# شبیه‌سازی رایانه‌ای در فیزیک
## تمرین نهم: دینامیک مولکولی

سینا معمر ۹۵۱۰۲۳۱۶

۲۰ شهریور ۱۴۰۰

## ۱ مدل دینامیک مولکولی

کد این بخش از تمرین را در فایل md.py می توان مشاهده نمود. در این فایل دو کلاس SingleAtomMD و DataAnalysis وجود دارد که هر یک در ادامه توضیح داده خواهند شد.
برای ایجاد یک مدل دینامیک مولکولی برای ذرات تک اتمی، باید یک object از کلاس SingleAtomMD با طول جعبه، تعداد ذرات، بعد مسئله و اطلاعات اتمی مربوط به آن ذره دل‌خواه بسازیم. با توجه به خواسته‌ی تمرین، با استفاده از تابع place_atoms_left_side_regularly_ ذرات در لحظه‌ی اولیه به طور منظم در نیمه‌ی چپ جعبه قرار می‌گیرند. سپس با فراخوانی تابع periodic_boundaries_ شرایط مرزی تناوبی را اعمال می‌کنیم. با توجه به حداکثر سرعت داده شده، سرعت اولیه ذرات را با استفاده از تابع assign_initial_velocities_ تعیین می‌کنیم. به گونه‌ای که همگی سرعت یکسان ولی در جهات تصادفی خواهند داشت. برای به دست آوردن ماتریس فاصله‌ها نیز تابع update_positions_diff_ را باید فراخوانی کنیم. هم‌چنین با استفاده از تابع update_distance_matrices_ ماتریس اندازه‌ی فواصل ذرات در توان‌های $-2$، $-6$ و $-12$ را محاسبه می‌کنیم. در نهایت نیز شتاب ذرات را با تابع update_accelerators_ به دست می‌آوریم. اکنون مدل ما آماده اجرا شده و با استفاده از تابع initialize_files_ فایل‌های ذخیره‌سازی و اطلاعات مدل را آماده می‌کنیم.

## ۲ شبیه‌سازی ۱۰۰ ذره

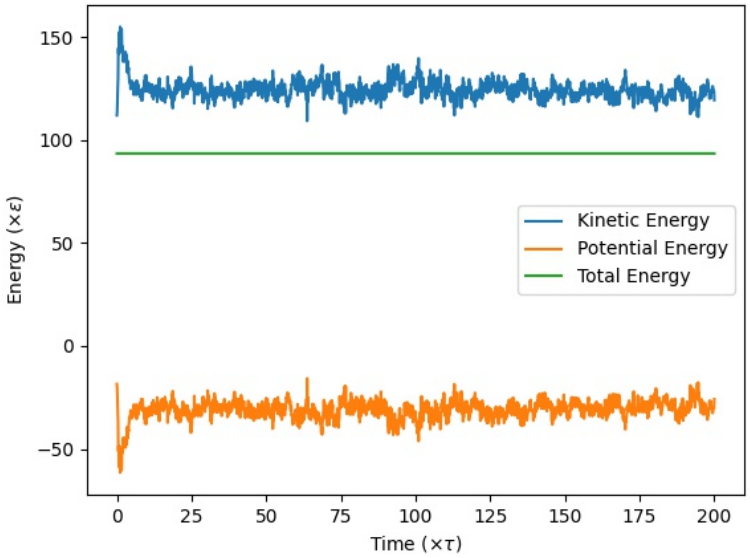
برای شبیه‌سازی با توجه به خواسته‌ی سوال، یک object از کلاس SingleAtomMD با 100 ذره آرگون در یک جعبه‌ی دو بعدی به طول 30 می‌سازیم. لازم به توجه است که تمام اعداد ذکر شده در متن، در واحدهای کاهیده هستند. سرعت اولیه‌ی ذرات را 1.5 و طول قدم‌های انتگرال‌گیری‌مان را $10^{-3}$ در نظر می‌گیریم. شبیه‌سازی را با استفاده از تابع render و برای 200 000 قدم یا معادلا به اندازه‌ی 200 واحد زمانی می‌گذاریم انجام بشود و در هر 100 قدم نیز از سیستم نمونه‌گیری می‌کنیم.

