

تمرین شبیه سازی MD
علی قبله 99109971

مقدمه:

مسئله‌ای که با آن مواجه هستیم، مسئله شبیه‌سازی یک سری 100 تایی از اتم گاز آرگون است که در یک فضای دو بعدی حضور دارند. این شبیه‌سازی با استفاده از پتانسیل لنارد-جونز صورت می‌گیرد. البته تنها شرط نیست و برای این شبیه‌سازی 2 شرط دیگر نیز اضافه می‌کنیم. اول آنکه اتم‌ها در سمت چپ به صورت کریستالی قرار گرفته‌اند و سرعت به صورت تصادفی می‌باشد.

تئوری:

پتانسیل لنارد-جونز به صورت زیر توضیح داده می‌شود و ساده سازی می‌شود تا به فرمول های ساده تری برای شبیه‌سازی برسیم (چرا که بدون ساده سازی بسیار سخت خواهد شد و چه بسا غیر ممکن):

$$U_{ij} = 4\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right), r_{ij} = \|\vec{r}_i - \vec{r}_j\| \quad (1)$$

For Argon:

$$m_{arg} \sim 10^{-26} \text{ Kg}, \sigma = 3.47 \times 10^{-10} \text{ m}$$

For simplicity:

$$m \rightarrow \frac{m}{m_{arg}}, U \rightarrow \frac{U}{\epsilon}, r \rightarrow \frac{r}{\sigma}$$

So for Potential U_{ij} we can write:

$$u_{ij} = 4 \left(\frac{1}{r_{ij}^{12}} - \frac{1}{r_{ij}^6} \right) \quad (2)$$

The equations for kinetic and potential energy of the system are:

$$K = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n v_i^2 \quad (3)$$

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n u_{ij} \quad (4)$$

حال می‌توان با استفاده از تئوری بالا، شبیه‌سازی را پیش برد. البته لازم به ذکر است که در ادامه این شبیه‌سازی نیاز به تئوری ویرال است و از طریق آن می‌توان فشار را بدست آورد. برای به دست آوردن دما نیز می‌توان نوشت:

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{e=1}^d v_{ie}^2 = Nd \frac{1}{2} k_B T \quad (5)$$

شبیه‌سازی:

این شبیه‌سازی شامل چند بخش است. ابتدا بایستی "کلاسی" برای ابتدای کار تعریف کنیم. این "کلاس" به ما کمک می‌کند که برای گاز های دیگری نیز بتوانیم این کد را پیاده سازی کنیم. تعریف این "کلاس" و استفاده آن به این شکل از خواسته‌های این بخش در کلاس بود. راحتی تولید "کلاس" باعث می‌شود که با تعریف آن در یک فولدر و صدا کردن آن، حجم زیادی از کد نوشتن کم شود به این معنی که هربار که نیاز بود این "کلاس" را صدا می‌کنیم و بخش های مورد نیاز را استخراج می‌کنیم.

این "کلاس" محاسبات را با استفاده از متد ورله انجام می‌دهد. از توابع مهم در آن می‌توان به محاسبات شتاب، خود متد ورله، محاسبات انرژی جنبشی و پتانسیل سیستم، محاسبه دما و فشار و در آخر به انیمیشن برای نشان دادن نحوه حرکت ذرات اشاره کرد. در بخش محاسبات دو مورد بسیار مهم وجود دارد. اول آنکه برای محاسبات نیاز است یک شرایط مرزی لحاظ شود برای زمانی که به یک سمت جعبه می‌رسد و یا وقتی با یک ذره برخورد می‌کند. دوم آنکه با یک جست‌وجوی ساده در "ویکیپدیا" متوجه می‌شویم که لنارد-جونز یک پتانسیل میان مولکولی است و برای فواصل زیاد این پتانسیل تقریباً 0 است. پس لازم است که فاصله‌ای را تعریف کنیم و فرض کنیم از این فاصله به بعد این پتانسیل دقیقاً صفر می‌باشد.

