گزارش کار دینامیک مولکولی
مشکات صدری
97100919

الگوریتم:
توابعی که تعریف کرده ام:
تابع محاسبه ی پتانسیل کل، تابع محاسبه ی فشار در سمت چپ ظرف، محاسبه ی دما از روی میانگین سرعت ها، شمردن ذرات سمت چپ، تابع نیروی بین دو ذره و تابع نیروی کل وارده بر یک ذره، همبستگی

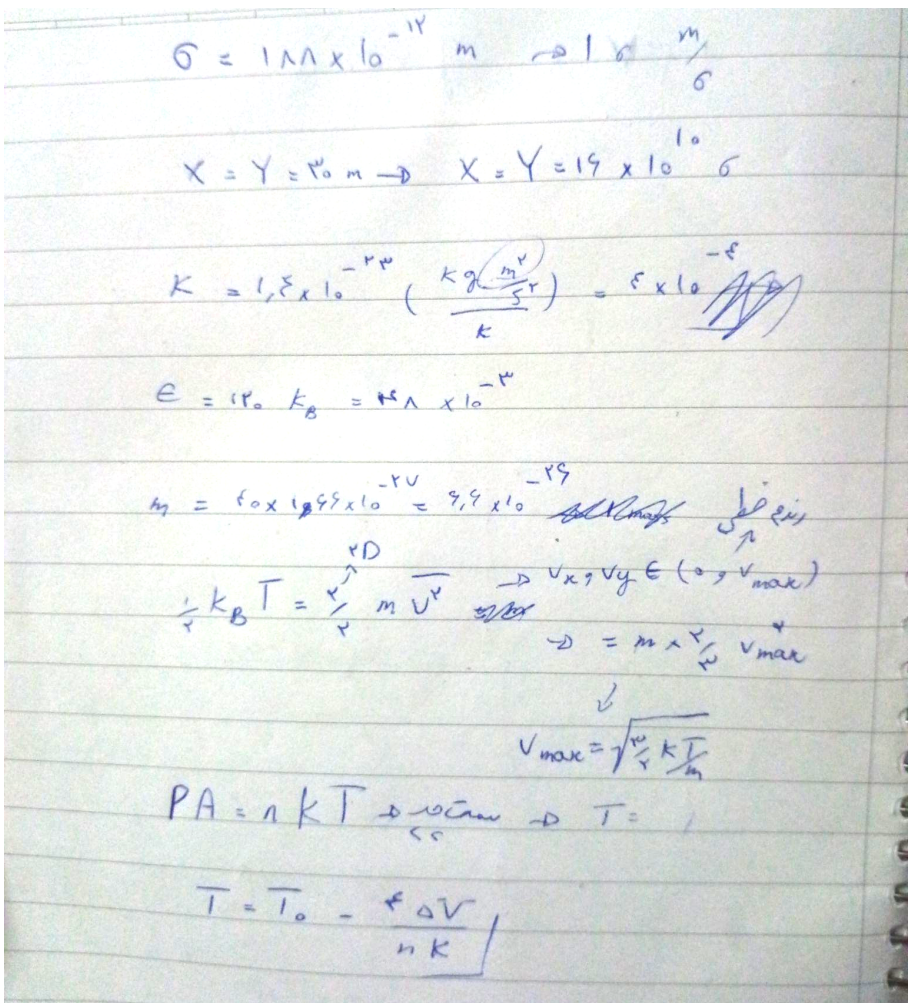
همانطور که میدانیم الگوریتم ورله سرعتی به فرم زیر است:

$$x_{n+1} = x_n + v_n h + \frac{1}{2} a_n h^2$$

$$v_{n+1} = v_n + \frac{1}{2}(a_{n+1} + a_n) h$$

و همین را نیز در حلقه ای که بدنه ی اصلی کد را تشکیل میدهد هر بار اعمال میکنیم.

فرمولهای استفاده شده نیز به قرار زیر اند:

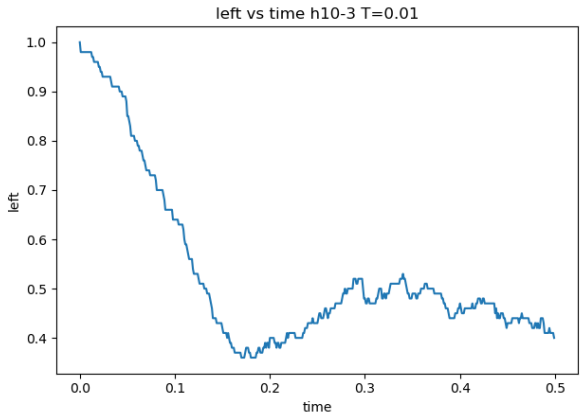


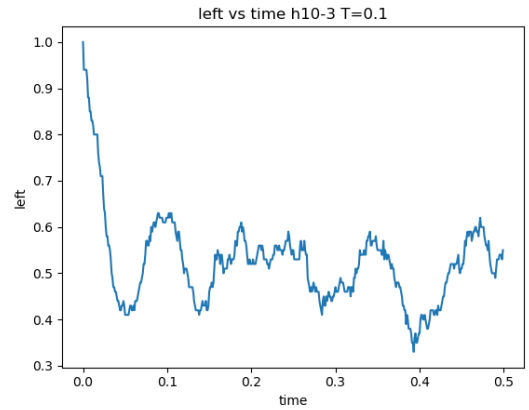
:0

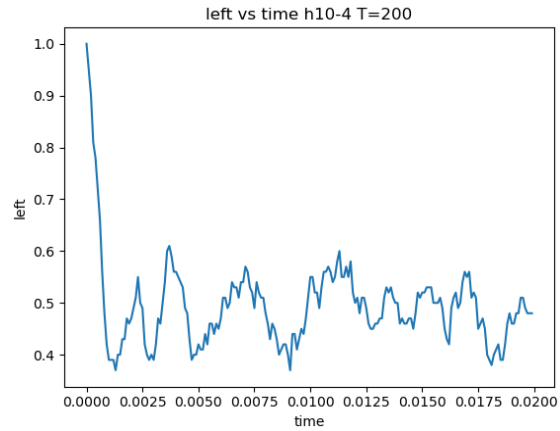
گیف md dynamics به پیوست است.

:1

نمودار به ازای چند دما:

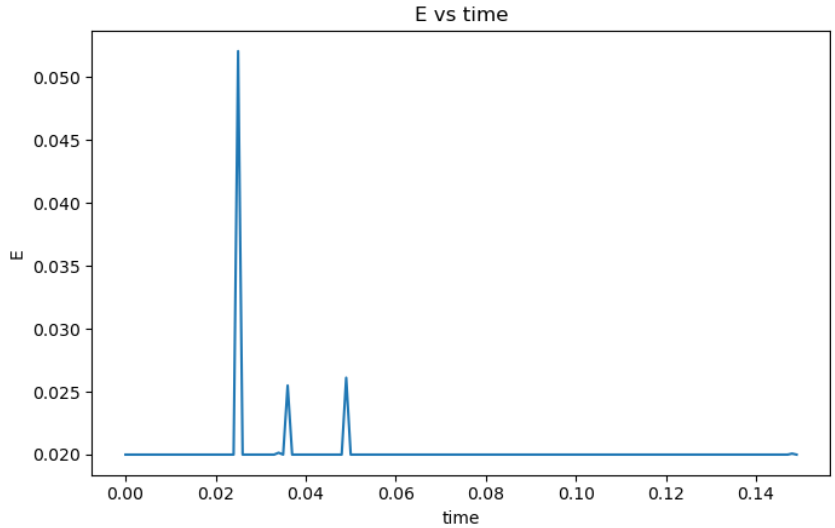






:2

همانطور که میدانیم انرژی کل می شود انرژی جنبشی منهای پتانسیل که نمودار زیر را به دست میدهد:T0=200,h=.0001

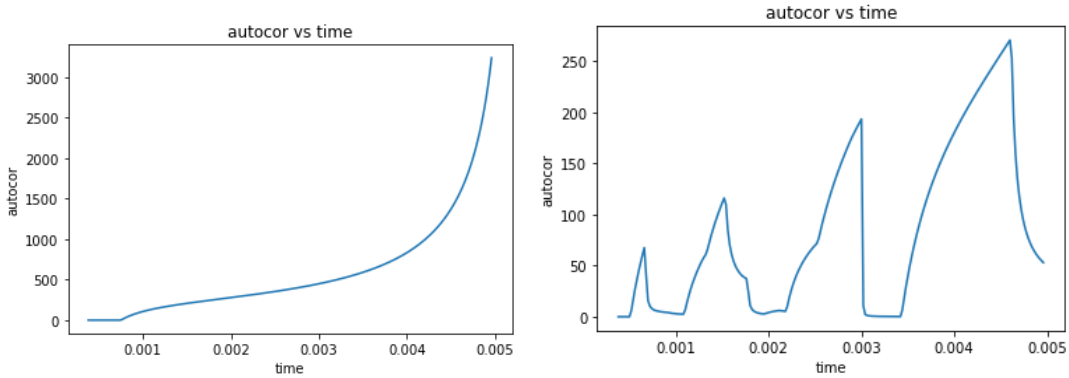


به نظر می آید که جهش های موجود احتمالا حاصل از لحظاتی اند که ذراتی خیلی به هم نزدیک شده باشند، در این صورت می دانیم که میانگین گیری بین شتاب ها میتواند کمی متفاوت از واقعیت باشد چون زمانی که هرکدام اثر میکنند یکی نیست.