### ۱.۲ بقای انرژی سیستم

برای بررسی بقای انرژی سیستم نمودار انرژی‌های جنبشی، پتانسیل و انرژی کل را در یک نمودار رسم می کنیم. نمودار به دست آمده را در شکل ۱ می‌توان مشاهده نمود. همان‌طور که دیده می‌شود با وجود نوسانات انرژی جنبشی و پتانسیل در طول شبیه‌سازی، مقدار انرژی کل تغییری نکرده و ثابت باقی می ماند. این ثابت بودن به علت استفاده از الگوریتم ورله سرعتی در انتگرال‌گیری‌مان در شبیه‌سازی و استفاده از طول قدم مناسب است.

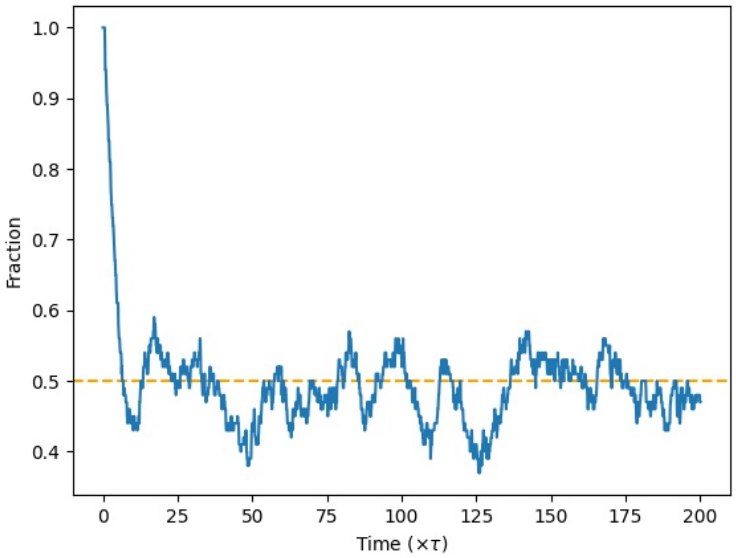
### ۲.۲ تعداد ذرات موجود در نیمه‌ی چپ

یکی از روش های نسبتا قابل قبول برای تعیین زمان رسیدن به تعادل شبیه‌سازی، استفاده از تعداد ذرات موجود در نیمه‌ی چپ جعبه است. می دانیم که در حالت تعادل این تعداد حول نصف ذرات باید نوسان کند. نمودار به دست




شکل ۱: تغییرات انرژی جنبشی، پتانسیل و انرژی کل بر حسب زمان شبیه‌سازی برای 100 ذره‌ی آرگون در جعبه‌ای به طول 30 و با سرعت اولیه‌ی 1.5

آمده را در شکل ۲ می توان مشاهده نمود. همان‌طور که دیده می‌شود این تعداد در حدود زمانی 10 به نصف مقدار می‌رسد و حول آن شروع به نوسان می‌کند.

