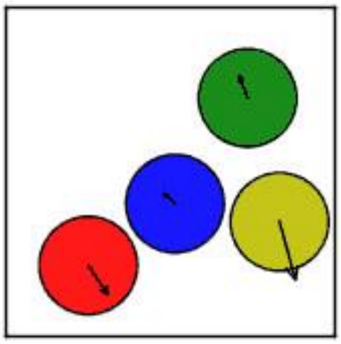
תרגיל נומרי 3 – ״דינמיקה מולקולרית״ : גז אידאלי דו-מימדי של ארבעה חלקיקים

1. רקע

דינמיקה מולקולארית (molecular dynamics) היא תחום מחקרי שבו מנסים לנתח את התכונות המאקרוסקופיות של חומרים באמצעות חישובים מיקרוסקופיים : עוקבים בסימולציות אחרי חלקיקים בודדים (מולקולות או אטומים), כאשר האינטראקציות מתוארות בצורה ריאליסטית ככל האפשר מבחינה פיסיקלית. מספר החלקיקים שניתן לעקוב אחריהם מוגבל על-ידי כח החישוב, וכמובן איננו יכול להתקרב למספר אבוגדרו, אך כיום ניתן כבר להגיע לחישובים של מערכות גדולות למדי (למשל, כ-10^8 חלקיקים).

2. המערכת לחישוב



כאן נדון במערכת מאוד פשוטה : ״גז״ של ארבע דיסקאות קשיחות הנעות בתוך קופסה דו-מימדית. במונח ״גז״ הכוונה שהאינטראקציה בין החלקיקים לבין הדפנות ובין החלקיקים לבין עצמם היא בהתנגשויות אלסטיות בלבד, ללא כוחות ארוכי טווח וללא פוטנציאליים חיצוניים.

רוצים להעמיק? ראו למשל כאן :
http://www.lps.ens.fr/~krauth/index.php/Hard_disks:_A_Window_into_the_World_of_Stat_Physics

3. הדרכה לחישוב

המערכת הפיסיקלית היא דו-מימדית במישור x-y וכוללת ארבע דיסקאות, i=1,2,3,4. מטרתנו לעקוב כפונקציה של הזמן t אחרי המיקום והמהירות של כל דיסקה $\{x_i(t),y_i(t)\}$, ו-$\{v_{ix}(t),v_{iy}(t)\}$, בהתאמה.

אתחול החישוב:

- הקופסה היא ריבוע עם דפנות באורך L=1 (הפינה השמאלית התחתונה היא במיקום $\{x=0,y=0\}$, השמאלית העליונה היא ב- $\{x=0,y=1\}$, וכן הלאה).
- החלקיקים הם דיסקאות בעלות רדיוס r (שניתן לקביעה בתחילת הסימולציה).
- בתחילת החישוב (t=0) ארבעת החלקיקים ממוקמים כך שמרכזיהם במקומות $\{x_1=0.25,y_1=0.25\}$, $\{x_2=0.25,y_2=0.75\}$, $\{x_3=0.75,y_3=0.25\}$, ו- $\{x_4=0.75,y_4=0.75\}$.
- בתחילת החישוב נותנים לארבע הדיסקאות מהירויות התחלתיות – לכל חלקיק שני רכיבים v_{ix},v_{iy} (ראו הנחיות פרטניות בנספח).

התפתחות בזמן

- **נותנים למערכת להתפתח בזמן בהתאם להתנגשויות אלסטיות עם הקירות ובין חלקיקים לבין עצמם.**
  השיטה הנוחה לעשות זאת היא לבדוק בכל זמן t כדלקמן :
  (1) לכל חלקיק את משך הזמן עד להתנגשות הבאה עם קיר (ארבעה ערכים של *dtwall*),
  (2) ולכל זוג את משך הזמן הצפוי עד להתנגשות ביניהם, אם בכלל אפשרית (שישה ערכים של *dtcoll*, לששה הזוגות האפשריים).

  הדרכה מפורטת כיצד מוצאים את הזמנים הללו מובאת בנספח.

- מוצאים את הזמן המינימאלי מבין כל ה-*dtwall* וה-*dtcoll*. זהו צעד הזמן dt שבעזרתו מקדמים את מיקום ארבעת החלקיקים i=1,2,3,4 לפי הקשרים (הטריוויאלים) $x_i(t+dt)=x_i(t)+v_{ix}dt$, $y_i(t+dt)=y_i(t)+v_{iy}dt$.
- מקדמים את הזמן ל-$t+dt$ ואז מעדכנים את המהירות של החלקיק או החלקיקים המעורב(ים) בהתנגשות הבאה. ראו הדרכה מפורטת בנספח.

