به نام خدا

چند نکته در مورد جزوه حاضر :

۱- من فقط این جزوه رو اسکن کردم بدون هیچ دخل و تصرفی و دست نوشته های داخلش هم نوشته های استاد نیک عمل هستش (استاد کارگاه شبیه سازی دوره سوم المپیاد نانو و نویسنده کتاب "شبیه سازی های ساده نانو ")

۲- سعی کردم با بهترین کیفیت صفحات رو اسکن کنم اگه مشکلی بود خبر بدین که با اصل جزوه مطابقت داده بشه .

۳- اگر در مورد مفاهیم مطرح شده در جزوه سوالی داشتین در فروم مطرح کنید ، منم در حد توان سعی میکنم جواب گو باشم .

موفق باشید

صادق قربان زاده

S_g555@yahoo.com

Www.1Paper.Blog.ir

به نام خدا

دوره ی شبیه سازی نانو

چنانچه امروزه مطلع هستیم تمامی شئونات زندگی ما به رایانه ها وابسته شده اند،رایانه ها علاوه بر ذخیره و تبادل اطلاعات بین یکدیگر وظیفه بسیار مهمتری داشته و دارند که اتفاقا در ابتدا برای انجام همین وظیفه کشف و راه اندازی شده اند: این وظیفه خدمت رسانی به علم است. یکی از جنبه های این خدمت رسانی استفاده از رایانه ها برای شبیه سازی هاست.شبیه سازی های رایانه ای به گونه ای پلی بین شاخه های تجربی و نظری علوم هستند.

بعضا یک رایانه معمولی و بعضی اوقات چندین رایانه باعث پیشبرد اهداف محاسباتی و شبیه سازی می شود.

امروزه ایده ابر رایانه با خوشه های محاسباتی معاوضه شده است.خوشهای محاسباتی چندین رایانه نسبتا معمولی هستند که یک شبیه سازی مشترک را بر عهده دارند. در زیر به نمونه هایی از این محاسبات اشاره می کنیم.

تهیه دکتر مهدی نیک عمل
تنظیم ت تایپ : مریم شفیعی
دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی

الف-محاسبه اعداد گنگ مثل $\sqrt{۳}$, $\sqrt[۳]{۲}$, ... $\left(\sqrt[k]{a}\right)$

در یونان باستان رابطه ای بازگشتی به صورت $x_{new} = \dfrac{x_{old}^{k}(k-1)+a}{k\,x_{old}^{k-1}}$ وجود داشت که به کمک آن اعداد گنگ را محاسبه می کردند.

مثلا: $\sqrt{۲}$ یعنی جایی کهدر رابطه $\sqrt[k]{a}$ $k=۲$ $a=۲$ است آن وقت با شروع از $x_{old}=1$.

1 $$x_{new} = \frac{۱^{۲}(۲-۱)+۲}{۲\times ۱} = \frac{۳}{۲} = ۱,۵ \rightarrow x_{old} = ۱,۵$$

2 $$x_{new} = \frac{۱,۵^{۲}(۲-۱)+۲}{۲\times ۱,۵} = ۱,۴۱\overline{۶۶} \rightarrow x_{old} = ۱,۴۱\overline{۶۶}$$

3 $$x_{new} = \frac{۱,۴۱\overline{۶۶}^{۲}(۲-۱)+۲}{۲\times ۱,۴۱\overline{۶۶}} \simeq ۱,۴۱۴۲۰$$

عدد ماشین حساب ۱,۴۱۴۲۱۳۵۶۲۳

ریشه این محاسبه کجاست؟

در قرن هفدهم حساب دیفرانسیل و انتگرال که توسط نیوتن و دیگران فرمول بندی شد به این سوال پاسخ داد.

تعریف مشتق را به یاد آورید:

$$f'(x) \simeq \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{x+\Delta x - x} \Rightarrow f(x+\Delta x) \simeq f(x) + f'(x)\Delta x$$

$$\longrightarrow \Delta x = x_{i+1} - x_i \simeq -\frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

اگر $f(x+\Delta x) = 0$

این جا فرض می کنیم که تابع در $x+\Delta x$ صفر باشد.

فرض کردیم گام بعد در حرکت رو به جلو روی تابع $(x+\Delta x)$ به صفر تابع برسد.

