(R,V,A) است که مکان‌ها و سرعت‌ها و شتاب‌ها را می‌گیرد و مقادیر آپدیت شده طبق الگوریتم ورله سرعتی را بازمی‌گرداند. این تابع حل یک مرحله است که در لوپ اصلی برنامه به کار می رود. تابع بعدی sol است که طرز کار آن دقیقا مانند ورله است ولی با رانگه کوتای مرتبه چهار حل می‌کند که این تابع در لوپ اصلی کامنت شده ولی دقت آن از ورله بالاتر است ولی حجم محاسبات بیشتر شده و خیلی بیشتر طول می‌کشد این محاسبات پس با ورله سرعتی من بقیه‌ی محاسبات را پیش بردم. تابع بعدی KE(vx,vy) است که سرعت‌ها در جهات مختلف را گرفته و انرژی جنبشی را برمی‌گرداند. تابع PE(R) نیز همین کار را برای پتانسیل انجام می‌دهد. تابعcorr نیز یک آرایه می‌گیرد و autocorrelation زمانی را برای آن حساب می‌کند. در این تابع من این اتوکورلیشن را برای هر ذره در هر زمان حساب کرده‌ام و سپس روی ذرات میانگین می‌گیرد و تابع یک آرایه که به ازای jهای مختلف برمی‌گرداند.

حال کد اصلی عملا شروع می‌شود! ابتدا تابع init را صدا می‌زنم که خروجی R و v دارد که ماتریس‌های مکان و سرعت‌های اولیه هستند. حال چند ماتریس صفر تعریف می‌کنم که بعدا به درد می‌خورند! حال برای شروع الگوریتم ورله سرعتی یک بار شتاب را توسط تابع نیرو حساب می‌کنم و حلقه‌ی اصلی برنامه را شروع می‌کنم. در این حلقه حل معادلات نیرو انجام می‌گیرد و مکان‌ها و سرعت‌ها آپدیت می‌شوند و در

