

شبیه سازی رایانه ای در فیزیک

تمرین ۹

علی ستاره کوکب
شماره دانشجویی: ۹۵۱۰۰۴۹۱

۲۶ دی ۱۳۹۹

۱ مقدمه

در این تمرین می خواهیم گاز آرگون را به کمک دینامیک مولکولی شبیه سازی کنیم و تحول خواص ترمودینامیکی مانند فشار و دما را مشاهده کنیم.

۲ ساختار کلی برنامه

برای شبیه سازی ابتدا کمیت های موجود در مساله را بدون بعد می کنیم. برای این کار در دستگاهی کار می کنیم که در آن واحد طول σ و واحد انرژی ϵ می باشد. از روی این دو واحد، زمان بی بعد را نیز می سازیم. علت کار کردن با این دستگاه واحد ها آن است که ما در این شبیه سازی از پتانسیل لnard-Jones^۱ استفاده می کنیم (رابطه ی ۱) و این دستگاه واحد های طبیعی سیستم می باشد

$$U = 4\epsilon[(\frac{\sigma}{r})^{12} - (\frac{\sigma}{r})^6] \quad (1)$$

در این تمرین ما شبیه سازی را در دو بعد انجام داده ایم. برای این کار یک صفحه ی مربعی به طول 30 در واحد های کاهیده در نظر می گیریم و 100 اتم آرگون را بصورت منظم در نیمه ی چپ این صفحه می چینیم. سرعت ها را نیز از یک تابع توزیع تصادفی بین $-v_{max}$ و v_{max} انتخاب می کنیم. تا اینجا ی کار شرایط اولیه سیستم را تعیین کرده ایم. در کد، این کار توسط تابع initialize انجام گرفته است. چون در این مساله نیروی خارجی وجود ندارد، نیاز است که سرعت مرکز جرم را صفر کنیم. برای این کار از تابع v renormalize در برنامه استفاده می

^۱Lennard-Jones

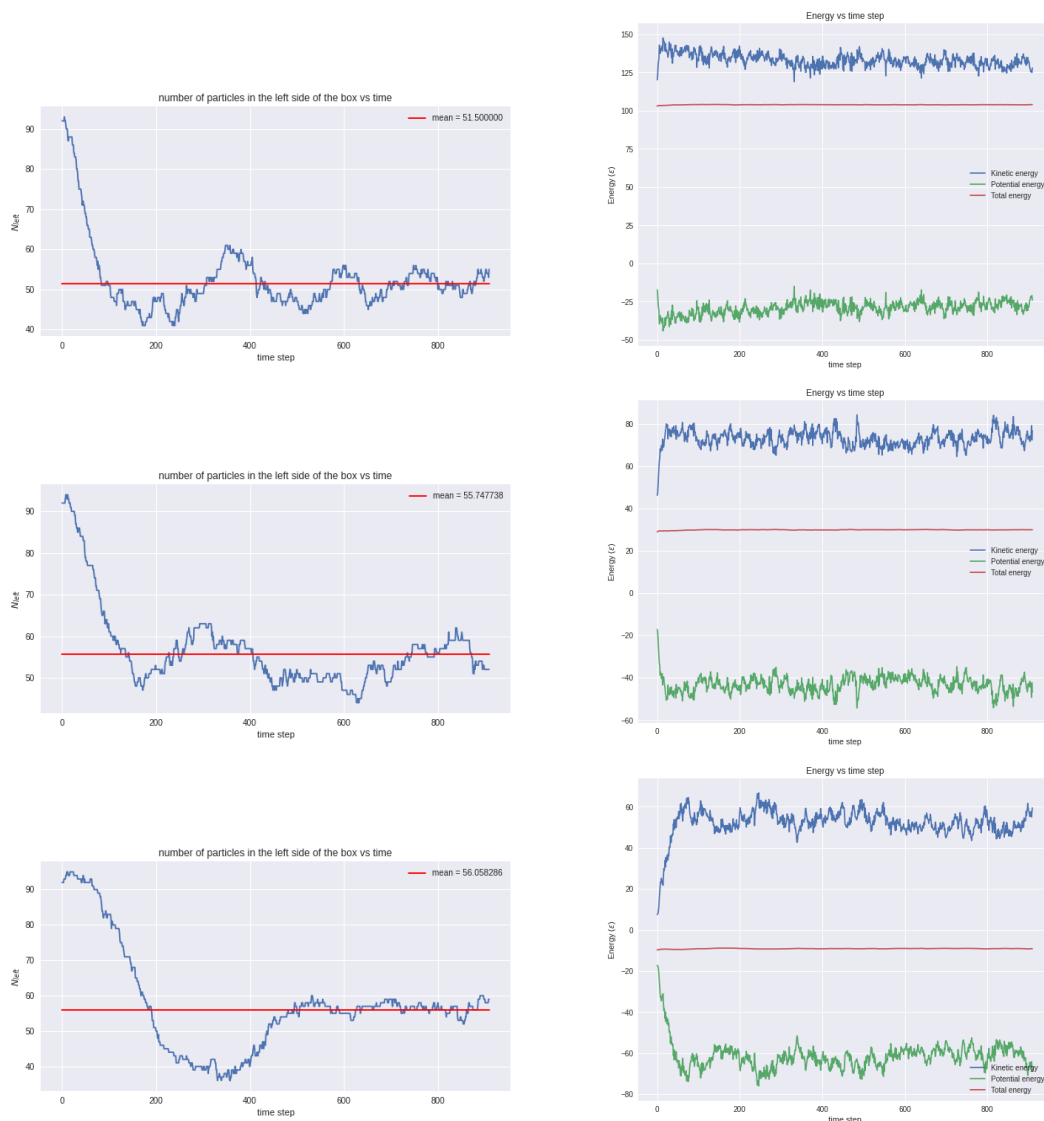
کنیم. تمام اطلاعات ذرات که شامل مکان، سرعت و شتاب آنها می باشد را در یک آرایه به نام data قرار می دهیم و در سرتاسر برنامه اطلاعات ذرات را در این آرایه در هر مرحله به روز رسانی می کنیم.