اکنون قرار دهیم $f(x) = x^k - a$ آنوقت

$$\underbrace{x_{i+1}}_{x_{new}} = \underbrace{x_i}_{x_{old}} - \frac{x_i^k - a}{k x_i^{k-1}} = \frac{k x_i^k - x_i^k + a}{k x_i^{k-1}} = \frac{x_i^k(k-1) + a}{k x_i^{k-1}}$$

حال برای $f(x) = x^k - a$ می توان به همان رابطه ای که در یونان باستان استفاده می شد رسید!

تمرین: $\sqrt[5]{7}$ را بدون استفاده از ماشین حساب بدست آورید.

ب-سپس خطای محاسبات خود را با ماشین حساب تخمین بزنید.

تعریف خطای مطلق $e = \left| \text{عدد واقعی} - \text{عدد ماشین حساب} \right|$ از رابطه اخیر بازگشتی

بازگشتی بودن به معنای استفاده از آخرین نتایج برای شروع محاسبات جدید است

نتیجه: حساب دیفرانسیل و انتگرال راهگشای بسیاری از مسائل است.

سوال:به نظر شما ماشین حساب چگونه عدد فوق را حساب می کند؟

جواب:الگوریتم های برنامه نویسی !! برنامه نویسی پایه و اساس شبیه سازی های رایانه ای است. برنامه نویسی را می توان قلب تپنده علوم و تکنولوژی دانست. بنابراین توصیه می‌شود برنامه نویسی را یادگرفته و در اولویتهای زندگی علمی خود قرار دهید. برای این کار انواع نرم افزارها و زبانهای برنامه نویسی سطح بالا وجود دارد. دانشمندان علوم محاسباتی به سه دسته کلی تقسیم بندی می شوند:

- الف-برنامه نویسان
- ب-استفاده کنندگان از برنامه
- ج-گروهی که هم کد می نویسند و هم از برنامه های آماده استفاده می کنند.

شبیه سازی که مبتنی بر مشتق گیری و روابط بازگشتی باشد یک شبیه سازی تعیّنی است که نتایج آن قابل پیش بینی است. نتایج این نوع شبیه سازی سلسله وار و بر اساس رابطه علّت و معلول پدید می آید.

شبیه سازی های غیر تعیّنی و تصادفی

آیا امکان دارد با کمّی کردن یک سری پدیده های تصادفی مسئله ریاضی یا فیزیکی حل کرد؟ چرا باید همچین انتظاری داشته باشیم ؟مگر با حدس و گمان و تصادف می توان به نظم رسید؟

- آیا می دانید بیشتر مکانیزم های مواد نانو و مکانیزم های بدن شما بر اساس حرکت های تصادفی زنده هستند و کار می کنند؟

محاسبه عدد π با کمک تولید یک سری اعداد تصادفی

دو عدد تصادفی بین ۰و ۱ انتخاب کنید و آنرا یادداشت کنید.

x_1	x_2	$x_1^2+x_2^2$	
۰/۵	۰/۵	۰/۵	$\rightarrow n=1$
۰/۱	۰/۳	۰/۱	$\rightarrow n=2$
۰/۹	۰/۸	۱/۴۵	$\rightarrow n=2$
⋮	⋮		

شمارش ←

N تعداد عدد ←

اگر مستقل سوم از یک کوچکتر بود آنرا به عدد n که در ابتدا صفر بود اضافه کنید.

$$\pi = \frac{4n}{N}$$

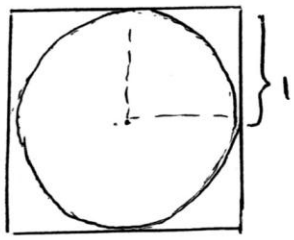
N = کل اعداد تولید شده

چرا چنین محاسباتی صحیح است؟ آیا این مثال را با دقت بالا می توان حل کرد؟

علّت:

فرض کنید سیبلی به شکل زیر داریم اگر تعداد N دارت به سمت هدف پرتاب کنیم تعداد nتای آن ها داخل دایره و مابقی بیرون آن اصابت می کنند شهود ما می گوید که نسبت مساحت دایره به مربع باید برابر $\frac{n}{N}$ باشد چون ما کاملا تصادفی پرتاب می کنیم و داخل و خارج دایره شانس یکسانی دارند.