4. <u>הדרכה לתיעוד המערכת</u>

א. <u>מערכים לרישום התוצאות</u>

מטרתנו למצוא את ההתפלגות ההסתברויות של חלקיק להימצא במקום $\{x,y\}$, ובמהירות $\{\mathrm{v}_x,\mathrm{v}_y\}$, וגם במהירות סקאלרית $\mathrm{v}_{abs}=\left(\mathrm{v}_x^2+\mathrm{v}_y^2\right)^{1/2}$. כרגיל, הדרך לעשות זאת היא לחלק את האזור הרלוונטי לתאים דיסקרטיים, ומומלץ לעשות זאת כדלקמן.

מקום: חלקו את הקטעים $x=[0,1]$ $y=[0,1]$ ל-10 קטעים כל אחד, כך ששטח הקופסה מכיל 100 תאים דיסקרטיים של תחומי $\{x,y\}$.

מהירות: נשים לב שהמהירות המקסימאלית שיכול לקבל חלקיק בכיוון אחד שווה ל $\sqrt{\mathrm{v}_{tot}^2}$, כאשר

$$\mathrm{v}_{tot}^2=\sum_{i=1}^{4}\left(\mathrm{v}_{ix}^2+\mathrm{v}_{iy}^2\right)$$

קבוע, כמובן, לכל אורך סימולציה. כלומר, רכיב המהירות של חלקיק בכל אחד מהצירים יהיה תמיד בין הערכים $\sqrt{\mathrm{v}_{tot}^2}$ - לבין $\sqrt{\mathrm{v}_{tot}^2}$+, והערך של המהירות הסקאלארית יהיה תמיד בין 0 ל- $\sqrt{\mathrm{v}_{tot}^2}$.

חלקו את התחום $\left\{-\sqrt{\mathrm{v}_{tot}^2},+\sqrt{\mathrm{v}_{tot}^2}\right\}$ ל-200 קטעים שווים לצורך תיעוד רכיבי המהירות, ובמערך נפרד את התחום $\left\{0,+\sqrt{\mathrm{v}_{tot}^2}\right\}$ ל-100 קטעים לצורך תיעוד המהירות הסקאלארית.

ב. <u>צעדי זמן לרישום התוצאות</u>

הואיל ואנו מעוניינים למצוא את ההסתברות למצוא את החלקיק במקומות שונים ובמהירויות שונות, הפתרון הוא לתעד את הערכים הרלוונטיים עבור כל החלקיקים בצעדי זמן קבועים, $t_1,t_2,t_3\ldots t_K$ כאשר $t_{k+1}=t_k+$dtstore, ו-dtstore הוא פרמטר של הסימולציה. אם מספר הרישומים K מספיק גדול, הרי הסטאטיסטיקה של ״כמה פעמים מתוך K״ החלקיק נרשם בתא $\{x,y\}$ מסויים, בתא $\{\mathrm{v}_x\}$ מסויים, בתא $\{\mathrm{v}_y\}$ מסויים ובתא $\{\mathrm{v}_{abs}\}$ מסויים נותנת את צפיפות ההסתברות לקבל מקום ומהירות בערכים של התא.

חשוב: למעשה, כדי לקבל סימולציה הדוגמת היטב את כל האפשרויות שחלקיק עובר במערכת, התבחין המשמעותי הוא מספר ההתנגשויות שהתרחשו במערכת, שכן ההתנגשויות הן אלו שמשנות את מצב המערכת. לכן, יש להריץ את הסימולציה לפי קריטריון של מספר התנגשויות, ולא לפי זמן סופי שרירותי. כלומר – הריצו את הסימולציה עד לביצוע N התנגשויות, ובהתאם ל-dtstore שנבחר, מספר הרישומים K יתקבל כתוצאה ולא כאילוץ.

5. <u>חישובים</u>

א. <u>חישוב הייחוס</u>

נגדיר לצורך חישוב הייחוס שלנו את הפרמטרים הבאים

- רדיוס הדיסקאות $r=0.15$
- המהירויות ההתחלתיות מפורטות בטבלה 1 שבנספח. יש להדגיש שהערכים נבחרו כך ש- $\mathrm{v}_{tot}^2=2$.
- הריצו עם dtstore=1.0 ועד שהמערכת תשלים $N=10^7$ התנגשויות.