برای آنکه دینامیک ذرات را بدست آوریم نیاز است تا معادله دیفرانسیل حاکم بر ذرات برای تمام ذرات را حل کنیم. در این کد از الگوریتم ورله سرعتی^۲ برای این کار استفاده شده است. این الگوریتم در تابع timestep قرار داده شده است. وظیفه ی این تابع همانطور که از نام پیدا است، آن است که یک گام زمانی برنامه را به جلو ببرد. محاسبه ی شتاب ها و انرژی پتانسیل در تابع U a صورت می گیرد. با توجه به آنکه شرایط مرزی در اینجا بصورت تناوبی می باشد، این شرط ها نیز در تابع timestep گنجانده شده است. به علت وجود این شرایط مرزی، برای محاسبه ی نیروی وارد بر هر ذره باید تصاویر ذرات را نیز در نظر بگیریم. با توجه به آنکه شعاع قطع (cut off) را کوچکتر از نصف طول جعبه در نظر می گیریم، بنابراین حداکثر یکی از تصاویر هر ذره می تواند به ذره ی مورد نظر نیرو وارد کند. در نتیجه کافی است که نزدیک ترین تصویر هر ذره را پیدا کرده و سپس بررسی کنیم که آیا در شعاع قطع قرار می گیرد یا نه. برای این کار فاصله مختصه ی x و y تمام ذرات نسبت به یکدیگر را حساب می کنیم و سپس تمام این اعداد را با جمع یا کم کردن L بین $\frac{L}{2}$ و $\frac{L}{2}$ قرار می دهیم. سپس فاصله ی ذرات (r) را محاسبه می کنیم و آن ذراتی که برای هر ذره داخل شعاع قطع قرار می گیرند را می یابیم و در نهایت داخل یک حلقه تمام نیروها را در دو راستای x و y محاسبه می کنیم. در همین تابع به علت شباهت رابطه ی انرژی پتانسیل و صرفه جویی در محاسبات، انرژی پتانسیل را نیز محاسبه می کنیم و در متغیر U نگه داری می کنیم.