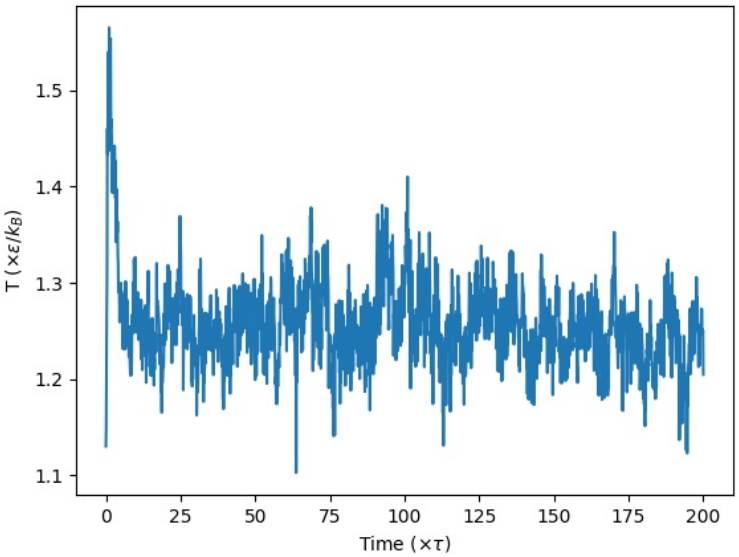



شکل ۲: تغییرات نسبت ذرات موجود در نیمه‌ی چپ جعبه بر حسب زمان شبیه‌سازی برای 100 ذره‌ی آرگون در جعبه‌ای به طول 30 و با سرعت اولیه‌ی 1.5

## ۳.۲ دمای گاز

رفتار دما کاملا مشابه با رفتار انرژی جنبشی است. تنها اسکیل آن‌ها متفاوت می‌باشد. نمودار به دست آمده را در شکل ۳ می توان مشاهده نمود. همان‌طور که دیده می‌شود دما در حدود زمان 10 به تعادل می رسد و حول آن نوسان می کند. از آن‌جایی که تعداد ذرات ما کم است، دامنه‌ی این نوسانات به نسبت زیاد می‌باشد. با میان‌گیری زمانی مقدار تعادلی آن برابر می‌شود با:

$$\langle T \rangle = 1.257 \pm 0.001 \ (\times \epsilon / k_B) = 150.5 \pm 0.1 K \tag{۱}$$




شکل ۳: تغییرات دما بر حسب زمان شبیه‌سازی برای 100 ذره‌ی آرگون در جعبه‌ای به طول 30 و با سرعت اولیه‌ی 1.5

## ۴.۲ فشار گاز

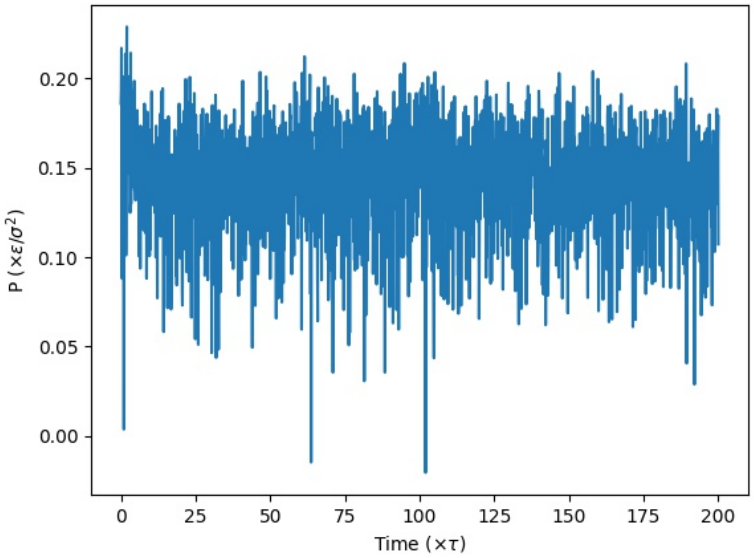
نمودار به دست آمده را در شکل ۴ می توان مشاهده نمود. همان‌طور که دیده می‌شود فشار در حدود زمان 10 به تعادل می رسد و حول آن نوسان می کند. از آن‌جایی که تعداد ذرات ما کم است، دامنه‌ی این نوسانات به نسبت زیاد می‌باشد. با میان‌گیری زمانی مقدار تعادلی آن برابر می‌شود با:

$$\langle P \rangle = 0.143 \pm 0.001 \ (\times \epsilon / \sigma^2) = (2.0431 \pm 0.0001) \times 10^{-3} N/m \tag{۲}$$