پس: $\frac{\text{مساحت دایره}}{\text{مساحت مربع}} = \frac{\pi}{4} = \frac{n}{N}$



اما این رابطه در حد آماری $N \gg 1$ برقرار است، چون مثلا برای n=1 مسئله بی معناست. اینجاست که اهمیت اعداد تصادفی و تعریف دقیق و کار با آن ها مهم می شود.

تعریف عدد تصادفی

سری اعدادی که نتوان عناصر آن را پیش گویی کرد. آیا رایانه قادر به تولید عدد تصادفی است؟

در عمل خیر در اصل رایانه اعداد شبه تصادفی تولید می کند.یک روش تولید اعداد تصادفی به صورت زیر است: یک رابطه بازگشتی به این چنین نوشته می شود:

$$x_{new} = (a\, x_{old} + c) \bmod m$$

یعنی باقیمانده داخل پرانتز به عدد m عدد جدیدی است در سری اعداد تصادفی، مثلاً

$x=3$, $c=4$ $m=32$ اولیه $x_{old}=1$

اعداد تصادفی $\underbrace{1 \quad 7 \quad 25 \quad 15 \quad 17 \quad 23 \quad 9 \quad 31}$ 1 7 25

۸ عدد غیرتکراری تا زمانی که دور ۰ از آن اگر، پس برای این اعداد ۸ است

با تقسیم کردن $\frac{x_{new}}{m}$ می توان اعداد را بین ۰ و ۱ تولید کرد.

توجه کنیم الگوریتم فوق اعدادی بین 0, m-1 تولید می کند.

تمرین۲: با کمک $a = ۱۶۸۰۷$ ، $c = ۰$ ، $m = ۲^{۳۱} - ۱$

و $x_{old} = ۱۲$ یک سری اعداد تصادفی تولید کنید.

جالب است بدانیم اگر یک سری عدد تصادفی خوب تولید کنیم می توانیم حرکت مولکول های ناوسری داخل سلول زنده موجودات را شبیه سازی کنیم.

چگونه می توان مطمئن بود که یک سری اعداد تصادفی (کاملا تصادفی)هستند؟

یک بازه در نظر می گیریم و تعداد اعداد داخل هر زیربازه را می شماریم.

مثلا بین ۰ و ۱ را به 5 قسمت تقسیم می کنیم و تعداد هر زیربازه را می شماریم و تعداد N عدد تولید می کنیم

اگر $\frac{N}{5}$ خیلی نزدیک باشند الگوریتم تولید اعداد تصادفی خوب کار می کند

N_1	N_2	N_3	N_4	N_5

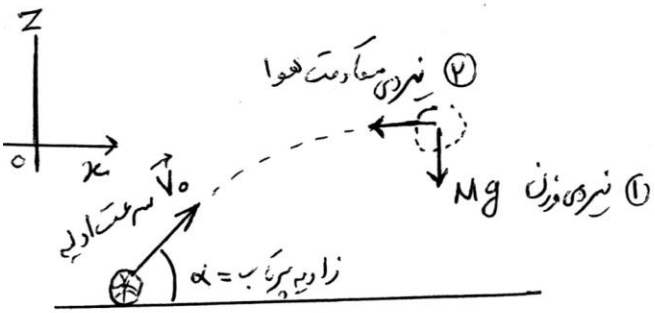
۰ ۰/۲ ۰/۴ ۰/۶ ۰/۸ 1

$$\sum N_i = N$$

اگر $\frac{N_m}{N}$ به $\frac{1}{5}$ باشد الگوریتم مناسب است وگرنه خیر.

مقدمه ای بر شبیه سازی های اتمی ملکولی

قبل از اینکه بتوان یک اتم را شبیه سازی کرد باید بتوان یک جسم معمولی در مقیاس های آشنا در زندگی روزمره را شبیه سازی کرد.همانطور که قبل از آنکه رادرفورد آزمایش خود را انجام دهد آزمایش سیب که نیوتن از آن الهام گرفت انجام شد!



α : زاویه پرتاب نسبت به افق

$\vec{V}_0$: سرعت اولیه

M : جرم

مثال:پرتاب یک توپ فوتبال به سمت دروازه.