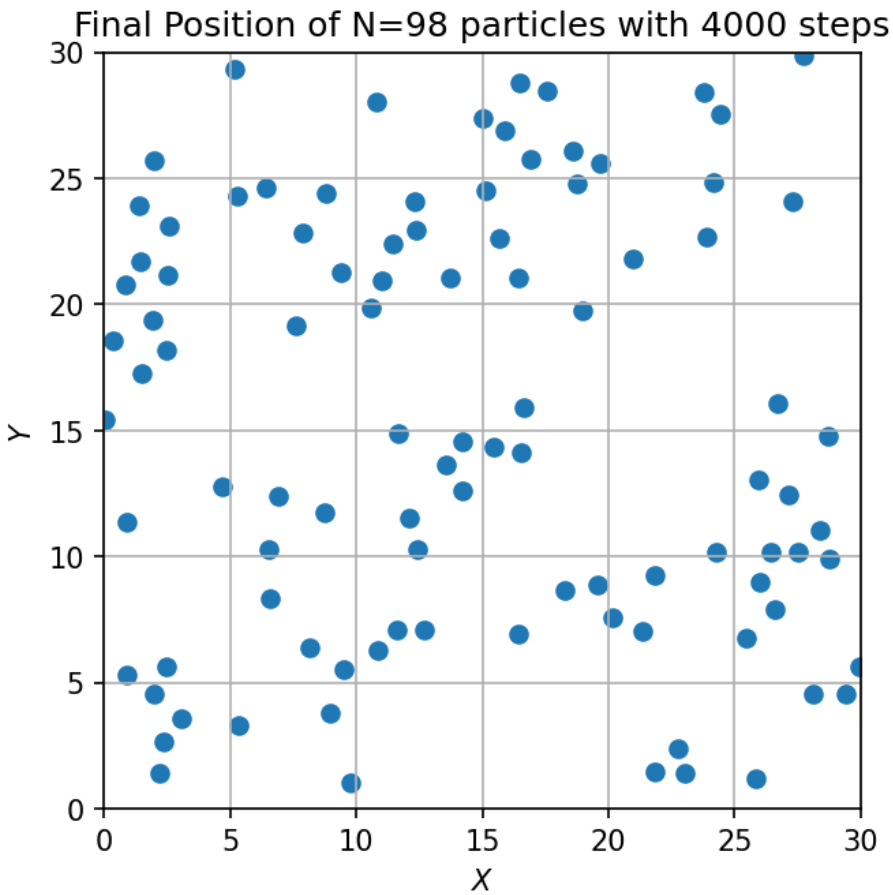
آرایه‌های متناظرشان ذخیره می‌شوند. چون در کلب کار می‌کنم همه چیز را ذخیره می‌کنم! اگر دو خط کامنت شده را از کامنت در بیاوریم نیز حب توسط رانگه کوتای مرتبه چهار انجام می‌شود ولی من شکل‌ها و داده‌هایم به دلیل کوتاه‌تر بودن ران‌تایم با الگوریتم ورله سرعتی است. در این حلقه انرژی‌ها نیز ذخیره می‌شوند و همچنین مکان ذرات نیز چک می‌شوند که اگر در نیمه‌ی بالایی هستند در آرایه‌ای ریخته شوند و بعدا با چک کردن طول این آرایه در هر زمان می‌فهمیم که چقدر ذرات پخش شده اند. در ضمن یادم رفت که بگویم من در نیمه‌ی چپ شروع نکرده‌ام و ذراتم در تابع init در پایین جعبه به صورت کریستالی هستند و سپس در تعادل انتظار می‌رود نصف در پایین و نصف در بالای جعبه باشند. طبعا هم‌ارز سوال خواسته شده است! حال انرژی جنبشی را با داشتن سرعت‌ها محسابه کرده و به صورت آرایه‌ای در زمان‌های مختلف دارم تمام انرژی‌ها را. یک Ps دارم که متغیر جمع زده شده در بسط ویریال است که در حلقه‌ی اصلی درایه‌های این آرایه محاسبه می‌شوند. حال یک حلقه دارم که ترجکتوری را رسم می‌کند.بقیه‌ی برنامه نیز رسم همین چیزهاییست که حساب کردم و نیاز به توضیح ندارد. بقیه‌ی چیزها را در قسمت خودشان توضیح بیشتر خواهم داد.

الف) رسم trajectory از سیستم:

برای تعداد 98 ذره و برای زمان کاهیده‌ی T = 0 تا T = 20 ثانیه‌ی کاهیده رسم کرده‌ام مسیرها را:

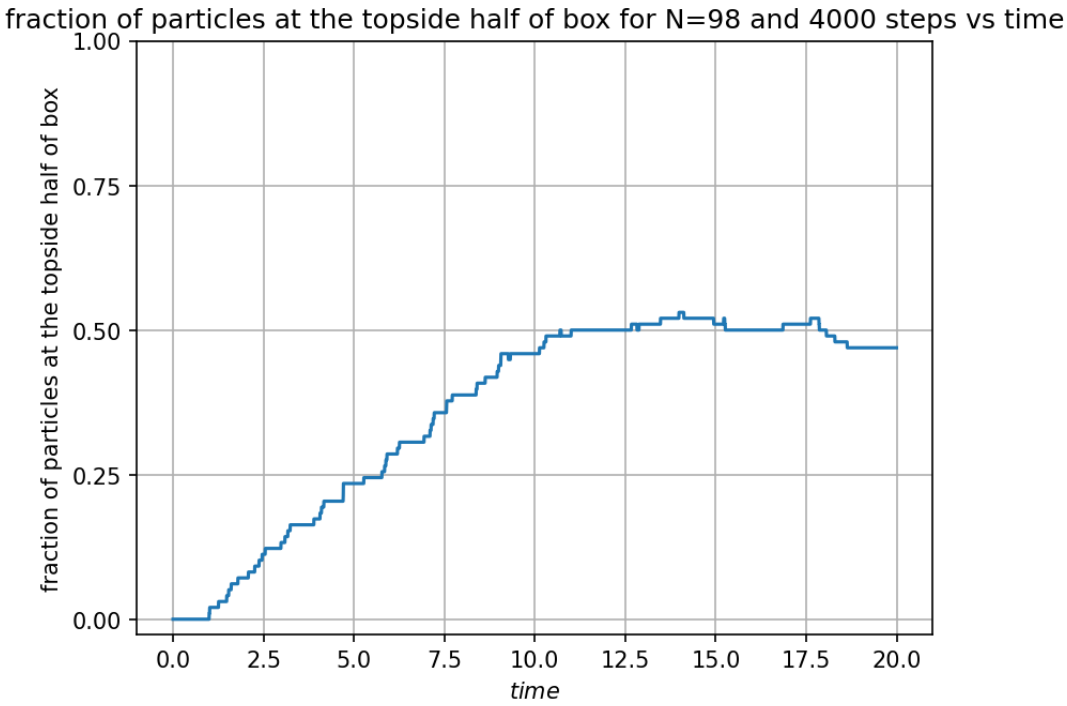


حال چون تعداد ذرات زیاد است شاید بهتر باشد که فقط موقعیت نهایی ذرات را پس از گذشت 20 ثانیه‌ی کاهیده ببینیم:



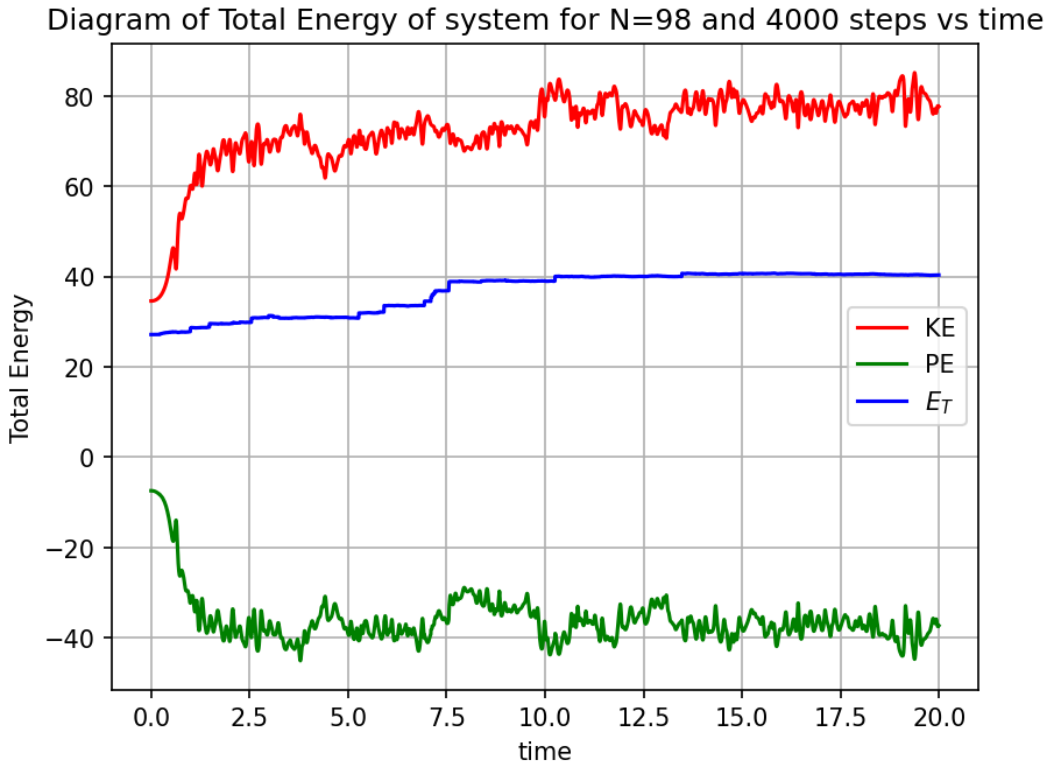
ب) نمودار تعداد ذرات در بالای جعبه (که در ابتدا خالی بوده است) که معیاری از تعادل است

