

۸۷/۱۱/۱۰۵۷۶۸  
۸۷/۱۱/۳

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

۱۰۷۷۷۶

۸۷/۱/۱۰۵۷۶۸  
۸۷/۱/۷



دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد فیزیک (ذرات بنیادی)

عنوان:

شبه سازی پلاسمای کوآرک- گلوئون قویا " جفت

شده (sQGP) به روش دینامیک مولکولی

دانشجو:

نادر مشیری

استاد راهنما:

دکتر کراسوس غفوری تبریزی

شهریور ۱۳۸۷

۱۰۷۷۷۶

بسمه تعالی

« صور تجلسه دفاع پایان نامه دانشجویان دوره کارشناسی ارشد »

تهران ۱۹۸۳۹۶۳۱۱۳ اوین

تلفن: ۲۹۹۰۱

بازگشت به مجوز دفاع شماره ۲۰۰/۲۵۵۰/د مورخ ۱۳۸۷/۶/۷ جلسه هیأت داوران ارزیابی پایان نامه آقای نادر مشیری سده به شماره شناسنامه ۱۶۴۳ صادره از خمینی شهر متولد ۱۳۶۰ دانشجوی دوره کارشناسی ارشد ناپیوسته رشته فیزیک- ذرات بنیادی و نظریه میدانها  
با عنوان :

شبه سازی دینامیک مولکولی پلاسمای کوانتوم کروم دینامیکی جفت شده

به راهنمایی:

دکتر کراسوس غفوری تبریزی

طبق دعوت قبلی در تاریخ ۳۰ / ۶ / ۱۳۸۷ تشکیل گردید و براساس رأی هیأت داوری و با عنایت به ماده ۲۰ آئین نامه کارشناسی ارشد مورخ ۷۵/۱۰/۲۵ پایان نامه مزبور با نمره - ۱۸ / و درجه عالی مورد تصویب قرار گرفت.

۱- استاد راهنما: آقای دکتر کراسوس غفوری تبریزی

۲- استاد مشاور: -----

۳- استاد داور: آقای دکتر شهریار بابگان

۴- استاد داور و نماینده تحصیلات تکمیلی: آقای دکتر غلامرضا جعفری

۵- معاون تحصیلات تکمیلی دانشکده: آقای دکتر خسرو جدیدی

## تشکر و قدر دانی

بدینوسیله از استاد گرانقدرم آقای دکتر غفوری تبریزی که سمت استاد راهنمایی این رساله بر عهده‌ی ایشان بود به پاس زحمات و همیاریهای ایشان کمال تشکر را دارم.

از استاد گرانقدر آقای دکتر رفیعی تبار که در یادگیری شبیه سازی کمک های شایانی به اینجانب نمودند بسیار سپاسگزارم.

از آقای مهدی میرزایی به پاس همراهی های ایشان در طول انجام این شبیه سازی و کمک در نکات برنامه نویسی بسیار ممنون و سپاسگزارم.

از آقای دکتر پوریا پدram به جهت بحث های مفید و راهنمایی های گره گشایشان بسیار متشکرم.

یاد و خاطره دوستانم در گروه فیزیک و دانشگاه شهید بهشتی همیشه با من خواهد بود و توفیق روز افزون ایشان را از خداوند خواستارم.

نادر مشیری

## چکیده

یکی از موضوعات جدید در زمینه ی فیزیک هسته ای ، ذرات بنیادی و حتی پلاسما که ذهن بسیاری از دانشمندان و محققان را چه در زمینه ی راز آفرینش و چه در زمینه ی پیشبرد علم و تکنولوژی به خود مشغول کرده است ، تحقیق و بررسی برخورد ذرات سنگین (هادرونها) در انرژیهای فوق نسبی است، و این چیزی است که به شناخت هر چه بیشتر ما از کارهای جهان فیزیکی منجر می شود از کوچکترین ذرات داخل اتم و هسته گرفته تا بزرگترین ستاره ها و کهکشانها. در این راستا اقدامات جدی از سوی کشورها و مراکز علمی مختلف صورت گرفته است که از مهمترین آنها تصمیم برای ساختن بزرگترین مرکز شتابدهنده ی ذرات سنگین با انرژیهای فوق نسبی (RHIC)<sup>۱</sup> در آزمایشگاه ملی بروک هون<sup>۲</sup> در لانگ آیلند نیو یورک<sup>۳</sup> می باشد که پس از ده سال تلاش بی وقفه در سال ۲۰۰۰ شروع به کار نمود.

از مهمترین یافته های اخیر در این مرکز، پیدایش حالت جدیدی از ماده است که از برخورد رو در روی یون های پر شتاب طلا و از مرتبه ی زمانی  $t = 10^{-23}$  حاصل می شود. هر چند این حالت از ماده به دلیل مرتبه ی زمانی کوچکش به صورت مستقیم توسط مشاهده گر ها رویت نمی شود ولی محصولات آن و نتایج حاصل از حل معادلات Lattice QCD وجود آنرا بطور جدی پیش بینی می کنند. دانشمندان معتقدند که این حالت جدیدی از ماده است و آنرا پلاسمای گلوئون-کوآرک (QGP)<sup>۴</sup> می نامند.