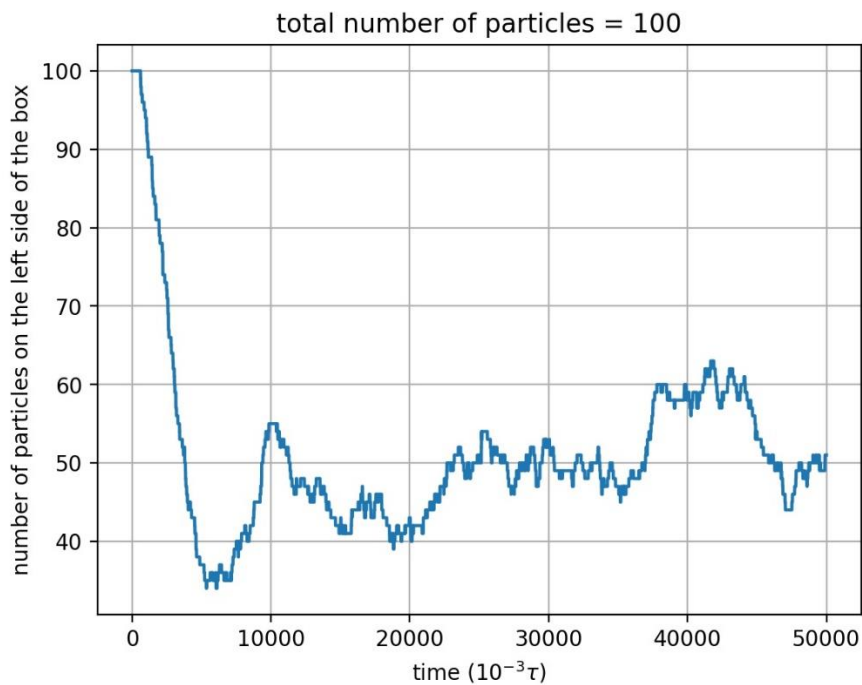
خواسته های این شبیه‌سازی 6 مورد می‌باشد. کد ما نیز به 6 بخش تقسیم شده است. بخش اول ذخیره داده‌ها می‌باشد. در این بخش 4 داده ذخیره می‌شود. انرژی، فشار، دما و سرعت. در بخش دوم نمودار انرژی کل و نمودار ذرات در سمت چپ نسبت به زمان به دست می‌آیند و بقای انرژی بررسی می‌شود. در بخش بعدی نمودار فشار بر حسب دما کشیده می‌شود. بخش چهارم برای بدست آوردن دما و فشار تعادل و نشان دادن دما و فشار سیستم نسبت به گذر زمان است. بخش پنجم برای تابع خودهمبستگی سیستم و محاسبه زمان تعادل می‌باشد. بخش ششم برای انیمیشن و به اصطلاح نشان دادن رفتار ذرات و مسیر حرکتی آنها است. بخش چهارم در یک پوشه جداگانه قرار دارد.

زمان اجرای این کد تقریباً 1 ساعت است.

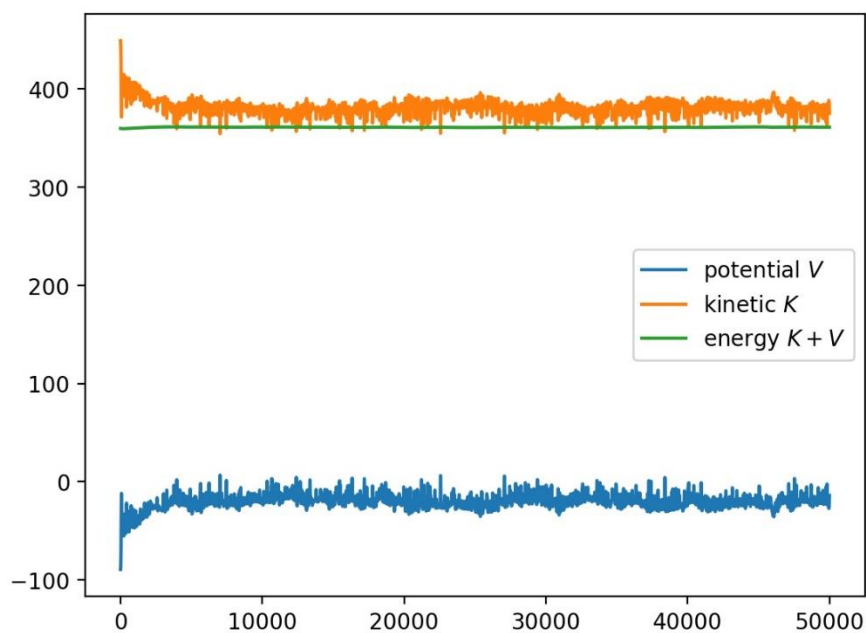
برای انجام این کد در دو جا از یک کد سورس (کد گیت هاب علی ماهانی) استفاده شده است. اول در رابطه با بخش تابع خود همبستگی است و دوم بخش انیمیشن است.