در شکل واضح است که از صفر شروع شده (چون در ابتدا همه در نیمه‌ی پایین بوده‌اند) و سپس در حدود 50 درصد ذرات نوسان می‌کنند:



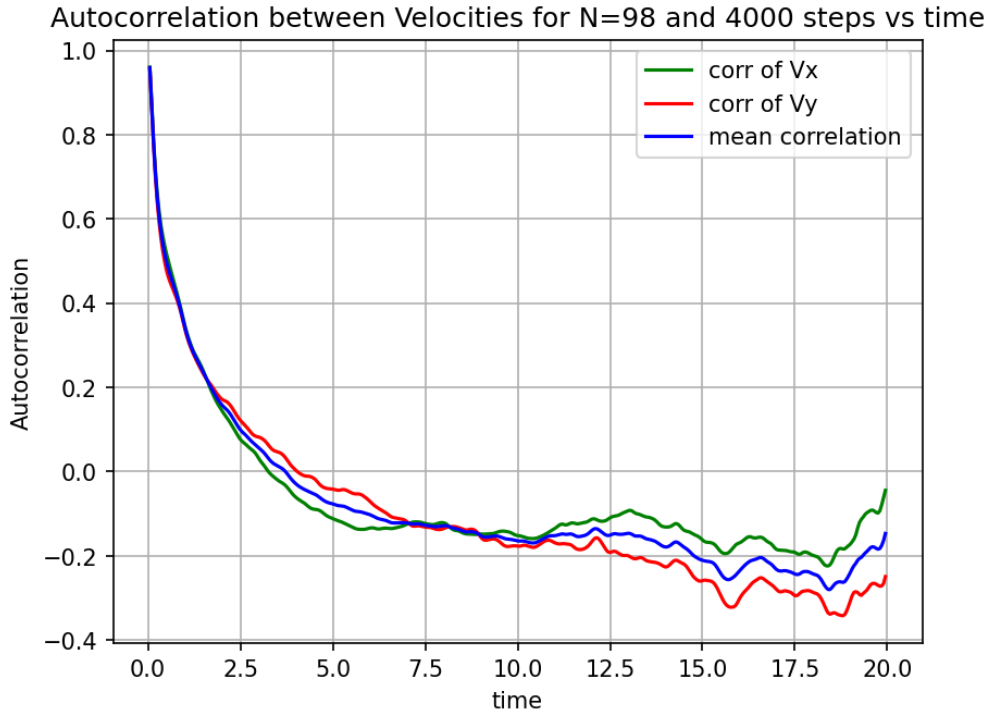
پ) تحقق پایستگی انرژی در سیستم

حال چون آرایه‌های انرژی جنبشی و پتانسیل را داریم در هر زمان، پس آن‌ها را برحسب زمان رسم می‌کنیم. در ضمن می‌دانیم مجموع این دو باید ثابت باشد که تقریبا برای شکل من نیز ثابت است. البته اگر h را کوچک‌تر کنیم طبعا این خطا نیز کمتر خواهد شد.



ت) تابع خودهم‌بستگی سرعت‌ها

حال تابع اتوکورلیشن را که حساب کردم برای سرعت‌ها در هر راستایی حساب کرده و میانگین می‌گیرم و هر سه را رسم می‌کنم. نتیجه را می‌بینیم:



که بدیهی است که از نزدیک 1 شروع می‌شود چون سرعت‌ها با هم مرتبط اند و بعد از گذشت زمان کم شده و به صفر میل می‌کنند چون سیستم دیگر حافظه نداشته و سرعت‌ها کاملا از هم مجزا و غیر وابسته می‌شوند.