در آوریل ۲۰۰۵ نتایج نشان داد که این حالت ماده در این محدوده ی دمایی بر خلاف پیش بینی های قبلی دارای بر همکنش قوی در بین گلوئونها و کوآرک هاست و از آن پس SQGP<sup>۵</sup> نامیده شد.

هدف اصلی در این تحقیق این است که خواص SQGP را با استفاده از روش های فیزیک پلاسمای به طور قوی جفت شده کلاسیکی توصیف کنیم. بدین منظور، در فصل اول مختصری درباره شبیه سازی به روش دینامیک مولکولی آورده شده است و در فصل دوم بیشتر به معرفی پلاسما و مدل پیشنهادی مان می پردازیم تا در فصل ۴ نیز نتایج مدل پیشنهادی و شبیه سازی را بررسی نماییم.

واژه های کلیدی: شبیه سازی، دینامیک مولکولی، SQGP، QCD، پلاسما ی کوآرک- گلوئون

<sup>۱</sup> Relativistic Heavy Ion Collider

<sup>۲</sup> Brookhaven National Laboratory (BNL)

<sup>۳</sup> New York on Long Island

<sup>۴</sup> Quark-Gluon-Plasma

<sup>۵</sup> strongly coupled quark-gluon plasma

## مقدمه

در ماه آوریل ۲۰۰۵ اعلام شد که تشکیل ماده کوارک به طور آزمایشی توسط نتایج بدست آمده در RHIC<sup>1</sup> تأیید شده است. توافق ۴ گروه محقق در RHIC این است که آن ها مایعی با ویسکوزیته خیلی پایین متشکل از کوارک-گلوئون ها ایجاد کرده اند. با این وجود بر خلاف یک سری فرضیات، هنوز معلوم نیست که آیا این ماده QCD<sup>2</sup> خصوصاً در دماهای نزدیک به گذار رفتاری شبیه گاز دارد یا مایع؟ در مدل استاندارد فیزیک ذرات بنیادی، قوی ترین نیرو، برهمکنش قوی است که توسط نظریه کوانتم کرمودینامیک (QCD) توصیف می شود. در دماها و چگالی های معمولی این نیرو فقط کوارک ها را به ذرات مرکب (هادرون ها) در حدود اندازه های  $1\text{ fm} = 10^{-15}\text{ m}$  (مطابق بر مقیاس انرژی  $QCD = 200\text{ MeV}$ ) محدود می کند و اثراتش در فواصل بزرگتر قابل ملاحظه نیستند با این وجود وقتی دما به مقیاس انرژی QCD (دمایی در حدود  $10^{12}\text{ K}$ ) می رسد یا چگالی تا حدی بالا رود که میانگین نقطه جدایی داخلی کوارک از  $1\text{ fm}$  کوچک تر شود، هادرون ها به کوارک های تشکیل دهنده شان ذوب می شوند و برهمکنش قوی در فیزیک مساله حکمفرما می شود و به چنین فازی از ماده، ماده کوارک<sup>3</sup> (QGP) یا ماده<sup>4</sup> QCD<sup>4</sup> گویند. و بر خلاف آنچه تا کنون می پنداشتند این ماده نه تنها از نوع برهمکنش ضعیف (wQGP)<sup>5</sup> نبوده بلکه از نوع برهمکنش قوی (sQGP)<sup>6</sup> است!

آخرین نتایج بدست آمده تاکنون در مرکز تحقیقاتی LHC<sup>7</sup> و RHIC و آنالیز این داده ها چنین می نماید که خواص مشابهی بین sQGP و پلاسمای قویاً جفت شده کلاسیک (با  $\Gamma$  بزرگ) وجود دارد. بدین منظور، ما خواص sQGP را با استفاده از روش های شبیه سازی دینامیک مولکولی بررسی حالت تقریبی کلاسیکی و پتانسیل کوارک-کوارک غیر آبلی مورد بررسی قرار می دهیم که از مهمترین خواص مد نظر در این برنامه مطالعه فرآیند هم دما سازی<sup>8</sup> در این سیستم است.

