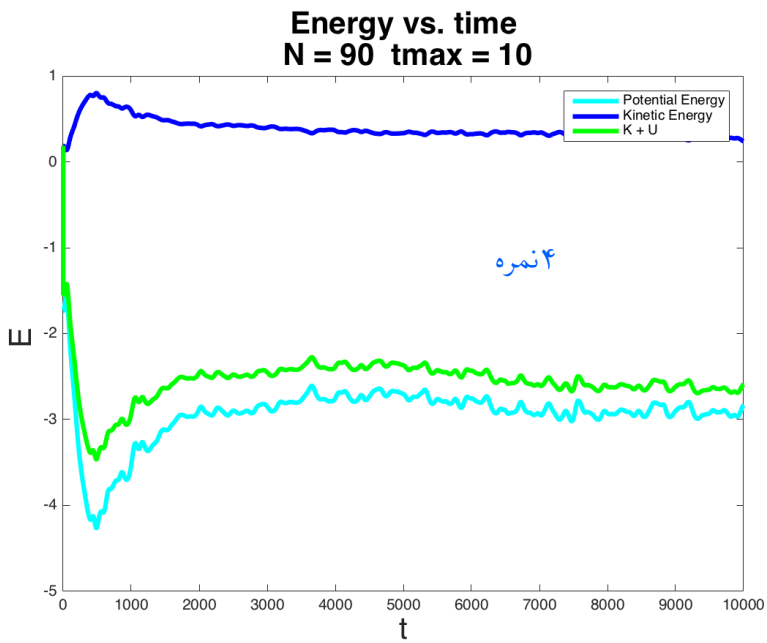
الف . بقای انرژی سیستم :

هر سیستم ایزوله بدون نیروی خارجی باید پایستگی انرژی داشته باشد. در این شبیه‌سازی نیز از لحظه‌ی اول پس از مشخص کردن سرعت‌ها و صفر کردن سرعت مرکز جرم نیروی خارجی‌ای به سیستم وارد نخواهد شد. اما از طرفی برای محاسبه‌ی دینامیک ذرات از تقریب ورلت سرعتی استفاده می‌شود. درست است که این تقریب و تقریب بیمن دقت‌های به نسبت بالایی دارند اما دقت هیچگاه بینهایت نمی‌شود و همینطور خطاهایی هم مربوط به محاسبات کامپیوتری (از جمله گرد کردن و..) است. پس انتظار می‌رود پایستگی مطلق انرژی وجود نداشته باشد. در شکل زیر تغییرات مقادیر انرژی جنبشی، پتانسیل و انرژی کل دیده می‌شوند :

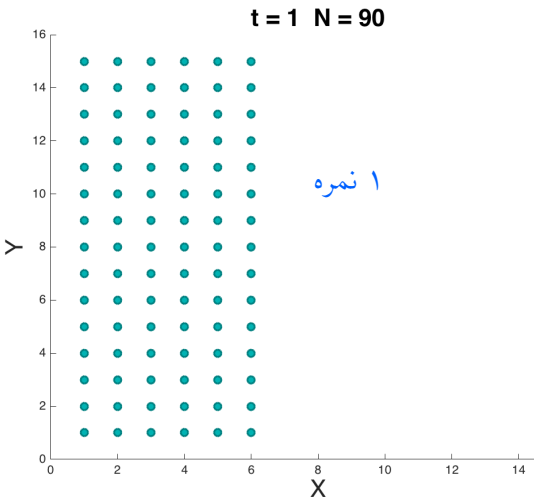


این انرژی بر واحد ذره است. و پس از خروج از آرایش اولیه انرژی نوساناتی دارد که عامل آن افزایش سرعت ذرات بخاطر نیروی ناشی از آرایش است. پس از مدتی سیستم به تعادل می‌رسد و انرژی اش پایدار می‌شود. منحنی دما و فشار این تحول گازی را در قسمت (پ) خواهیم دید.