در این مسأله در هر لحظه توپ تحت تأثیر ۲ نیروی باشد

نیروی گرانشی از زمین و نیروی مقاومت هوا بنابراین قانون حرکت نیوتن

به صورت $\vec{F} = \underbrace{-mg\hat{k}}_{1} \underbrace{-\gamma\vec{V}}_{2} = M\vec{a}$ نیروی کل وارد بر توپ

تحلیل حرکت پرتاب توپ مبتنی برحساب دیفرانسیل

$$\begin{cases} \vec{a} = \dfrac{d\vec{V}}{dt} \\ \vec{a} = -g\hat{k} - \dfrac{\gamma}{m}\vec{V} \end{cases} \Rightarrow \frac{d\vec{V}}{dt} = -g\hat{k} - \gamma\vec{V} \Rightarrow \frac{dV_z}{-gk - \gamma V_z} = dt$$

برای مولفه های مختلف داریم

$$\begin{cases} a_x = -\dfrac{\gamma}{m}V_x = \dfrac{dV_x}{dt} \\ a_z = -\dfrac{\gamma}{m}V_z - g = \dfrac{dV_z}{dt} \end{cases}$$

با کمک انتگرال گیری از روابط فوق می توان به مسیر و سرعت لحظه ای توپ

دست یافت!

سرعت راستای x

$$\int \frac{dv_x}{\frac{\gamma}{m} v_x} = -dt \longrightarrow \frac{m}{\gamma} \ln v_x = -t$$

$$v_x = v_{x_0} e^{-\gamma/m\, t}$$

سرعت راستای z

$$\int \frac{dv_z}{g + \frac{\gamma}{m} v_z} = -t \longrightarrow \frac{m}{\gamma} \ln\left(\frac{mg}{\gamma} + v_z\right) = -t$$

$$v_z = v_{z_0} e^{-\gamma/m\, t} - \frac{mg}{\gamma}$$

مکان در راستای x

$$\frac{dx}{dt} = v_x = v_{x_0} e^{-\gamma/m\, t} \rightarrow x = x_0 e^{-\frac{\gamma}{m} t}$$

مکان در راستای z

$$\frac{dz}{dt} = v_z = v_{z_0} e^{-\gamma/m\, t} - \frac{mg}{\gamma} \rightarrow z = \dots$$

الف-اکنون اگر تنها یک جمله اضافه تر به نیرو داده شود:

$$\vec{F} = -mg\hat{k} - \gamma \vec{v} + \alpha \vec{v}^2 \frac{\vec{v}}{v}$$

دشواری محاسبات اخیر دو چندان می شود.

که به همدیگر نیرو وارد کنند

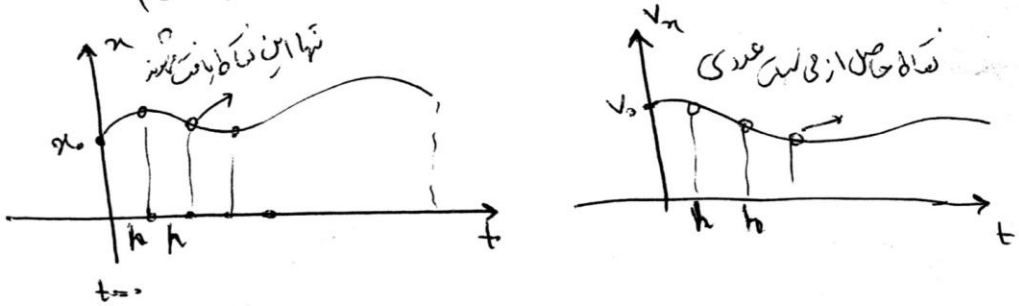
ب-اگر به جای یک ذره چندین ذره (توپ) با هم پرتاب شوند تقریبا مسئله غیر قابل حل می شود.

این جاست که نیاز به محاسبات عددی و شبیه سازی ها به خوبی حس می شود. چون حل دقیق وجود ندارد به ناچار به حل های تقریبی روی می آوریم که یکی از آنها ایده ی گسسته سازی زمان است برای معادلات دیفرانسیل.