ב. <u>חישובי השוואה</u>

לצורך בדיקת הרגישות של ההתפלגויות של מיקום החלקיקים, חזרו על חישוב הייחוס עם ערכים שונים של הרדיוס r: בדקו את הערכים שבין $r=0.1$ ל-$r=0.23$ עם הפרשים של $\Delta r=0.01$.

6. **<u>הצגת התוצאות</u>**

א. **<u>עבור חישוב הייחוס:</u>**

(1) בחרו את אחד החלקיקים **והציגו מפת צבעים של הסיכויים שלו להיות בצירופים שונים של $\{x,y\}$** (כמובן, ברזולוציה שבה חילקתם את הקופסה לתאים, כאמור בסעיף 4.א). הבהרה: מיקום החלקיק נקבע לפי המרכז שלו.
האם ההתפלגות אחידה לגמרי בשטח הקופסה? נסו להסביר את התוצאה.

(2) **הציגו בשלושה גרפים את צפיפות ההסתברות של v_x, v_y, ו-v_{abs} של החלקיקים** (בכל גרף ארבעה קווים). הדרכה: קיבלתם את ההסתברות של החלקיק להיות בתחום של ערכים לפי כל תא ברישום – בחרו ערך באמצע התא, z, והציגו גרף הסתברות $p(z)$.
האם ההתפלגויות של ארבעת החלקיקים דומות? מדוע?
האם ההתפלגויות ב-v_x וב-v_y דומות? באיזה ערך הן מקבלות מקסימום? מה סטיית התקן בהתפלגות?
האם ההתפלגויות של v_{abs} ו-v_x דומות? מדוע?

ב. **<u>עבור חישובי ההשוואה</u>**

(1) בדיקת רגישויות של המיקום: הציגו בגרף את הסיכוי של חלקיק מספר 2 להיות ברביע הראשון (גם x וגם y בתחום $[0,0.5]$) כפונקציה של r. הסבירו את התוצאה שקיבלתם.
(2) בדיקת רגישויות של המהירויות: בחרו את אחד החלקיקים, והשוו את ההתפלגות $p(\mathrm{v}_x)$ בריצות שבהן r שונה. האם ההתפלגויות דומות? מדוע?

particle number	v_x	v_y
1	0.21	0.12
2	0.71	0.18
3	-0.23	-0.79
4	0.78	0.34583

טבלה 1: המהירויות ההתחלתית של החלקיקים

הערה - אם תרצו (אין צורך להגיש), בדקו אם המערכת כאותית: שנו שניים או יותר מערכי המהירויות ההתחלתיות בכ-1%, אך שמרו על $\mathrm{v}_{tot}^2 = 2$, והריצו מחדש. עקבו אחרי אחד מרכיבי המהירות של אחד החלקיקים, ובדקו את הצורה הזמנית. אם המערכת כאותית, שינוי קטן בתנאי ההתחלה ישנה מאוד את הערך $\mathrm{v}(t)$ בזמנים מאוחרים.

נספח – הדרכה פיסיקלית לכתיבת הסימולציה

כדי להקל עליכם, מוצגות כאן הדרכה כיצד למצוא את הזמנים עד להתנגשויות של החלקיקים, וכן הדרכה כיצד לחשב את המהירויות החדשות לאחר התנגשות.

מציאת הזמן עד להתנגשות בקיר

לכל חלקיק בודקים לכל רכיב של התנועה (x ו-y) אם המהירות חיובית או שלילית, ואז מוצאים שני זמנים עד להתנגשות בשני הקירות. בפרט, בכיוון x הזמן להתנגשות בקיר מתקבל לפי שתי האפשרויות:

$$\mathrm{v}_x > 0 \rightarrow \;\; dtwall = \frac{1-r-x}{\mathrm{v}_x} \;\; ; \;\; \mathrm{v}_x < 0 \rightarrow \;\; dtwall = \frac{x-r}{|\mathrm{v}_x|}$$

וכך גם בכיוון y. הזמן הקצר מבין השניים (בכיוונים x ו-y) הוא החשוב.