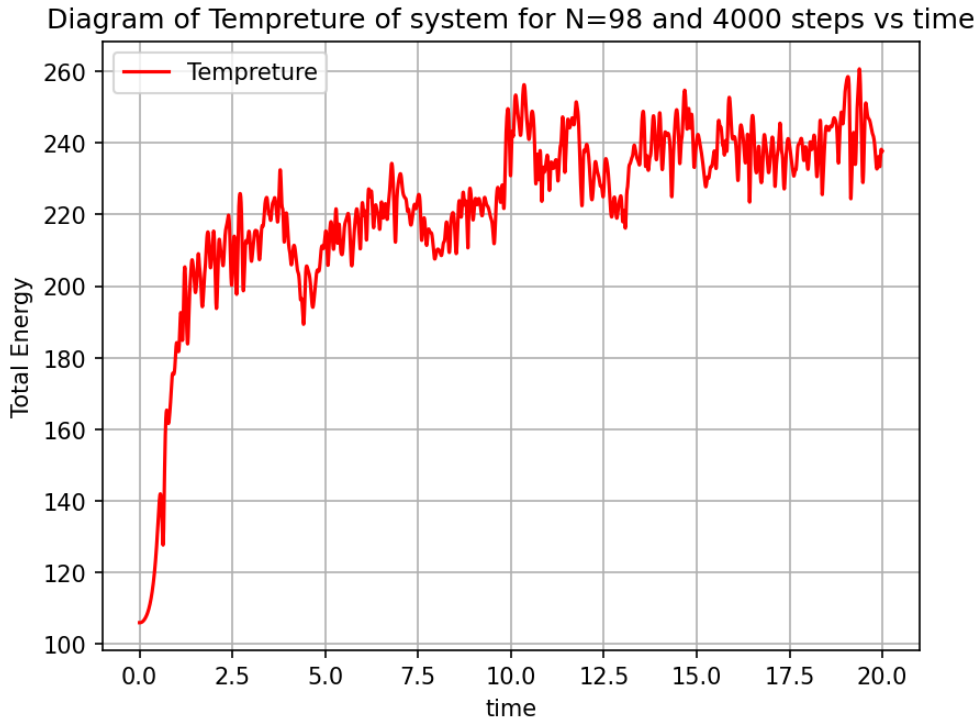
ث) محاسبه‌ی دما و فشار سیستم

برای محسابه‌ی دما از میانگین انرژی جنبشی استفاده کرده و برای محسابه‌ی فشار از بسط ویریال. به ورت زیر ازین آرایه‌هایی که حساب کرده‌ام استفاده می‌کنم:

$$\langle K \rangle = N k_B T \Rightarrow T = \frac{\langle K \rangle}{k_B T}$$

که چون این عبارت باید با بعدهای ما یکسان سازی شود این کار را می‌کنم: چون ایسیلون از اردر k T است و دما در دمای اتاق می‌توان گرفت پس می‌توانم انرژی جنبشی که باید برای درست شدن بعدش در ایسیلون ضرب شود را به صورت بالا درست کنم که k ها با هم ساده شده و یک 300 کلوین که دمای اتاق است باقی می‌ماند و در کل باید این عدد در 300 ضرب شود که دما را به کلوین به من بازگرداند که من این کار را در کد انجام دادم.

نمودار زیر نمودار دما بر حسب زمان است که تصحیحات بالا را بر رویش اعمال کردم و واحدها را درست کردم.



که اگر مثلا چند ثانیه‌ی کاهیده‌ی آخر را در نظر بگیریم چیزی از حدود 240 کلوین دمای سیستم است.