---

<sup>1</sup> Relativistic Heavy Ion Collider  
<sup>2</sup> QCD Matter  
<sup>3</sup> Quark Matter  
<sup>4</sup> QCD Matter  
<sup>5</sup> Weekly Quark-Gluon Plasma  
<sup>6</sup> Strongly Quark-Gluon Plasma  
<sup>7</sup> Large Hadron Collider  
<sup>8</sup> Thermalization Processing

# فهرست مطالب

۴	۱	مبانی شبیه سازی دینامیک مولکولی
۴	۱-۱	شبیه سازی وابسته به کامپیوتر .....
۵	۱-۱-۱	شیوه های انجام شبیه سازی کامپیوتری .....
۷	۲-۱-۱	مطالعه رفتار یک سیستم فیزیکی .....
۹	۳-۱-۱	مدلسازی در مقابل شبیه سازی .....
۹	۲-۱	شبیه سازی به روش دینامیک مولکولی .....
۱۰	۳-۱	مراحل مدلسازی دینامیک مولکولی .....
۱۱	۱-۳-۱	ساختن مدل .....
۱۳	۲-۳-۱	شبیه سازی مدل .....
۱۵	۴-۱	معادلات حرکت در دینامیک مولکولی .....
۱۷	۱-۴-۱	دینامیک نیوتنی .....
۱۷	۲-۴-۱	دینامیک هامیلتونی .....

۱۸	..... روشهای محاسبات عددی معادلات دیفرانسیل حرکت	۵-۱
۱۹	..... روش پیش بینی - تصحیح گیر	۱-۵-۱
۲۱	..... الگوریتم ورله	۲-۵-۱
۲۳	..... روش پرش قورباغه	۳-۵-۱
۲۳	..... روش سرعت ورله	۴-۵-۱
۲۵	..... مطالعه سیستم های کوچک	۶-۱
۲۵	..... شرایط مرزی دوره ای	۱-۶-۱
۲۹	..... معیار حداقل تصویر و پتانسیل قطع	۲-۶-۱
۳۱	..... هنگردهای مکانیک آماری	۳-۶-۱
۳۵	..... دینامیک مولکولی در دمای ثابت	۷-۱
۳۵	..... شیوه ی مقیدی (Method Constrained)	۱-۷-۱
۳۶	..... شیوه ی استوکاستیک (Method Stochastic)	۲-۷-۱
۳۷	..... شیوه ی دستگاه گسترش یافته (Extended-Method System)	۳-۷-۱
.....		
۴۱	..... ماده کوارک و خواص آن	۲
۴۲	..... کرومودینامیک کوانتومی	۱-۲
۴۲	..... برهمکنش قوی - بار و رنگ	۲-۲
۴۶	..... به وجود آمدن امکان توصیف واحد برای نیروهای طبیعت	۳-۲
۴۷	..... پلاسمای گلوئون - کوارک قویا " جفت شده (SQGP) چیست؟	۴-۲
۴۹	..... مدل دینامیک مولکولی	۵-۲



۵۴	توضیح کد کامپیوتری شبیه سازی	۳
۵۴	خواندن ورودی های برنامه (INCRD)	۱-۳
۵۵	بی بعد کردن کمیات به کار رفته در برنامه (POTIN)	۲-۳
۵۸	سرعت اولیه دادن به ذرات (STRUP)	۳-۳
۶۰	نحوه ی شبیه سازی دینامیک مولکولی (MDRUN)	۴-۳
۶۰	محاسبه پتانسیل و نیروی وارد بر ذرات (JONES-LENNARD)	۱-۴-۳
۶۳	مکان دهی جدید به ذرات (RMOVES)	۲-۴-۳
۶۴	محاسبه سرعت های جدید (VMOVES)	۳-۴-۳
۶۵	ثابت نگه داشتن حجم (VSCALE)	۴-۴-۳
۶۶	ثبت خروجی ها (OUTCRD)	۵-۳
۶۷	ثابت نگه داشتن دما	۶-۳
۷۰	نتایج بدست آمده از برنامه شبیه سازی	۴
۷۰	پارامتر های ورودی در شبیه سازی	۱-۴
۷۱	پارامتر های تکنیکی	۲-۴
۷۱	بررسی نتایج	۳-۴
۷۵	جمع بندی مطالب	۴-۴
۷۶	پیشنهاداتی برای انجام کارهای تحقیقاتی مرتبط	۵-۴
۷۷		ضمیمه
۸۰		منابع و مأخذ

## فصل ۱

# مبانی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

### ۱-۱ شبیه‌سازی وابسته به کامپیوتر

با پیدایش کامپیوتر تحول عظیمی در پژوهش‌های علمی بوجود آمد. استفاده از این ابزار قدرتمند دریچه تازه‌ای بر مطالعات میکروسکوپیکی مواد گشوده و به تقسیم‌بندی تجربی و نظری فیزیک شاخه تازه‌ای به نام فیزیک کامپیوتر افزوده است. تاریخ شبیه‌سازی کامپیوتری به ساخت اولین کامپیوترها برمی‌گردد. وقتی که برای اولین بار کامپیوتر برای محققین قابل دسترسی شد، شبیه‌سازی مایع توسط متروپولیس<sup>۱</sup>، روزنبلوت<sup>۲</sup> و تالر<sup>۳</sup> با کامپیوتر MANYAC در مرکز لوس‌آلاموس در آمریکا با استفاده از روش مونت-کارلو انجام شد.<sup>[۱]</sup> اولین شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در سال ۱۹۵۶ توسط آلدرا<sup>۴</sup> و وین‌یارد<sup>۵</sup> گزارش شد.<sup>[۲]</sup> در این گزارش، دینامیک مجموعه‌ای از کره‌های سخت مطالعه شده بود. اولین شبیه‌سازی MD از مدل یک ماده واقعی در سال ۱۹۵۹ توسط