۳ داده گیری

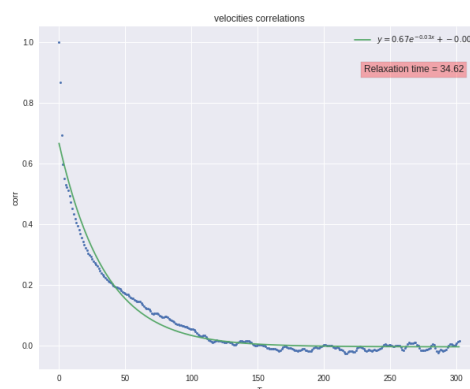
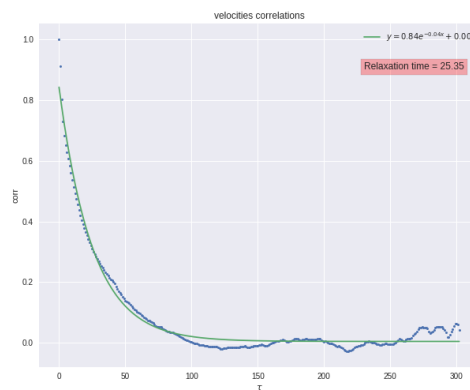
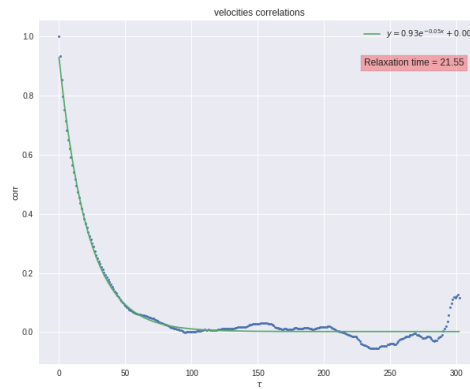
تا اینجا ی کار موفق شده ایم توابع اصلی مورد نیاز برای شبیه سازی دینامیک مولکولی را بنویسیم و اکنون می توانیم داده های مورد نیاز را از این کد استخراج کنیم. برای بدست آوردن داده ها نیاز است تا چند ثابت را برای این کد تعیین کنیم. اولین ثابت h یا گام های زمانی است که برای حل معادله ی دیفرانسیل مان از آن استفاده می کنیم. در این جا h را برابر 10^{-3} در نظر گرفته ایم. پارمترهای دیگر که برای شروع برنامه باید تعیین کنیم زمان شبیه سازی و شعاع قطع می باشد. زمان شبیه سازی را برابر 0.2 نانو ثانیه گرفته ایم که تقریباً برابر 450000 گام زمانی می باشد. شعاع قطع را نیز برابر 3 (در واحد های کاهیده) در نظر می گیریم. نمودارهای بدست آمده را در زیر مشاهده می کنید.

velocity verlet^۲



شکل ۱: نمودار انرژی و تعداد ذرات در نیمه ی چپ جعبه برحسب زمان به ترتیب از بالا به پایین برای سه حالت گاز، مایع و جامد. همانطور که دیده می شود انرژی کل بقا دارد و انرژی پتانسیل و جنبشی پس از مدتی به حالت تعادل خود می رسند.

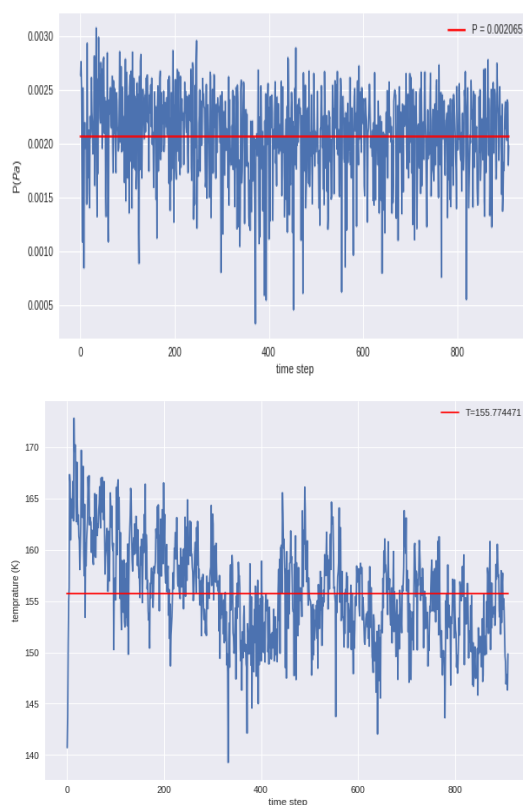
کدهای مربوط به این قسمت ها در نوت بوک MD Cython موجود است. برای یافتن دما و فشار ابتدا باید بگذاریم تا سیستم به حالت تعادل برسد. برای بررسی این موضوع همبستگی سرعت ها را محاسبه می کنیم که کد این قسمت نیز در نوت بوک MD Cython با عنوان *correlations velocities* موجود است. در زیر، نمودار هم بستگی سرعت ها را در چند دمای مختلف می بینید.