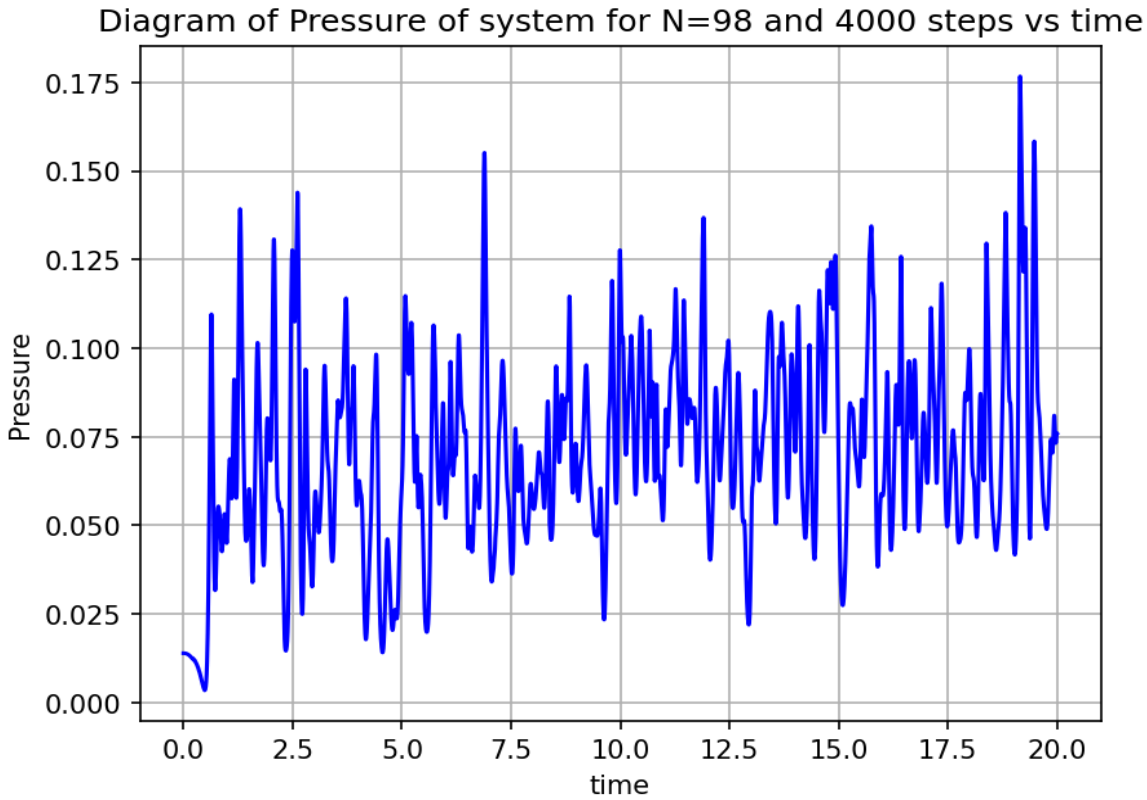
حال فشار را از طریف بسط ویریال محسابه می‌کنم. این بسط را در دو بعد می‌نویسم:

$$P = \frac{Nk_BT}{A} - \frac{1}{2A}\sum_i \vec{F}_i \cdot \vec{r}_i$$

$$P = \frac{\langle K \rangle}{A} - \frac{1}{2A}\sum_i \vec{F}_i \cdot \vec{r}_i$$

که A مساحت جعبه‌ی ماست که جایگزین V در سه‌بعدی شده است.