خواسته ها:

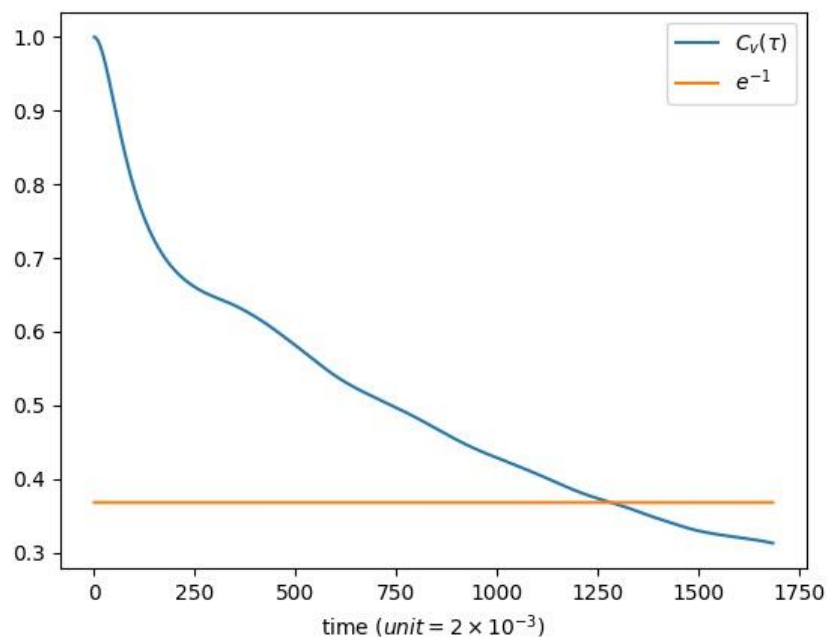
1. مسیر حرکتی اتم‌ها در پوشه انیمیشن به صورت یک انیمیشن قابل مشاهده است.
2. نمودار تعداد ذرات در جعبه به صورت زیر است و طبق انتظار تقریباً حول تعداد 50 تا نوسان می‌کند.



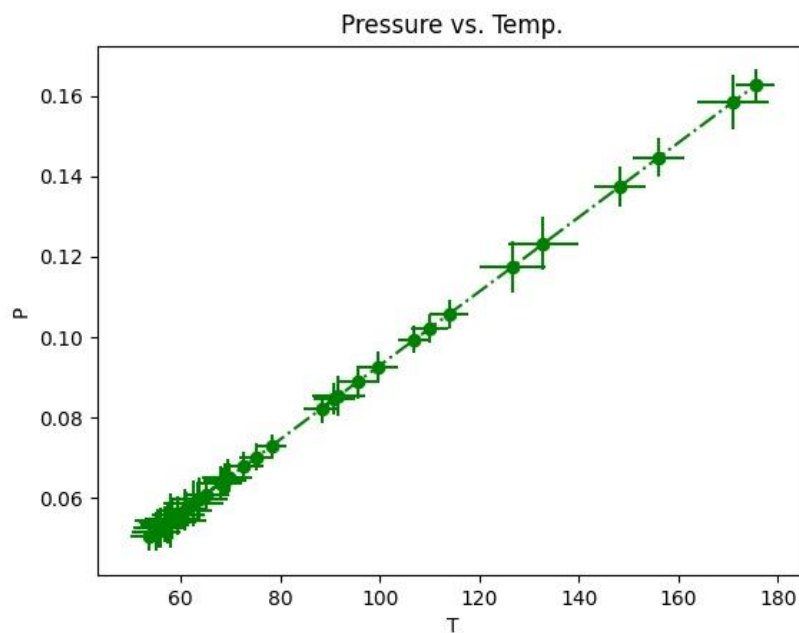
3. تحقیق بقا انرژی در این سیستم. خط سبز انرژی کل در این سیستم است و همه چیز بدیهیست. (انرژی نسبت به زمان)