شکل ۲: نمودار همبستگی سرعت ها بر حسب زمان برای سه حالت گاز، مایع و جامد (به ترتیب از بالا به پایین) دقت کنید که برای بدست آوردن همبستگی به فاصله صد تا صد داده ها ذخیره شده اند بنابراین عدد زمان واهش گزارش شده در نمودار های بالا را باید در ۱۰۰ ضرب کرد تا عدد واقعی بر حسب گام زمانی بدست آید.

برای بدست آوردن دما و فشار پس از آنکه زمان واهلش^۳ را یافتیم کافی قسمت اول داده ها تا قبل از این زمان را کنار بگذاریم و با میانگین گیری روی دما و فشار لحظه ای، دما و فشار تعادلی را بدست آوریم که این نمودار ها را نیز در زیر می بینید. لازم به ذکر است که برای یافتن فشار از بسط ویریال (رابطه ی ۲) استفاده کرده ایم و در تابع U a تصحیح ویریال که بیانگر برهمکنش های دو نقطه ای می باشد را محاسبه می کنیم و در لیستی به نام virial ذخیره می کنیم و برای محاسبه ی فشار از آن استفاده می کنیم.

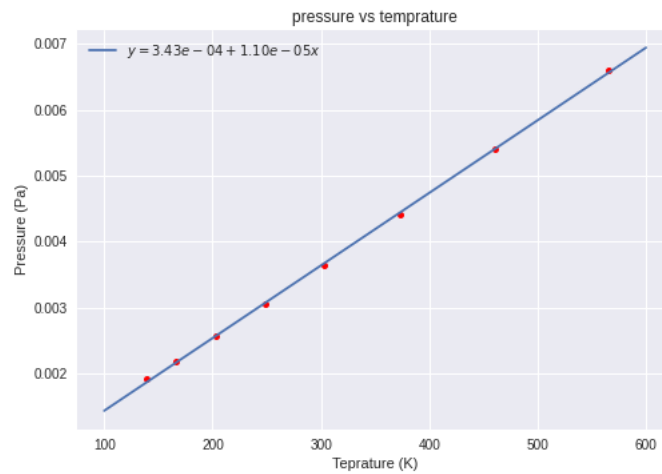
$$PV = NK_bT - \frac{d}{2} \sum_{i=1}^N F_i r_i \quad (۲)$$



شکل ۳: نمودار فشار و دما برحسب زمان برای ۱۰۰ ذره گاز آرگون)

برای مقایسه با رابطه ی گاز واندروالس کافی است تا نمودار فشار برحسب دما را رسم کنیم.