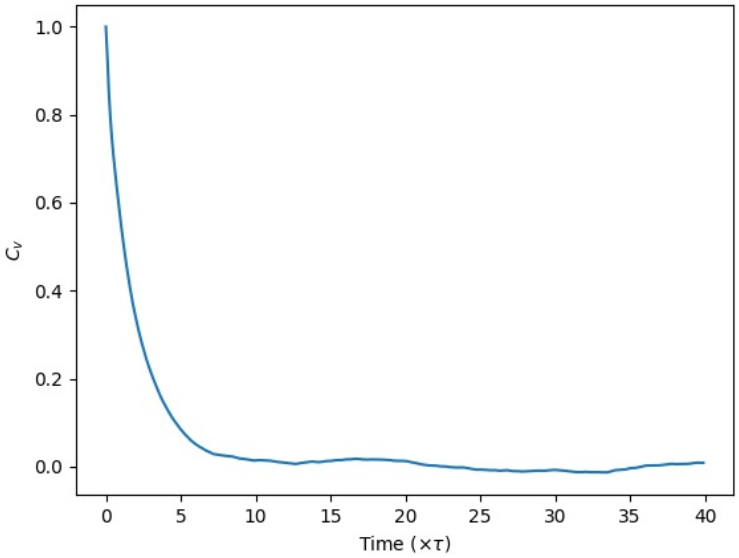
## ۵.۲ خودهم‌بستگی سرعت‌ها و زمان واهلش

زمان واهلش، زمان مشخصه‌ی تابع خودهم‌بستگی سرعت‌ها است. این زمان در واقع به ما نشان می دهد که چقدر زمان باید بگذرد تا سرعت‌های سیستم مقادیر اولیه خود را فراموش کنند. نمودار به دست آمده را در شکل ۵ می توان مشاهده نمود. با توجه به نمودار به دست آمده، زمان واهلش برابر خواهد بود با:

$$\tau = 1.9 (\times \tau) \tag{۳}$$




شکل ۴: تغییرات فشار بر حسب زمان شبیه‌سازی برای 100 ذره‌ی آرگون در جعبه‌ای به طول 30 و با سرعت اولیه‌ی 1.5



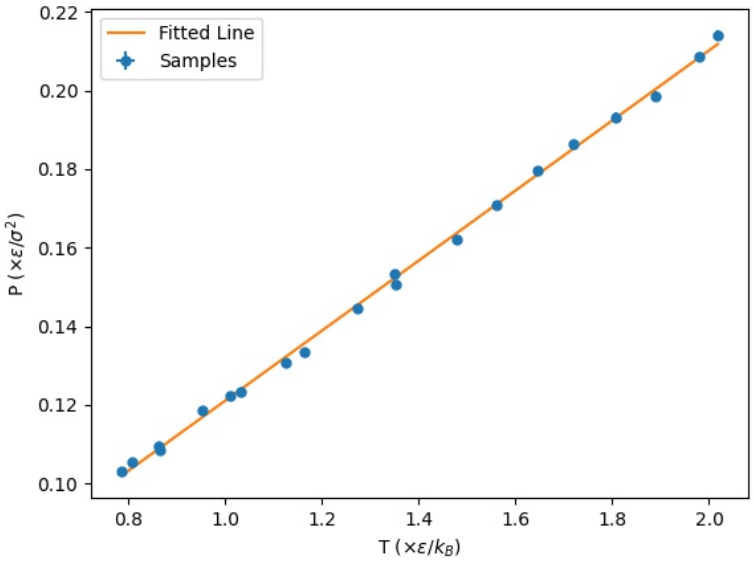

شکل ۵: تابع خودهم‌بستگی سرعت‌ها برای 100 ذره‌ی آرگون در جعبه‌ای به طول 30 و با سرعت اولیه‌ی 1.5

## ۶.۲ رابطه‌ی فشار با دما

برای مشاهده‌ی رابطه‌ی فشار با دما، مدل‌مان را برای اندازه‌ی سرعت اولیه‌های متفاوت اجرا می‌کنیم و مقادیر تعادلی دما و فشار را به دست می‌آوریم. برای مثال در این قسمت، مقادیر دما و فشار را برای اندازه‌ی سرعت‌های 1 تا 2 با قدم‌هایی به طول 0.05 به دست می‌آوریم. نمودار به دست آمده را در شکل ۶ می توان مشاهده نمود. همان‌طور که مشاهده می‌شود رابطه‌ای خطی میان فشار و دما وجود دارد. که این مطابق با انتظار ما از معادله‌ی گاز واندروالس است.