1) Metropolis 2) Rosenbluth 3) Teller 4) Alder 5) Wainwright

گروهی به رهبری وین‌یارد انجام شد که انتشار عیوب در بلور Cu را بررسی کرده بودند و اولین شبیه‌سازی MD از مایع واقعی آرگون در سال ۱۹۶۴ توسط رهن<sup>۶</sup> گزارش شد. [۳] بعد از آن کامپیوترها گسترش یافته و در دسترس دانشمندان قرار گرفت و انجام شبیه‌سازی در زمینه‌های دیگر توسعه یافت.

با کمک کامپیوتر می‌توان ساختاری با پایین‌ترین انرژی ایجاد کرد. پس یک ساختار شبیه‌سازی شده می‌تواند به آنچه که به طور طبیعی اتفاق می‌افتد بسیار نزدیک باشد. بطور کلی می‌توان گفت شبیه‌سازی شامل تدوین مدل، محاسبه مسیرهای اتمی و تجزیه و تحلیل این مسیرها است که در بخش‌های بعدی در مورد آنها توضیح داده خواهد شد.

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی از بعضی جهات شبیه به آزمایش واقعی است. وقتی یک آزمایش واقعی انجام می‌دهیم به ترتیب زیر عمل می‌کنیم. یک نمونه از ماده مورد مطالعه آماده می‌کنیم. این نمونه را به یک ابزار اندازه‌گیری ارتباط می‌دهیم و کمیت مورد علاقه را در بازه زمانی مشخص اندازه می‌گیریم. اگر این اندازه‌گیری پارازیت‌های آماری داشته باشد، به منظور افزایش دقت در مدت زمان طولانی‌تری میانگین می‌گیریم. در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نیز از همین روال پیروی می‌شود. ابتدا یک نمونه آماده می‌کنیم یعنی مدلی از سیستم شامل  $N$  ذره انتخاب کرده و معادلات حرکت نیوتن را برای این سیستم حل می‌کنیم و اجازه می‌دهیم سیستم به تعادل برسد تا خاصیت‌های سیستم در زمان طولانی تغییر نکند. بعد از به تعادل رسیدن، اندازه‌گیری واقعی را انجام می‌دهیم. در واقع بعضی از خطاها که در انجام آزمایش کامپیوتری امکان دارد اتفاق بیفتد شبیه به خطاهای آزمایش واقعی است مثلاً نمونه درست آماده نشده باشد، زمان اندازه‌گیری کافی نباشد، سیستم مورد مطالعه یک تغییر برگشت‌ناپذیر طی آزمایش انجام دهد یا آنچه در فکر داریم اندازه نگیریم.

### ۱-۱-۱ شیوه‌های انجام شبیه‌سازی کامپیوتری

شبیه‌سازی به اهداف مختلفی به کار برده می‌شود از جمله:

- برای پیش‌بینی ویژگی‌ها و رفتار یک سیستم واقعی، زمانی که یک تجربه آزمایشگاهی یا غیر ممکن است و یا گران می‌باشد.

- به منظور آزمودن درستی یک نظریه ارائه شده برای مجموعه‌ای از پدیده‌ها.

به طور کلی شبیه‌سازی به سه طریق عمده انجام می‌شود:

۱- روش تعینی<sup>۷</sup> (روش دینامیک مولکولی<sup>۸</sup>، MD) که اساس آن محاسبه مسیرهای مولکولی از طریق حل

6) Rahman 7) Deterministic Method 8) Molecular Dynamics

معادلات دیفرانسیل حرکت است.

۲- روش احتمالاتی<sup>۹</sup> (روش مونت کارلو<sup>۱۰</sup>، MC) که متکی بر اصول احتمال برای محاسبه مسیر اتم‌ها می‌باشد.

۳- روش تعینتی - احتمالی<sup>۱۱</sup> (روش دینامیک استوکاستیک<sup>۱۲</sup>) که ترکیبی از دو شیوه فوق است.

در مقایسه با MD که یک روش کاملاً تعینتی (تحلیلی) است، روش MC بر پایه کاربرد احتمال بنا شده است. شیوه‌های تعینتی - احتمالی شامل یک بخش تعینتی هستند که به صورت انتگرال‌گیری از معادلات حرکت است (شباهت این روش با MD). اما در معادلات حرکتی که از حل آنها مسیرهای مولکولی استخراج می‌شود، علاوه بر نیروهای واقعی، نیروهای آماری و تصادفی در نظر گرفته می‌شود که بر مسیرهای حرکت بدست آمده تأثیر گذاشته و از تعینتی بودن کامل این روش جلوگیری می‌کند.