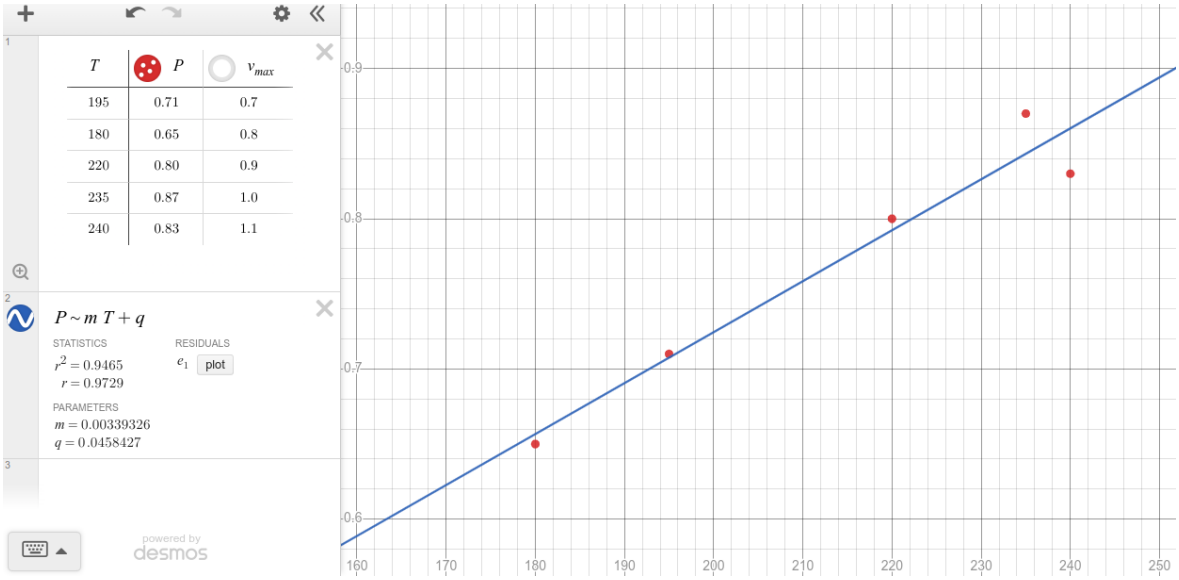
حال در بالا توضیح دادم که جمله‌ی دوم در تابع pr حساب شده و پس از حلقه‌ی اصلی تقسیم بر 2A نیز میشود. عبارت اول نیز همان انرژی جنبشی تقسیم بر مساحت است. حال این دو را از هم کم کرده و بر حسب زمان رسم می‌کنم و به فشار می‌رسم. فشار نیز بعد نیرو به مجدور متر دارد که یعنی بر sigma^2 تقسیم شود تا بعد آن درست شود و یعنی در sigma^2 / k T ضرب شود تا درست شود واحدهای کاهیده‌ی ما. طبق نمودار مشخص است که فشار این جعبه است.



ج) تحقق رابطه‌ی واندروالس و تحقق ثوابت واندروالس گاز آرگون

حال با استفاده از فشار و دمای حالت تعادل (در این شبیه‌سازی من می‌توان ثانیه‌ی 15 تا 20 کاهیده را مثلا حالت تعادل گرفت و فشار و دما را خواند. من چون ران‌تایم کدم بالا بود و برای هر کدام حدود 15 دقیقه باید منتظر می‌ماندم و گاها شرایط اولیه نیز طوری بود که شتابم بسیار زیاد می‌شد (چون h زیاد بود تقریبا) و من تست می‌کردم که به ازای سرعت‌های اولیه‌ی ماکزیمم متفاوت به مشکل نخورد، مقادیر فشار و دما را داخل کد فیت نکردم و هر سری میانگین را نوشته و با دسموس خط را فیت کردم (اگر v_max زیاد می‌بود بد می‌شد گاها!)

من به ازای v_max های 0.7 و 0.8 و 0.9 و 1 و 1.1 دما و فشار تعادلی را بدست آوردم و خط را فیت کردم تا ثوابت واندروالس را بدست بیاورم.



حال طبق رابطه‌ی واندروالس ثوابت را بدست می‌آوریم:

$$P = \frac{Nk_BT}{V - Nb} - \frac{aN^2}{V^2}$$

طبق اسم گذاری من در دسموس ضریب T همان m و عرض از مبدا q است. که روابط این‌گونه بدست می‌آیند:

$$a = -\frac{qN^2}{V^2} \quad , \quad b = \frac{V}{N} - \frac{k_BT}{m}$$

که با مقدار گذاری اعداد زیر رو به رو بدست می‌آید:

$$a = -\frac{qN^2}{V^2} = -0.004295$$

که برای تبدیل شدن به SI باید در 100000 ضرب شوند.

$$b = \frac{V}{N} - \frac{k_BT}{m} = 0.0000258$$