مسئله را این طور شروع می کنیم که ابتدا معادله دیفرانسیل نیوتن را که یک معادله مرتبه دو است را چنین می نویسیم:

$$\begin{cases} \dfrac{d^2x}{dt^2} = f(x, v_x, t) \longrightarrow \dfrac{dv}{dt} = f \\[2ex] \dfrac{dx}{dt} = v(x, t) \longrightarrow \dfrac{dx}{dt} = v \end{cases}$$

گام زمانی $\Delta t = h$ را برگسسته کردن انتخاب می‌کنیم



ایده گسسته سازی زمان برای معادلات دیفرانسیل مختلف از جمله معادله دیفرانسیل نیوتن کمک می کند معادلات دیفرانسیل مختلف که بیانگر مسائل مختلفی از فیزیک و ریاضیات هستند به طور عددی قابل حل باشند.

در حل عددی معادله دیفرانسیل چندین نکته بسیار مهم وجود دارد

الف-مرتبه قطع بسط تیلور : چند جمله اول در بسط سری تیلور را نگه می‌داریم

ب-نوع الگوریتم مورد استفاده : چه ترکیبی از چند سری تیلور قطع شده را مورد استفاده قرار دهیم

- می خواهیم مسیر حرکت را پیدا کنیم :

مشتق گیری ها

$$\begin{cases} x_{i+1} = x_i + \left(\frac{dx}{dt}\right)\overset{(h)}{\Delta t} + \frac{1}{2}\left(\frac{dx^2}{dt^2}\right)\overset{(h^2)}{\Delta t^2} \\ V_{i+1} = V_i + \left(\frac{dv}{dt}\right)\overset{(h)}{\Delta t} + \text{———} \end{cases}$$

نمونه‌ای از بسط تیلور که تا ۲ جمله داری h قطع شده است

$$(*)\begin{cases} x_{i+1} = x_i + V_n h + \frac{1}{2} a_n h^2 \\ V_{i+1} = V_i + a_n h \end{cases}$$

۲ معادله و وجودی ۳

قطع تا یک جمله دارای h.

روابط فوق الگوریتم های سازه ای است که برای پیش بینی مسیر حرکت و سرعت ذره در هر لحظه استفاده می شود

این الگوریتم ها ناشی از گسسته سازی زمان برای معادله نیوتن هستند اگر $\vec{a}_n = \frac{\vec{F}_n}{m}$ قرار دهیم.

برای حرکت سه بعدی تعداد ۶ معادله به جای ۲ معادله (*) قرار خواهیم داشت.

شبیه سازی در مقیاس نانو

آیا در مقیاس نانو هم می توان هر اتم را به صورت یک گلوله فرض کرد و همان کاری که برای پرتاب توپ انجام شد را این جا هم انجام داد؟ آری و خیر!

آری یعنی از معادله نیوتن می توان بهره برد. خیر یعنی دیگر شتاب گرانش مطرح نیست یعنی نیروی وارد بر اتم دیگر تنها نیروی گرانش نیست بلکه نیروهای بین ملکولی مطرح می شود. این نیرو های بین ملکولی منشا اصلی تشکیل ماده هستند و ریشه آنها در بر هم کنش های الکترونی اتم هاست.

سوال:چرا نیروی گرانشی در ابعاد اتمی در مقابل نیروهای بین اتمی قابل صرفنظر کردن است؟

چون جرم اتمها و مولکولها بسیار ناچیز است. بر هم کنش های بین اتمی انواع واقسام مختلف دارند که در کتب فیزیک وشیمی دبیرستان با برخی از آنها آشنا شده اید. دسته بندی این نیرو ها معمولا با توجه به مرتبه پیوند شیمیایی یا سختی مواد حاصل از آنها دسته بندی می شوند. یکی از آنها که ناشی از پیوند های کوالانسی یا به اشتراک گذاشتن الکترون های چندین عنصر است باعث پیدایش مواد جامد کوالانسی می شوند که جز قوی ترین بر هم کنش ها هستند.

بر هم کنش ها که ناشی از اشتراک گذاشتن الکترون ها نیست به مراتب ضعیف تر بوده و مواد نرم (لاستیک و آب و....)را به وجود می آورند. در ادامه به انواع برهم‌کنش‌ها و چگونگی استفاده از آنها در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی اشاره می‌کنیم.

دینامیک مولکولی: روش شبیه‌سازی مبتنی بر حل عددی معادله نیوتن است. اساس دینامیک مولکولی برگشته سازی زمان و استفاده از نیروها یا پتانسیل‌های بین اتمی مناسب استوار است.