מציאת הזמן עד להתנגשות בין זוגות

כדי למצוא את זמן ההתנגשות בין זוג של חלקיקים, צריך למצוא את משך הזמן שנדרש עד שהמרכזים של שני החלקיקים יהיו במרחק $2r$ זה מזה, בהנתן המיקומים והמהירויות ההתחלתיים. הפיתוח מייצר משוואה ריבועית עבור משך הזמן, אך צריך להיזהר – לפעמים אין פתרון, מצב שיתבטא בדטרמיננטה שלילית בפתרון של המשוואה. האלגוריתם למציאת משך הזמן עבור זוג החלקיקים i ו-j הוא:

- מצאו את $\Delta x=x_j-x_i,\ \Delta y=y_j-y_i,\ (\Delta\ell)^2=((\Delta x)^2+(\Delta y)^2)$
- מצאו את $\Delta \mathrm{v}_x=\mathrm{v}_{jx}-\mathrm{v}_{ix},\ \Delta \mathrm{v}=\mathrm{v}_{jy}-\mathrm{v}_{iy},\ (\Delta \mathrm{v})^2=((\Delta \mathrm{v}_x)^2+(\Delta \mathrm{v}_y)^2)$
- מצאו את המכפלה הסקאלארית $s\equiv\mathbf{\Delta v}\cdot\mathbf{\Delta\ell}= \Delta \mathrm{v}_x\cdot\mathbf{\Delta}x+ \Delta \mathrm{v}_y\cdot\mathbf{\Delta}y$
- מצאו את הדטרמיננטה $\Upsilon=s^2-(\Delta \mathrm{v})^2((\Delta\ell)^2-4r^2)$
- ואז:

  אם מתקיים הצירוף $\Upsilon>0$ וגם $s<0$ צפויה התנגשות תוך משך זמן $dtcoll=-(s+\Upsilon^{1/2})/(\Delta \mathrm{v})^2$.

  אם לא מתקיים הצירוף הנ״ל, לא צפויה התנגשות (טיפ: הציבו dtcoll גדול, כך שיפסיד בבדיקה מה היא ההתנגשות הקרובה).

מוצאים את dtcoll עבור כל אחד משישת הצירופים של זוגות החלקיקים. הזמן הקצר ביותר הוא החשוב, ואותו יש להשוות ל-dtwall הקצר ביותר.

שינוי מהירות בהתנגשות בקיר

בהתנגשות בקיר המהירות היא טריוויאלית: אם ההתנגשות היא בקיר $x=0$ או $x=1$ אז v_x הופך סימן, ואם ההתנגשות היא בקיר $y=0$ או $y=1$ אז v_y הופך סימן.

שינוי מהירות בהתנגשות בין זוג חלקיקים

בהתנגשות בין שני חלקיקים i ו-j המהירויות משתנות בהתאם לחוקי שימור האנרגיה והתנע, וכאן יש לקחת בחשבון את הזווית היחסית של ההתנגשות. האלגוריתם לחישוב המהירויות החדשות הוא:

- מצאו את $\Delta x=x_j-x_i,\ \Delta y=y_j-y_i,\ (\Delta\ell)^2=((\Delta x)^2+(\Delta y)^2)$
- מצאו את $\Delta \mathrm{v}_x=\mathrm{v}_{jx}-\mathrm{v}_{ix},\ \Delta \mathrm{v}=\mathrm{v}_{jy}-\mathrm{v}_{iy},\ (\Delta \mathrm{v})^2=((\Delta \mathrm{v}_x)^2+(\Delta \mathrm{v}_y)^2)$
- הגדירו $e_x= \Delta x/\Delta\ell$ ו-$e_y= \Delta y/\Delta\ell$ (השיפוע של הוקטור $\mathbf{\Delta\ell}$).
- הגדירו את המכפלה הסקאלארית $s_v=\Delta \mathrm{v}_x\cdot e_x+\Delta \mathrm{v}_y\cdot e_y$.
- מתקבלים שינויי המהירויות:

$$\mathrm{v}_{ix} \rightarrow \mathrm{v}_{ix}+e_x\cdot s_v \;\; ; \;\; \mathrm{v}_{iy} \rightarrow \mathrm{v}_{iy}+e_y\cdot s_v$$

$$\mathrm{v}_{jx} \rightarrow \mathrm{v}_{jx}-e_x\cdot s_v \;\; ; \;\; \mathrm{v}_{jy} \rightarrow \mathrm{v}_{jy}-e_y\cdot s_v$$