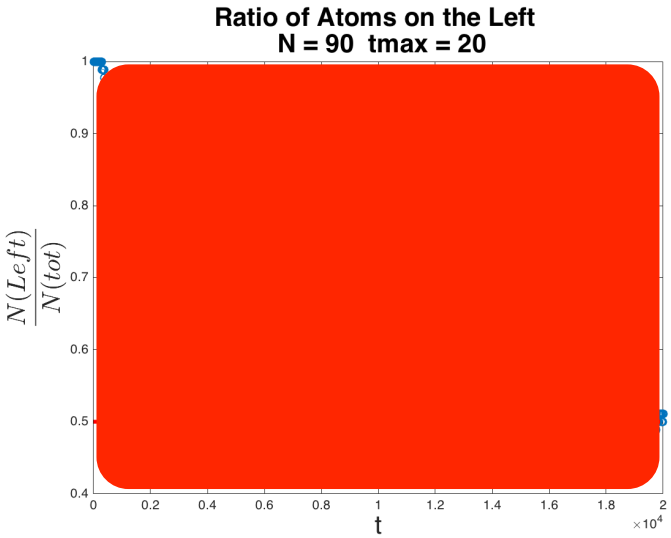
ب . نسبت تعداد ذرات در نیمه‌ی چپ جعبه :

همانطور که گفته شد در زمان صفر تمام ذرات در سمت چپ جعبه‌ی دوبعدی چیده شده‌اند (شکل زیر) اما با افزایش زمان و تحول زمانی انتظار می‌رود که ذرات حرکت کرده و به سمت راست جعبه نیز بروند. اگر پس از مدتی به سیستم نگاه کنیم خواهیم دید که به صورت تقریبن یکنواخت در کل جعبه پخش شده‌اند و اولویتی برای حضور در نیمه‌ی راست و یا چپ وجود ندارد پس انتظار می‌رود منحنی نسبت تعداد ذرات موجود در نیمه‌ی چپ به کل ذرات از مقدار ۱ شروع شده و مقدار خود را کم کند تا به ۱/۲ برسد. از آن پس این مقدار باید حوالی ۱/۲ باقی بماند و احتمالن نوسان داشته باشد.

در شکل زیر این نسبت در طول زمان رسم شده است و خط قرمز مقدار ۱/۲ را نشان می‌دهد :



۱ نمره



۲ نمره

همانطور که انتظار می‌رفت این مقدار هول ۱/۲ نوسان دارد.

پ . رفتار دما و فشار گاز بر حسب زمان :

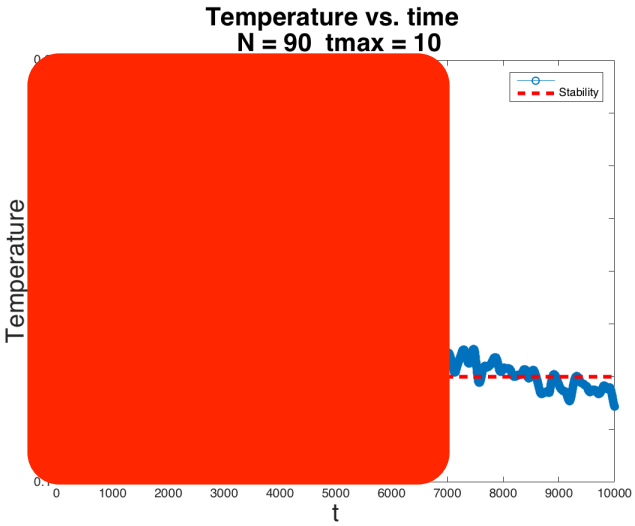
گاز شبیه‌سازی شده در اینجا گاز کامل و با پیوندهای واندوالسی در نظر گرفته شده‌است. این به این معناست که از برآیند انرژی جنبشی گاز می‌توان دمای آن را محاسبه کرد :

$$\frac{d(N-1)}{2}k_B T = \frac{1}{2}m\langle v^2\rangle$$

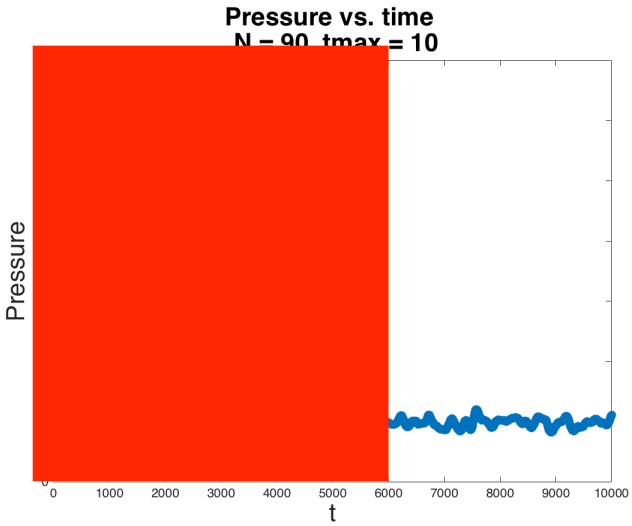
دلیل کم شدن یک درجه‌ی آزادی از تعداد ذرات آن است که قید ثابت بودن مرکز جرم وجود دارد و در این شبیه‌سازی ۲ بعدی مقدار d برابر تعداد درجات آزادی ذرات در سیستم و برابر ۲ خواهد بود.
حال برای محاسبه‌ي فشار از رابطه‌ي ویریال داریم :