در روش MD بوسیله حل عددی معادلات دیفرانسیل حرکت، مکان و سایر خواص دینامیکی مولکول‌ها بدست می‌آید. بر خلاف دینامیک مولکولی که در آن محاسبه مسیرهای مولکولی اساس کار را تشکیل می‌دهد، در سایر روش‌ها مسیرهای مولکولی آن چنان خاصیت پایه‌ای در نظر گرفته نمی‌شود.

به عنوان مثال در روش مونت کارلو مکان مولکول‌ها از حل معادلات دیفرانسیل حرکت بدست نمی‌آید، بلکه مکان‌ها به گونه‌ای تصادفی ایجاد می‌شوند، سپس انرژی پتانسیل کل با توجه به این مکان‌ها و تابع پتانسیل موجود اندازه‌گیری می‌شود. در مرحله بعد در مکان یکی از مولکول‌ها به طور تصادفی تغییر کوچکی داده می‌شود، بنابراین سیستم توزیع جدیدی پیدا می‌کند. مجدداً انرژی پتانسیل کل اندازه گرفته می‌شود. اگر انرژی بدست آمده در این مرحله کوچکتر از مقدار اندازه‌گیری شده قبلی باشد، تغییر مکان ایجاد شده در مکان مولکول، مورد قبول است، در غیر این صورت مکان جدید با احتمالی وابسته به اختلاف انرژی‌های پتانسیل اندازه‌گیری شده قبل و بعد از تغییر مکان، پذیرفته می‌شود. این فرآیند به طور تکراری انجام می‌شود تا اینکه سرانجام حالت تعادل برای سیستم ایجاد شود یعنی دیگر نتوان تغییری در میزان پتانسیل کل ایجاد کرد. در پایان به کمک روابط ریاضی موجود، خواص مورد نظر سیستم را از خواص دینامیکی محاسبه شده، بدست می‌آوریم.

همان طور که مشاهده می‌شود تفاوت شیوه‌های مختلف شبیه‌سازی در چگونگی محاسبه مسیرهای مولکولی است. لازم به توجه است که شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و مونت کارلو هر دو روش‌های کارآمدی برای بدست آوردن خواص یک سیستم و توصیف رفتار آن هستند اما هر کدام نسبت به دیگری مزایا و مضراتی دارند. به عنوان مثال کدنویسی یک برنامه MC در یک زبان سطح بالا مثل فرترن برای افراد مبتدی ساده‌تر از کدنویسی یک برنامه MD است. در عوض خطاهای کوچک در یک برنامه MC خود را به وضوح نشان نمی‌دهند اما در

9) Probabilistic Method 10) Monte-Carlo 11) Method Hibrid 12) Molecular Dynamics Stochastic

یک برنامه MD در طی اجرای برنامه، خطاها ذخیره شده و در پایان به صورت نقض قوانین بقا ظاهر می‌شوند. بنابراین موارد کاربرد این دو روش می‌تواند متفاوت باشد.

### ۲-۱-۱ مطالعه رفتار یک سیستم فیزیکی

آن قسمت از دنیا که به بررسی رفتار آن می‌پردازیم، «سیستم» نامیده می‌شود. سیستم یک زیر مجموعه از تمام دنیا است. یک سیستم می‌تواند متشکل از قسمت‌های مشابه یا متفاوت باشد که چگونگی قرار گرفتن آنها در کنار یکدیگر حالت سیستم را مشخص می‌کند.

برای مشخص کردن حالت سیستم و چگونگی تغییر آن، یعنی رفتن از یک حالت به حالت دیگر، به یک مجموعه مقادیر عددی نیازمندیم که بیانگر خواص عمده سیستم هستند. این مجموعه مقادیر به یک سری کمیت‌ها به نام مشاهده‌پذیرهای سیستم نسبت داده می‌شوند.

حالت سیستم می‌تواند توسط برهم‌کنش با محیط یعنی آنچه خارج از سیستم بوده و بر آن تأثیرگذار است، تغییر کرده و یا کنترل شود. نوع برهم‌کنش‌های مجاز برای یک سیستم به مرزهای جداکننده آن از محیط وابسته است. ساده‌ترین نوع این مرزها مربوط به سیستم‌های ایزوله می‌باشد. سیستم ایزوله، سیستمی است که با محیط اطراف خود نه ماده و نه انرژی مبادله نمی‌کند. پس این چنین سیستم‌هایی هیچ نوع برهم‌کنشی با محیط خود ندارند.

معمولاً نمی‌توانیم حالت سیستم را مستقیماً مشاهده کنیم بلکه این مشاهده تنها بطور غیر مستقیم و از طریق دستکاری، اندازه‌گیری و کنترل مشاهده‌پذیرهای سیستم انجام می‌شود. در واقع زمانی که بتوانیم مجموعه مشاهده‌پذیرهای سیستم را توسط یک مجموعه مقادیر عددی بیان کنیم، حالت آن را مشاهده کرده‌ایم.