معادله‌ی خط فیت شده برابر است با:

$$P = 0.089T + 0.032 \tag{۴}$$



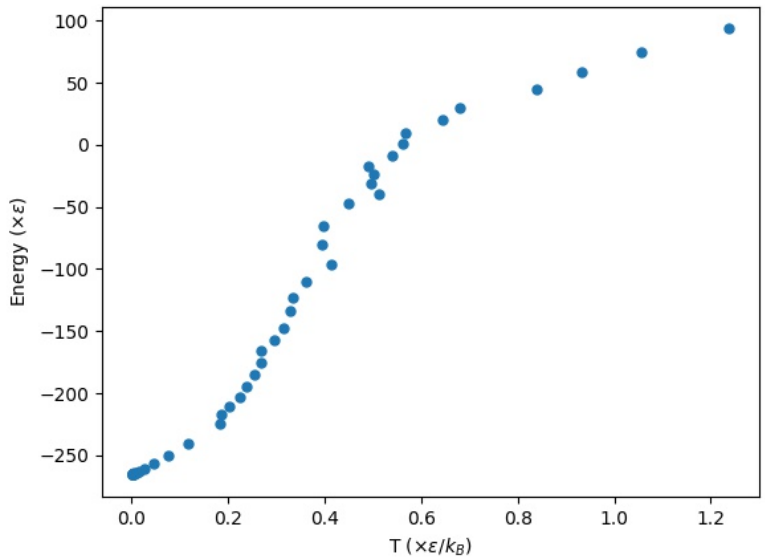

شکل ۶: تغییرات فشار بر حسب دما برای 100 ذره‌ی آرگون در جعبه‌ای به طول 30

### ۷.۲ تغییر فاز سیستم

برای مشاهده‌ی تغییر فاز سیستم باید نمودار انرژی بر حسب دما را برای مدل‌مان به دست بیاوریم. در دماهایی که شیب تغییرات انرژی زیاد می‌شود و گویی جهش انرژی داریم، تغییر فاز رخ می‌دهد. برای این کار می‌گذاریم که شبیه‌سازی‌مان در یک دمای نسبتا زیاد به تعادل برسد. سپس یک شبیه‌سازی دیگر با مکان‌ها و سرعت‌های شبیه‌سازی قبلی ایجاد می کنیم با این تفاوت که سرعت‌ها را هر بار در یک ضریب کوچک‌تر از یک ضرب می کنیم. به این ترتیب دمای سیستم را کاهش می دهیم و دما و انرژی تعادلی را به دست می‌آوریم. نمودار به دست آمده را در شکل ۷ می توان مشاهده نمود. همان‌طور که مشاهده می‌شود، در حدود دمای $0.6(\times\epsilon/k_B)$ تا $0.2(\times\epsilon/k_B)$ شاهد تغییرات شدید انرژی در دو نقطه هستیم. که این به آن معنی است که ظرفیت گرمایی بسیار بزرگی خواهیم داشت و تغییر فاز رخ می‌دهد.
هم‌چنین این تفاوت رفتار گاز در این دو فاز را می توان در حرکت اتم‌ها نسبت به یکدیگر مشاهده کرد. به همین دلیل از حرکت اتم‌ها در بالاترین دما و پایین‌ترین دما انیمیشن تهیه می‌سازیم. این انیمیشن‌ها را در فایل animations به اسم‌های MD_30 _100_2_0.001_gas_phase.mp4، MD_30 _100_2_0.001_liquid_phase.mp4 و MD_30 _100_2_0.001_solid_phase.mp4 می‌توان مشاهده نمود.