relaxation time^۳

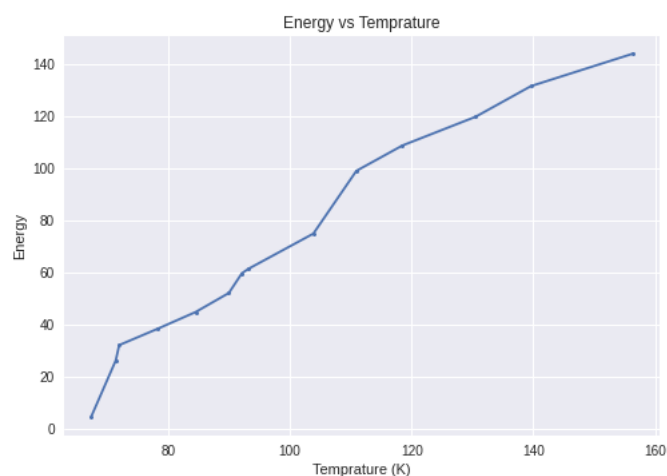


شکل ۴: نمودار فشار برحسب دما. همانطور که دیده می شود مشابه رابطه واندروالس، یک رابطه ی خطی میان فشار و دما برقرار است.

همانطور که دیده می شود، رابطه ی فشار با دما یک رابطه ی خطی مشابه رابطه گاز واندوالس (رابطه ی ۳) می باشد.

$$P = \frac{RT}{V - b} - \frac{a}{v^2} \quad (۳)$$

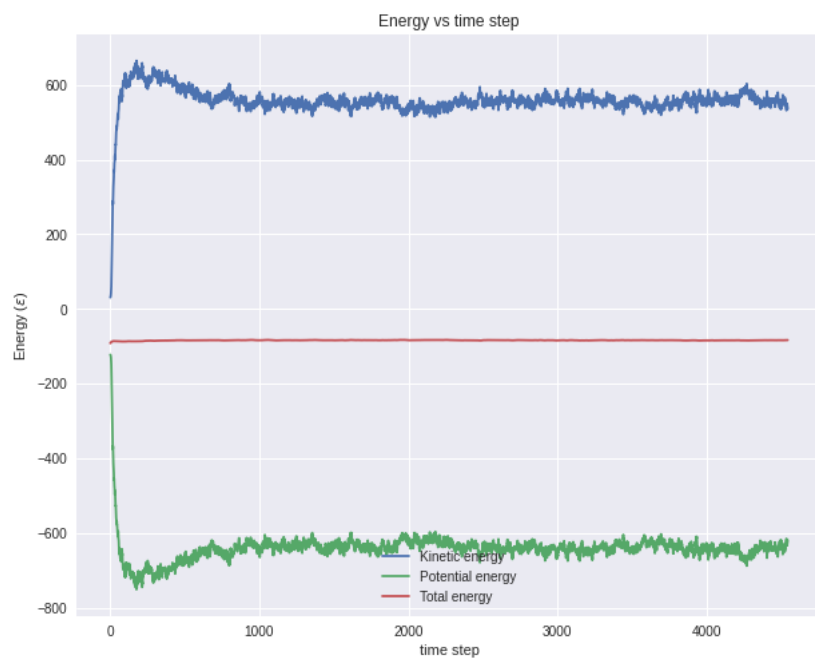
برای مشاهده ی تغییر فاز کافی است تا نمودار انرژی برحسب دما را رسم کنیم. در این نمودار نقاطی که در آنها شیب خط تغییر می کند نقاطی است که تغییر فاز رخ می دهد.



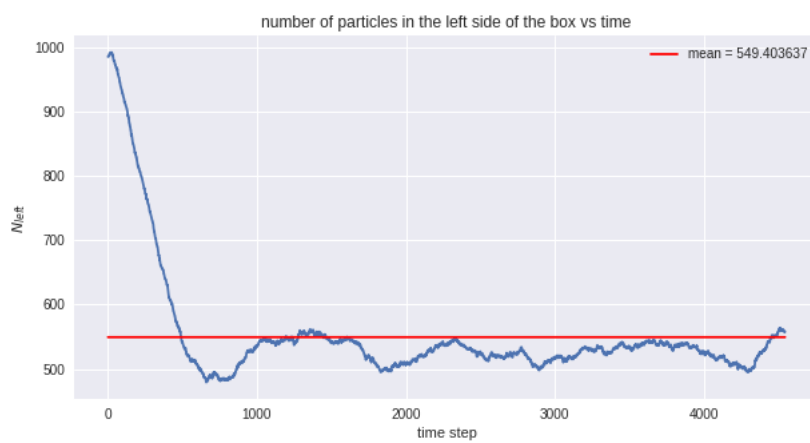
شکل ۵: نمودار انرژی بر حسب دما. نقاطی که در آنها شیب خط تغییر می کند، تغییر فاز رخ می دهد.