از آنجا که سیستم ایزوله، سیستمی است که هیچ نوع برهم‌کنشی با دنیای اطراف ندارد، پس تنها با اندازه‌گیری مشاهده‌پذیرها قبل از ایزوله شدن، می‌توانیم مقادیری برای این کمیت‌ها داشته باشیم و حالت سیستم را بشناسیم. هنگامی که یک سیستم را به شیوه نظری یا تجربی بررسی می‌کنیم، فرآیند کلی که در هر دو روش اتفاق می‌افتد یکسان است. به این ترتیب که ما مشاهده‌پذیرهای خاص سیستم (inputs) را دستکاری می‌کنیم، پس از پاسخ سیستم، مشاهده‌پذیرهای دیگر سیستم (outputs) را اندازه‌گیری یا محاسبه می‌کنیم.

به منظور سازماندهی، توصیف و یا حتی پیشگویی مشاهده‌پذیرها، نظریه‌ها را به وجود می‌آوریم. هدف نهایی هر نظریه‌ای پیدا کردن ارتباط بین خروجی‌های اندازه‌گیری شده و ورودی‌های کنترل شده است. نظریه‌ها می‌توانند در یکی از مراحل زیر ساخته شوند:

۱- در ساده‌ترین مرحله، نظریه رابطه‌ای بین مشاهده‌پذیرها به وجود می‌آورد. این ارتباط نتیجه یک سری آزمایشات و تجربیات است. برای مثال ترمودینامیک که نظریه‌ای در این سطح است، فرمول  $PV = NK_B T$  را برای گاز ایده‌آل ارائه می‌دهد که به طور تجربی از نظم دادن به نتایج ناشی از اندازه‌گیری دما، فشار و حجم گاز در چگالی ثابت بدست آمده است.

۲- در مرحله بعدی که پیچیده‌تر است، نظریاتی وجود دارند که مشاهده‌پذیرها را به حالت واقعی ربط می‌دهند. به عنوان مثال نظریه جنبشی، نظریه‌ای در این مرحله است که بیان می‌کند مشاهده‌پذیر دما از طریق سرعت‌های مولکولی به حالت سیستم مرتبط است. نظریه‌ها در این مرحله تفسیرهای خوبی از مشاهده‌پذیرها فراهم می‌آورند. اما اگر حالت سیستم قابل مشاهده نباشد، این نظریه‌ها نمی‌توانند برای محاسبات عددی مشاهده‌پذیرها استفاده شوند.

برای حل مشکل اخیر دو روش وجود دارد:

الف) نظریه‌هایی در مراحل بالاتر بسازیم.

ب) شبیه‌سازی کامپیوتری انجام دهیم.

نظریه‌های مراحل بالاتر سعی دارند مشکل محاسباتی را توسط تجدید سازمان و کاهش دادن اطلاعات جزئی مورد نیاز برای محاسبه مقادیر مشاهده‌پذیرها، حل کنند. این، هدف مکانیک آماری است که در آن مشاهده‌پذیرها به حالت واقعی سیستم مربوط نمی‌شوند بلکه به احتمال بودن سیستم در حالت‌های دسترس‌پذیرش ارتباط داده می‌شوند.

راه حل دوم استفاده از دینامیک مولکولی است. در این روش به حالت‌های سیستم مقادیر عددی نسبت داده می‌شود. با استفاده از این مقادیر، می‌توان برای محاسبه مقادیر مشاهده‌پذیرهایی که از لحاظ تجربی قابل دسترسند، از روابط نظریه جنبشی استفاده کرد.

شبیه‌سازی کامپیوتری بیش از آنکه بر پایه اجزاء حقیقی بنا شده باشد، بر پایه مدل‌ها بنا شده است. بنابراین علم شبیه‌سازی توسط ساختن مدل محدود شده است. به منظور واضح شدن مطلب لازم است به تفاوت‌های میان مدل‌سازی و شبیه‌سازی پردازیم و ببینیم که این دو علم چگونه با همدیگر فهم جدیدی از یک مسئله ایجاد می‌کنند.

## ۳-۱-۱ مدل‌سازی در مقابل شبیه‌سازی

از آنجا که امروزه تحلیل‌های نظری به طور وسیعی از طریق مدل‌سازی یا شبیه‌سازی یا هر دو انجام می‌شوند، بررسی تفاوت‌های بین آنها آموزنده خواهد بود.

یک مدل تلاش برای جداکردن و کنار گذاشتن برهم‌کنش‌هایی است که روی مشاهده‌پذیرهای تحت مطالعه بی‌تأثیر یا کم‌تأثیرند. بنابراین مدل، ساده‌تر از سیستم تحت بررسی است. مدل به حالت‌های کمتری دسترسی دارد. به عبارت دیگر مدل زیرمجموعه یا زیرسیستمی از سیستم اصلی است. خروجی‌های یک مدل برای آن دسته از ورودی‌ها که مدل برای آنها به کار رفته، مطابق با خروجی‌های سیستم اصلی است.