[redacted] ۱ نمره

فشار بر حسب زمان نیز هنگام محاسبه‌ي نیرو محاسبه می‌شود. در شکل زیر تغییرات دما و نیرو بر حسب زمان نشان داده شده‌اند. با به دست آوردن شیب نمودار دما در طول زمان با ثابت شدن این شیب زمان به تعادل رسیدن سیستم مشخص می‌شود که اولین قطع خط قرمز با نمودار است. همانطور که مشاهده می‌شود در همین زمان فشار سیستم نیز شروع به نزدیک شدن به تعادل می‌کند.



۲ نمره

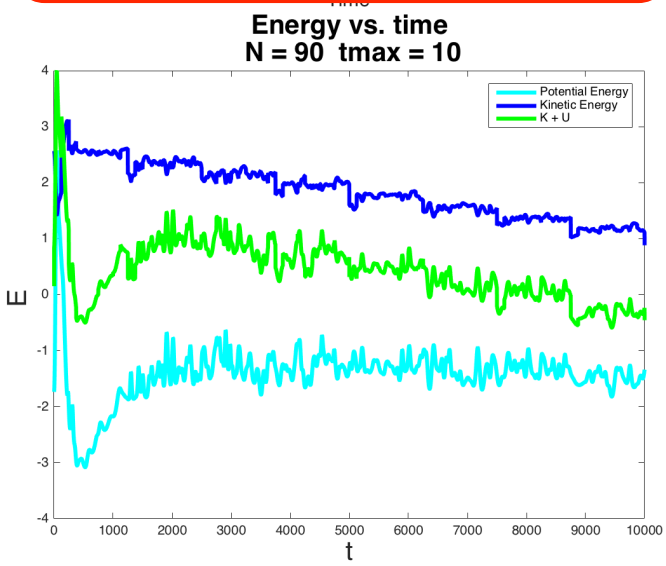


۲ نمره

در شکل بالا ترموستات استفاده نشده‌است. برای به تعادل رساندن سیستم در هر دما و کاهش دما از دمای حدود [redacted] تا [redacted] کلوین ([redacted] تا [redacted] واحد کاهیده‌ی دما) در طول تحول زمانی در مقاطعی از ترموستات استفاده می‌کنیم و دمای سیستم را به دمای مورد نظر خود می‌رسانیم. نقاطی که در نمودار دما دارای ارور بار بزرگ [redacted] چیزی شبیه به یک ناپیوستگی تولید کرده است. ۱ نمره

[redacted]

همانطور که از شکل صفحه‌ی قبل مشخص است با ماکسیمم دمای کاهدیه‌ی تعادل سیستم در دماهای پایین و زیر خواهد بود. به همین دلیل وقتی دما را در ابتدای نمودار بالا برده‌ایم سیستم می‌خواهد سریعتر به دمای پایین باز گردد و به همین دلیل در فاصله‌ی زمانی بسیار کم افت زیادی خواهد داشت به همین دلیل خطای رسم شده برای نقطه‌ی اول نمودار بسیار بزرگ است. اما با به تعادل رسیدن در دمای بالا این مشکل برطرف شده‌است. اما در مورد نمودار فشار نوسانات دامنه‌ی زیادی ندارند و رفتار سیستم تقریبن یکنواخت به نظر می‌رسد. و از آنجایی که محاسبه‌ی فشار برای همچین سیستمی در شبیه‌سازی کار سختی بوده و دقت زیادی ندارد انتظار بیشتری نمی‌رود.