## ۳ شبیه‌سازی ۱۰۰۰ ذره

برای شبیه‌سازی با توجه به خواسته‌ی سوال، یک object از کلاس SingleAtomMD با 1000 ذره آرگون در یک جعبه‌ی دو بعدی به طول 90 می‌سازیم. لازم به توجه است که تمام اعداد ذکر شده در متن، در واحدهای کاهیده هستند. سرعت اولیه‌ی ذرات را 1.5 و طول قدم‌های انتگرال‌گیری‌مان را $10^{-3}$ در نظر می‌گیریم. شبیه‌سازی را با استفاده از تابع render و برای 100 000 قدم یا معادلا به اندازه‌ی 100 واحد زمانی می‌گذاریم انجام بشود و در هر 100 قدم نیز از سیستم نمونه‌گیری می‌کنیم.




شکل ۷: تغییرات انرژی بر حسب دما برای 100 ذره‌ی آرگون در جعبه‌ای به طول 30

## ۱.۳ بقای انرژی سیستم

برای بررسی بقای انرژی سیستم نمودار انرژی‌های جنبشی، پتانسیل و انرژی کل را در یک نمودار رسم می کنیم. نمودار به دست آمده را در شکل ۸ می‌توان مشاهده نمود. همان‌طور که دیده می‌شود با وجود نوسانات انرژی جنبشی و پتانسیل در طول شبیه‌سازی، مقدار انرژی کل تغییری نکرده و ثابت باقی می ماند. این ثابت بودن به علت استفاده از الگوریتم ورله سرعتی در انتگرال‌گیری‌مان در شبیه‌سازی و استفاده از طول قدم مناسب است.

## ۲.۳ تعداد ذرات موجود در نیمه‌ی چپ

یکی از روش های نسبتا قابل قبول برای تعیین زمان رسیدن به تعادل شبیه‌سازی، استفاده از تعداد ذرات موجود در نیمه‌ی چپ جعبه است. می دانیم که در حالت تعادل این تعداد حول نصف ذرات باید نوسان کند. نمودار به دست آمده را در شکل ۹ می توان مشاهده نمود. همان‌طور که دیده می‌شود این تعداد در حدود زمانی 30 به نصف مقدار می‌رسد و حول آن شروع به نوسان می‌کند.

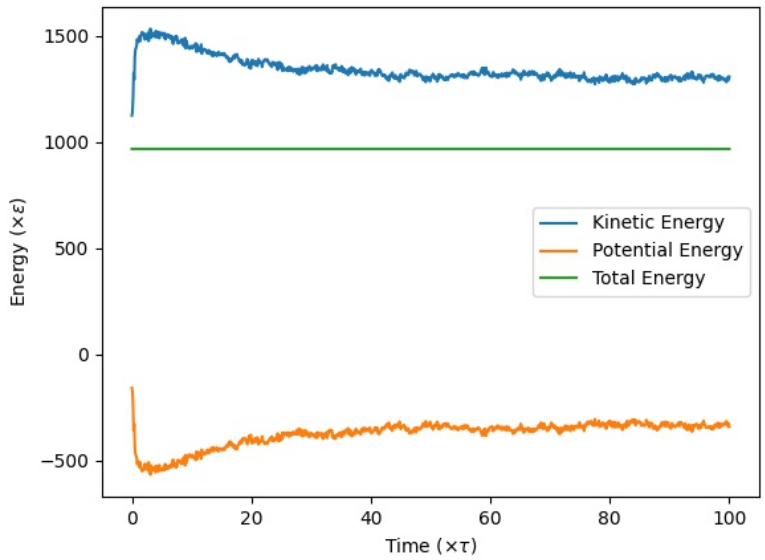
## ۳.۳ دمای گاز

رفتار دما کاملا مشابه با رفتار انرژی جنبشی است. تنها اسکیل آن‌ها متفاوت می‌باشد. نمودار به دست آمده را در شکل ۱۰ می توان مشاهده نمود. همان‌طور که دیده می‌شود دما در حدود زمان 40 به تعادل می رسد و حول آن نوسان می کند. از آن‌جایی که تعداد ذرات ما کم است، دامنه‌ی این نوسانات به نسبت زیاد می‌باشد. با میان‌گیری زمانی مقدار تعادلی آن برابر می‌شود با:

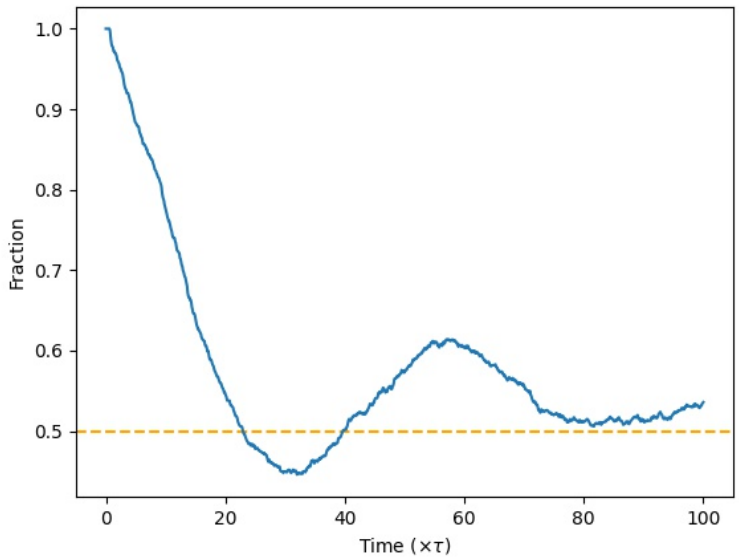
$$\langle T \rangle = 1.309 \pm 0.001 \ (\times \epsilon / k_B) = 156.7 \pm 0.1 K \tag{۵}$$

## ۴.۳ فشار گاز

نمودار به دست آمده را در شکل ۱۱ می توان مشاهده نمود. همان‌طور که دیده می‌شود فشار در حدود زمان 30 به تعادل می رسد و حول آن نوسان می کند. از آن‌جایی که تعداد ذرات ما کم است، دامنه‌ی این نوسانات به نسبت زیاد



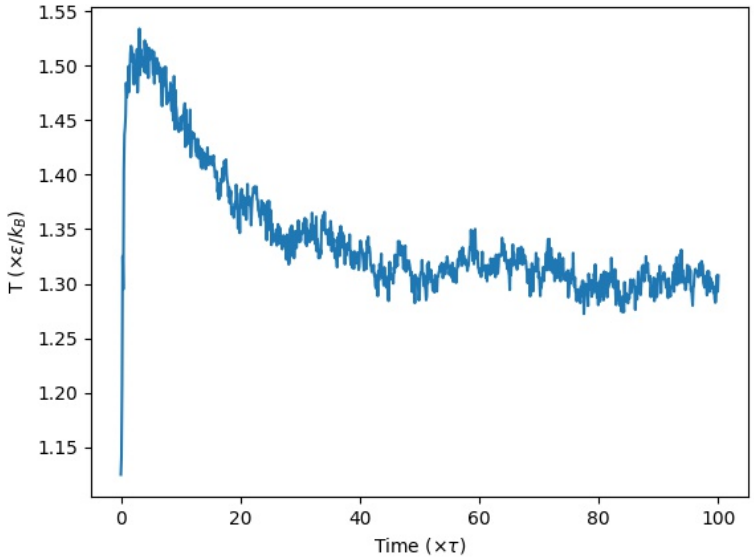

شکل ۸: تغییرات انرژی جنبشی، پتانسیل و انرژی کل بر حسب زمان شبیه‌سازی برای 1000 ذره‌ی آرگون در جعبه‌ای به طول 90 و با سرعت اولیه‌ی 1.5