در مقابل، یک شبیه‌سازی پیچیده‌تر از سیستمی است که بررسی می‌شود و در حالت کلی می‌تواند نسبت به سیستم اصلی به حالت‌های بیشتری دسترسی داشته باشد. شبیه‌سازی قیدها را بگونه‌ای تحمیل می‌کند که لااقل برای مجموعه محدودی از ورودی‌ها، خروجی‌های شبیه‌سازی شده مطابق با خروجی‌های سیستم واقعی باشند.

فرض کنید می‌خواهیم گاز آرگون را شبیه‌سازی کنیم. پس از شناسایی سیستم واقعی و مشاهده‌پذیرهایی که قرار است مورد مطالعه قرار دهیم، یک مدل مناسب برای آن ارائه می‌دهیم. به عنوان مثال ذراتی با تقارن کروی و بدون ساختار داخلی که با پتانسیل لnard - جونز<sup>۱۳</sup> برهم‌کنش می‌کنند، مدل خوبی برای این سیستم است. پتانسیل لnard - جونز ساده‌تر از پتانسیل برهم‌کنشی اتم‌های آرگون است. چون این اتم‌ها کاملاً کروی نیستند و برهم‌کنش بین آنها قابل تفکیک به پتانسیل جفت اتم‌ها نیست. پس از انتخاب مدل می‌توانیم آن را شبیه‌سازی کنیم. باید دقت شود که ما سیستم واقعی مثلاً اتم‌های آرگون، آب یا پروتئین را شبیه‌سازی نمی‌کنیم. آنچه مورد شبیه‌سازی واقع می‌شود، مدل مولکولی ارائه شده برای سیستم است.

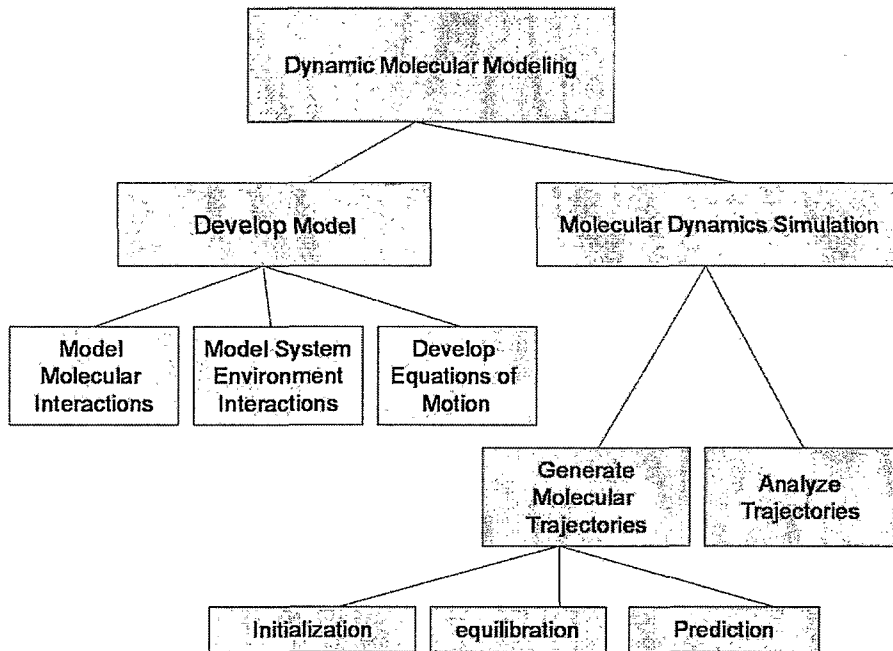
## ۲-۱ شبیه‌سازی به روش دینامیک مولکولی

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، حرکت مولکول‌ها را در مدل‌های جامدات، مایعات و گازها محاسبه می‌کند. این شیوه شبیه‌سازی درک جدیدی از یک ایده قدیمی در علم است که بیان می‌کند: اگر برای سیستمی تمام شرایط اولیه و نیز نیروهای برهم‌کنشی معلوم باشند، رفتار آن در زمانهای بعد قابل محاسبه و پیشگویی است.

اساس این روش بدست آوردن مسیرهای مولکولی است که توضیح می‌دهد مکان‌ها، سرعت‌ها و شتاب‌های

13) Lennard-Jones Potential

ذرات سیستم چگونه با زمان تغییر می‌کنند. سپس مسیرهای بدست آمده تحلیل می‌شوند و از آنها خواص مورد توجه استخراج می‌شود. تفاوت اساسی این روش با سایر روش‌های شبیه‌سازی در این است که مسیرهای حرکت به شیوه‌ای جبری یعنی از حل معادلات دیفرانسیل حرکت حاصل می‌شوند. لازم به توجه است که اصطلاح دینامیک مولکولی فقط در این معنا به کار برده نمی‌شود. گاهی این کلمه به کاربردهای دیگری ارجاع داده می‌شود، مانند آنچه که به دینامیک شبکه<sup>۱۴</sup> و یا مکانیک مولکولی<sup>۱۵</sup> مربوط می‌شود.