4. نمودار خود همبستگی و محاسبه زمان تعادل سیستم به صورت زیر است و با استفاده نقطه برخورد با نمودار $1/e$ ، می توان زمان تعادل را محاسبه کرد. $T = 2564 \times 10^{-3} = 2.564\tau = 2.564 \times 10^{-12}s$



5. محاسبه دما و فشار سیستم. مشاهده می کنیم تغییرات فشار بر حسب دما در هر انرژی به صورت زیر است. البته اگر لزومی بر کشیدن نمودار دما بر حسب انرژی وجود داشته باشد، در خواسته 7 اجرایی شده و با استفاده از نمودار زیر رابطه میان فشار و انرژی نیز بدیهی می شود.



6. بدست آوردن a و b و محاسبه مقدار خطای نسبی برای آرگون

برای به دست آوردن این ضرایب می‌توانیم با استفاده از نمودار بالا که نسبت فشار به دما رسم شده است و فرض ثابت بودن همیشگی حجم و تبدیل واحد های کاهیده، این ضرایب را محاسبه کنیم.
رابطه ضرایب کاهیده به صورت زیر است:

$$\left(P_r + \frac{3}{V_r^2}\right)\left(V_r - \frac{1}{3}\right) = \frac{8}{3}T_r$$

با استفاده از نمودار بالا و قرار دادن اعداد 100 و 0.09 در دمای کاهیده و فشار کاهیده، حجم کاهیده را به دست می‌آوریم. طبق رابطه حجم کاهیده می‌توان حجم بحرانی را به دست آورد. با استفاده از حجم بحرانی می‌توان ضریب b را محاسبه نمود.

$$V_r = \frac{V_m}{V_c} = \frac{V}{nV_c} \Rightarrow V_c = \frac{V}{nV_r} = 3b$$

حال تنها کافیسیت V را محاسبه کنیم. برای این موضوع بایستی دما و فشار در حالت تعادل را محاسبه کنیم. محاسبه آن در کد آمده است.

برای دما: *Equalized Temp. is 88.61884978793191 (+/-) 5.4523788470560826 K*

برای فشار: *Equalized pressure is 0.08235477480797708 (+/-) 0.005096081782521548*

نمودار تغییرات دما و فشار در گذر زمان در فایل وجود دارد و مشاهده تعادل را تسریع می‌کند.

با استفاده از این دو و رابطه معروف $PV = nRT$ ، V بدست می‌آید و با جای‌گذاری برای ثابت b عدد 0.01 را با واحد لیتر بر مول بدست می‌آوریم. (می‌توانستیم از دانش آنکه اندازه 30 تایی است نیز استفاده کنیم اما در محاسبه n نادقیق می‌شدیم برای همین این روش را رفتیم).

همانند بالا، همین مسیر را برای فشار طی می‌کنیم و برای ثابت a عدد 3.24 در واحد لیتر به توان دو بر مول به دست می‌آید.

[Argon](#) 1.355 0.03201

اعداد واقعی به ترتیب برای a و b :

مقدار خطای نسبی برای هر مورد چیزی بیش از 100٪ می‌باشد.

7. مشاهده تغییر فاز سیستم با استفاده از تغییر دما. در زیر مشاهده می‌کنیم که حدود دمای 80 درجه جامد، بین 80 تا 90 درجه مایع و از 90 به بالا گازی می‌باشد. نمودار تغییرات انرژی نسبت به دما لازم بود تا این تغییر فاز را پیدا کنیم چرا که با مشاهده تغییرات انرژی نسبت به دما، می‌توان تغییرات CV را مشاهده (شیب نمودار) و از این طریق، تغییر حالت را دید.