۴ امتیازی

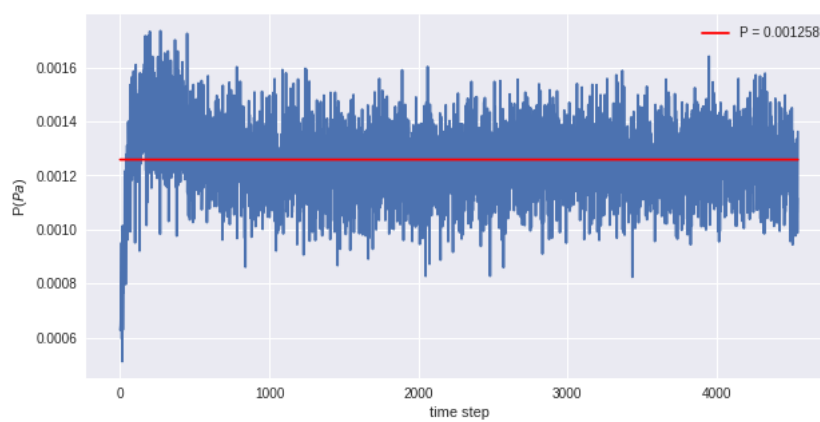
در فایل ارائه شده، انیمیشنی از اتم های گاز در سه دمای مختلف آورده شده است. برای درست کردن این انیمیشن ها، پس از هر صد بار اجرا مکان اتم ها را در یک فایل به فرمت xyz ذخیره می کنیم و به کمک نرم افزار VMD انیمیشن را می سازیم. برای آنکه آمار بهتری داشته باشیم برنامه را برای هزار ذره اجرا می کنیم و نمودارهای مربوطه را رسم می کنیم که در زیر می بینید. فایل انیمیشن برای هزار ذره نیز در فایل ارائه شده موجود است.



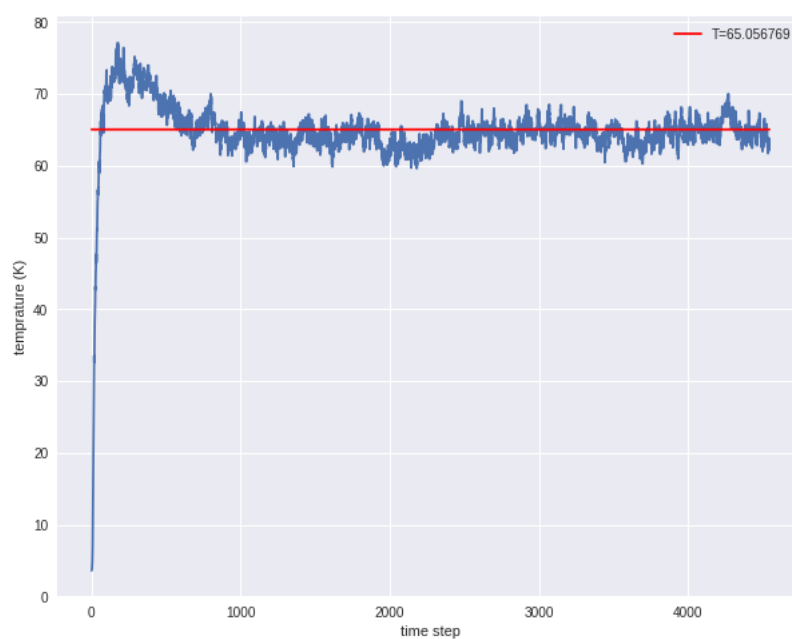
شکل ۶: نمودار انرژی بر حسب زمان برای ۱۰۰۰ ذره



شکل ۷: نمودار تعداد ذرات در نیمه ی چپ جعبه برای ۱۰۰۰ ذره



شکل ۸: نمودار فشار برحسب زمان برای ۱۰۰۰ ذره



شکل ۹: نمودار دما برحسب زمان برای ۱۰۰۰ ذره