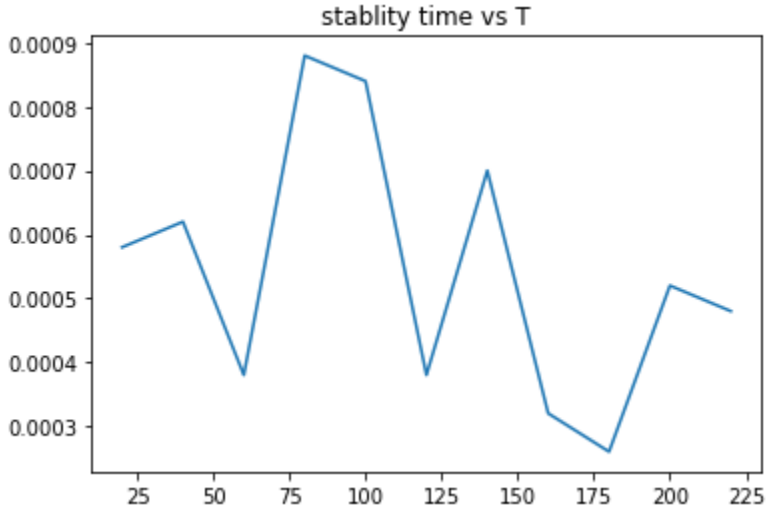
:3

خود همبستگی سیستم در ابتدا بسیار نزدیک به صفر بوده و از حالت تعادل شروع به زیاد شدن میکند، بسته به اینکه در چه دمایی چه فاصله ای را برای همبستگی در نظر گرفته باشیم ممکن است همبستگی همواره زیاده شده و یا قله های متعدد داشته باشد:

h=.001 delta=20 T= 20,100



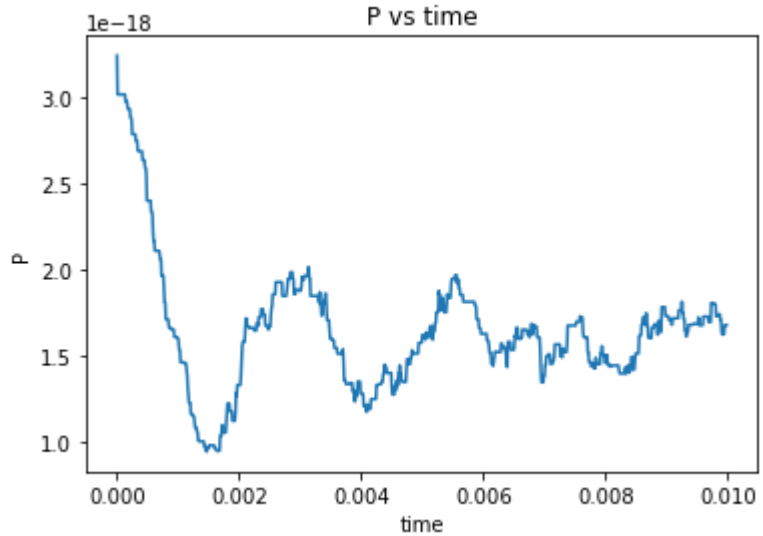
با تشخیص اینکه همبستگی از کجا شروع به افزایش میکند میتوانیم زمان تعادل را تخمین بزنیم که:



احساس میکنم جواب نباید این باشد ولی پس از بارها چک کردن و آنسامبل گذاشتن و ران کردن باز هم به نمودارهای مشابهی برخورد کردم، فکر میکنم ممکن است این نوسانات به خاطر این باشد که انگار موجی در حال پخش در یک لوله است (شروع موج نیز مربعی به حساب می آید، اگر با شرایط مرزی پریودیک نگاه کنیم) برای حالاتی که سرعت متوسط پخش بتواند موج ایستاده تشکیل دهد خواهیم دید که کمی بیشتر طول میکشد تا ذرات به تعادل برسند، در غیر این صورت به خاطر ایجاد بی نظمی به سرعت در هم دمپ میشوند. همچنین در فرم کلی هم دیده میشود که علاوه بر نوسان، زمان تعادل بر حسب دما در حال کاهش است.

:4

T=100 h=10^-5


P vs time
1e−18
3.0
2.5
2.0
1.5
1.0
P
0.000
0.002
0.004
0.006
0.008
0.010
time

:5