در شکل روبرو منحنی اصلی انرژی که متوسطگیری‌های بالا از روی آن انجام شده‌است را مشاهده می‌کنیم. از روی این نمودار می‌توان متوجه شد

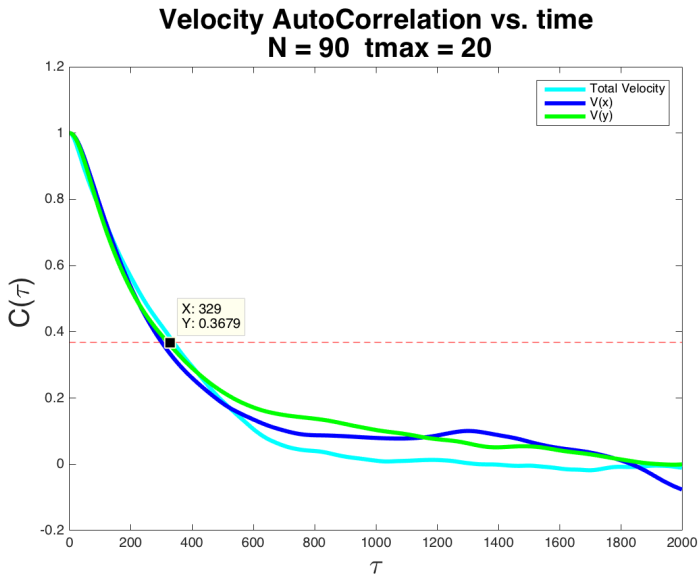
ت . تابع خود- همبستگی سرعت‌ها :

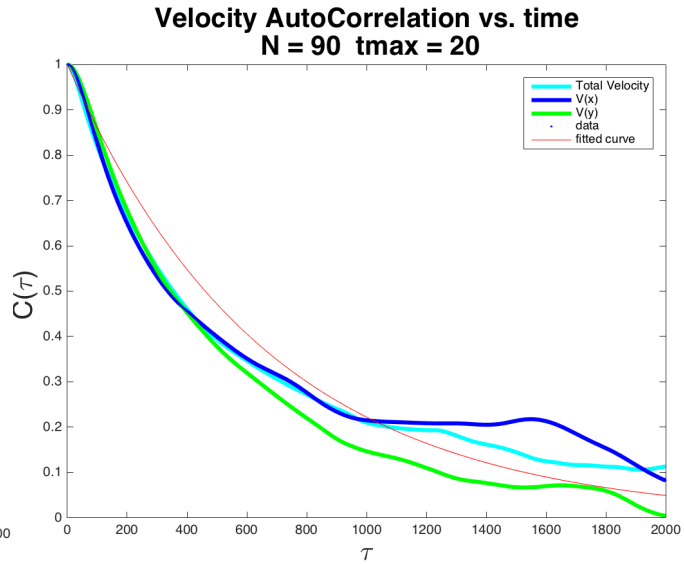
این تابع برای محاسبه‌ی دقیق‌تر اینکه سیستم کی به تعادل می‌رسد محاسبه می‌شود. طریقه‌ی محاسبه‌ی آن هم به شکل زیر است :

$$C(\tau) = \frac{\langle\langle v_\alpha(t) v_\alpha(t+\tau)\rangle_i\rangle_t - \langle\langle v_\alpha(t)\rangle_i . \langle v_\alpha(t+\tau)\rangle_i\rangle_t}{\sigma_{t+\tau}\sigma_t}$$

که اندیس i میانگین‌گیری روی تعدادی از ذرات سیستم و t میانگین‌گیری در طول زمان را نشان می‌دهد. اندیس α مولفه‌ی سرعت را مشخص می‌کند که در اینجا برای x و y و یک بار برای سرعت کلی محاسبه می‌شود.
با استفاده از برازش تابع نمایی بر توابع خود همبستگی مقدار زمان واهلش و یا τ محاسبه شده‌است :