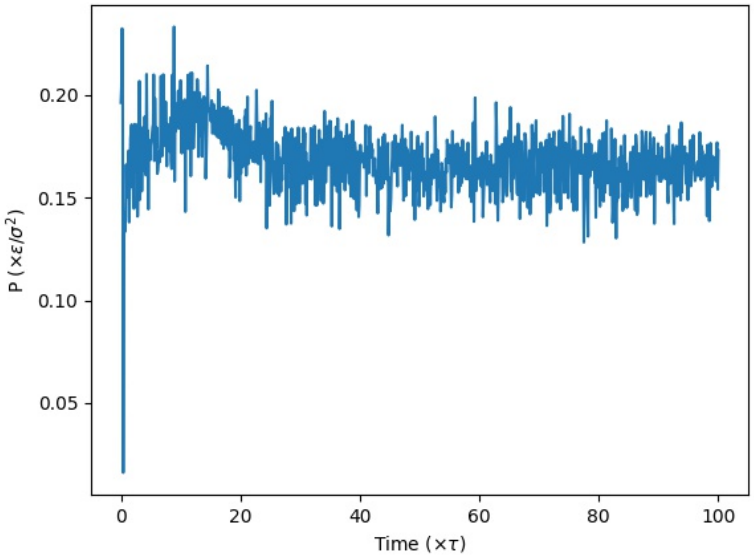

شکل ۹: تغییرات نسبت ذرات موجود در نیمه‌ی چپ جعبه بر حسب زمان شبیه‌سازی برای 1000 ذره‌ی آرگون در جعبه‌ای به طول 90 و با سرعت اولیه‌ی 1.5

می‌باشد. با میان‌گیری زمانی مقدار تعادلی آن برابر می‌شود با:

$$\langle P \rangle = 0.164 \pm 0.001 \ (\times \epsilon/\sigma^2) = (2.3405 \pm 0.0001) \times 10^{-3} N/m \qquad (۶)$$




شکل ۱۰: تغییرات دما بر حسب زمان شبیه‌سازی برای 1000 ذره‌ی آرگون در جعبه‌ای به طول 90 و با سرعت اولیه‌ی 1.5



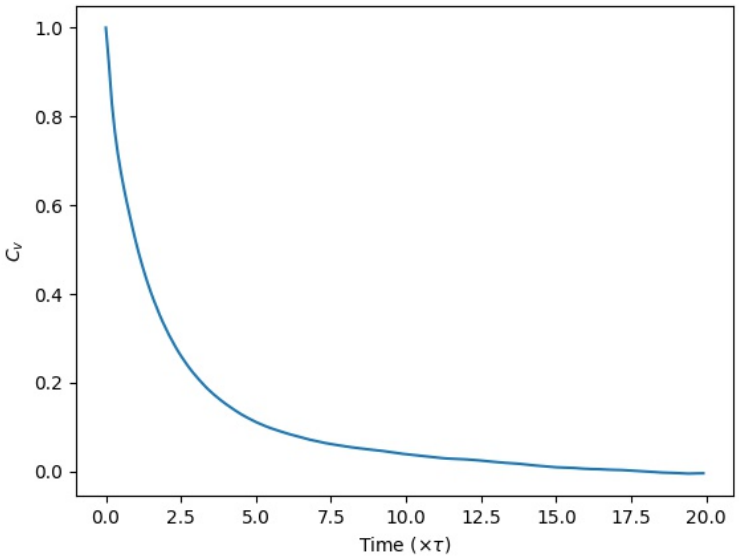

شکل ۱۱: تغییرات فشار بر حسب زمان شبیه‌سازی برای 1000 ذره‌ی آرگون در جعبه‌ای به طول 90 و با سرعت اولیه‌ی 1.5

## ۵.۳ خودهم‌بستگی سرعت‌ها و زمان واهلش

زمان واهلش، زمان مشخصه‌ی تابع خودهم‌بستگی سرعت‌ها است. این زمان در واقع به ما نشان می دهد که چقدر زمان باید بگذرد تا سرعت‌های سیستم مقادیر اولیه خود را فراموش کنند. نمودار به دست آمده را در شکل ۱۲ می

توان مشاهده نمود. با توجه به نمودار به دست آمده، زمان واهلش برابر خواهد بود با:

$$\tau = 1.8(\times\tau) \tag{۷}$$




شکل ۱۲: تابع خودهم‌بستگی سرعت‌ها برای $1000$ ذره‌ی آرگون در جعبه‌ای به طول $90$ و با سرعت اولیه‌ی $1.5$