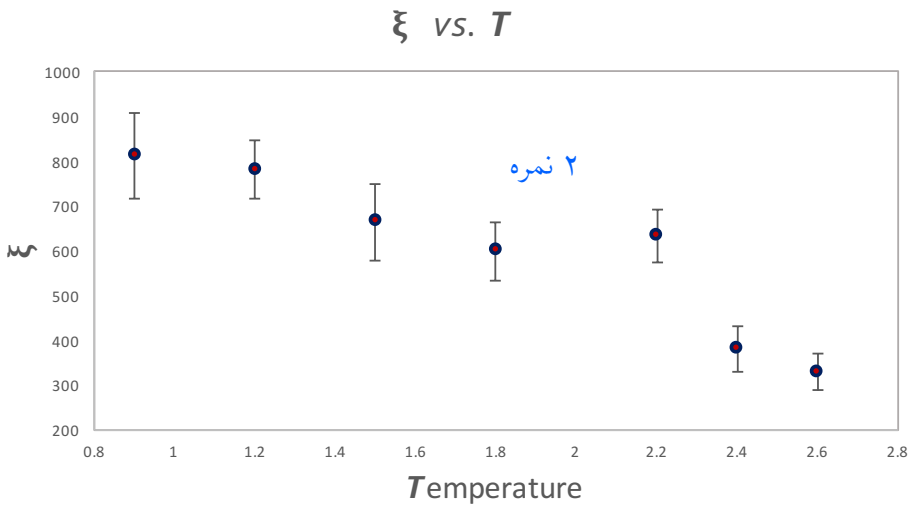
دو نمودار زیر به ترتیب از راست به چپ برای دماهای [redacted] به تفکیک مولفه‌ی سرعت‌ها رسم شده‌اند. همانطور که مشخص است وقتی سیستم به حالت گازی نزدیک می‌شود منحنی خود-همبستگی رفتار مشابه‌تری به تابع نمایی پیدا می‌کند و زمان واهلش اندازه‌گیری شده‌ی سیستم از مولفه‌ی سرعت مستقل می‌شود. از نمودارها و توابع برازش شده به نظر می‌رسد که زمان واهلش برای دمای [redacted] واحد زمانی و برای دمای [redacted] واحد کاهیده‌ی زمانی است.





نمره ۲

زمان واهلش برای سیستم‌ها با دماهای متفاوت در شکل زیر نشان داده‌شده اند.



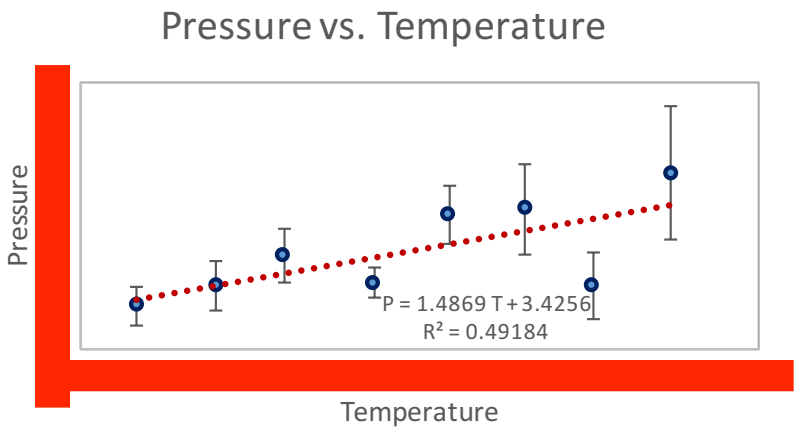
شکل بالا منحنی خود-همبستگی را در دماهای متفاوت سیستم نشان می‌دهد.

ث . ارزیابی گاز واندوالس :

برای بررسی این که گاز شبیه‌سازی شده از نیروی واندوالس تبعیت می‌کند و یا نه، از آنجایی که سیستم شبیه‌سازی ***NVT*** است با تغییر دادن دما و اندازه‌گیری فشار مورد بررسی قرار خواهد گرفت :

$$\left(\mathrm{P} + \frac{b}{V^2}\right)(V - a) = RT$$

و از آن جایی که a، b، R و V (حجم اشغالی هر اتم)، ثابت هستند فشار تعادلی سیستم در دماهای تعادلی متفاوت باید رابطه‌ای خطی داشته باشد. نتیجه‌ی تحقیق این مسئله در شکل زیر آورده شده‌است :



۴ نمره

واحد [redacted] است که با این واحد مساحت هر اتم آرگون برابر با [redacted] برابر [redacted] ر واحد کاهیده خواهد بود. این مقدار همان مقدار پارامتر a و حجم (در سیستم دو بعدی، سطح) اشغالی یک ذره‌است. پارامتر b نیز مقیاسی از اندازه‌ی جاذبه‌ي بین ذرات است.

ج . مشاهده‌ی فازهای مختلف از گاز واندروالس : ۴ نمره

خروجی دینامیک این مسئله با فایل ترجکتوری *xyz*. و توسط *vmd* تولید شده است. با کاهش دما می‌توان مشاهده کرد که گاز به صورت دسته‌ای تقسیم بندی و به تحول خود ادامه می‌دهد. با نام [redacted] gas to soli [redacted] دو فایل ترجکتوری مربوط به دماهای [redacted] نیز پیوست شده اند.

پ.ن : کد شبیه‌سازی به زبان متلب نوشته شده‌است و فایل همه‌ی توابع در یک پوشه پیوست گردیده‌است.