شکل ۱-۱: گام‌های اصلی مدل‌سازی دینامیک مولکولی

### ۳-۱ مراحل مدل‌سازی دینامیک مولکولی

همانطور که در شکل ۱-۱ دیده می‌شود یک مدل‌سازی دینامیکی شامل دو قسمت عمده است که در زیر به توضیح مختصری از هر یک می‌پردازیم.



## ۱-۳-۱ ساختن مدل

همانطور که قبلاً اشاره کردیم آنچه که شبیه‌سازی می‌کنیم، سیستم واقعی نیست بلکه مدل آن می‌باشد. ساختن مدل شامل انتخاب یک تابع پتانسیل مناسب است که خود از دو قسمت تشکیل شده است:

- برهم‌کنش مولکول‌ها با یکدیگر

- برهم‌کنش بین مولکول‌ها و محیط اطرافشان

این تابع پتانسیل به طور ضمنی شکل هندسی مولکول‌ها یا به طور دقیق‌تر توزیع ابرهای الکترونی آنها را توضیح می‌دهد. پس تعیین تابع پتانسیل دقیقاً به معنای تعریف یک مدل کامل است. زیرا این تابع علاوه بر مشخص کردن نوع نیروها، تقارن‌های مولکول‌ها را نیز بیان می‌کند. ساده‌ترین حالت، کار کردن با مولکول‌های متقارن کروی است و به همین دلیل اکثر مدل‌ها با فرض کروی بودن مولکول‌ها ساخته می‌شوند. الگوریتم‌های دینامیک مولکولی برای این نوع تقارن به دو دسته الگوریتم برای کره‌های سخت و کره‌های نرم تقسیم می‌شود. در سیستم‌هایی که برهم‌کنش بین مولکول‌ها بسیار ناچیز باشد، مانند گاز کامل، بطوریکه بتوان این برهم‌کنش‌ها را به برخوردهای کشسان بین آنها محدود کرد، می‌توان الگوریتم کره سخت را برای شبیه‌سازی مورد استفاده قرار داد. در این مورد نیروهای بین مولکول‌ها گسسته بوده و تابع پتانسیل به شکل زیر در نظر گرفته می‌شود:

$$U(r) = \begin{cases} \infty & r \leq \sigma \\ 0 & r > \sigma \end{cases}$$

که در آن  $\sigma$  شعاع کره را نشان می‌دهد.

الگوریتم کره‌های سخت نتایج چندان دقیقی در اختیار نمی‌گذارد. با وجود این فوایدی دارد از جمله اینکه در آن معادلات حرکت به معادلات جبری ساده‌ای تقلیل می‌یابند که حل آنها بسیار ساده‌تر از حل معادلات دیفرانسیلی است. به علاوه به علت کوتاه برد بودن نیروها اجرای این الگوریتم سریع و کم‌هزینه است.

در الگوریتم کره‌های نرم نیروها توابع پیوسته‌ای از فواصل بین مولکولی بوده و تابع پتانسیل یک رابطه تحلیلی مشخص خواهد داشت. برای  $N$  تا از چنین مولکول‌هایی می‌توان تابع پتانسیل را به صورت  $U(r^N) \equiv U(r_1, r_2, \dots, r_N)$  نمایش داد. در اکثر شبیه‌سازی‌ها انرژی پتانسیل کل به صورت مجموع

پتانسیل برهم‌کنشی بین زوج‌ها فرض می‌شود.<sup>۱۶</sup>

$$U(r^N) = \sum_{j>i} \sum_{i=1}^N U(r_{ij})$$

که  $U(r_{ij})$  تابع پتانسیل مربوط به برهم‌کنش مولکول‌های شماره  $i$  و  $j$  است و  $r_{ij}$  فاصله بین آنها را نشان می‌دهد.

نیروی وارد بر مولکول شماره  $i$  از طرف تمام مولکول‌های دیگر با استفاده از این تابع به صورت زیر بدست می‌آید:

$$\vec{F}_i = -\frac{\partial U(r^N)}{\partial \vec{r}_i}$$

که عملگر گرادینان است:

$$\frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} \equiv \left( \frac{\partial}{\partial x_i}, \frac{\partial}{\partial y_i}, \frac{\partial}{\partial z_i} \right)$$

قسمت دوم مدل مربوط به شرایط مرزی است که در آن نحوه برهم‌کنش با محیط اطراف توسط یک تابع پتانسیل مشخص می‌شود. شرایط فیزیکی که تحت آن شبیه‌سازی صورت می‌گیرد به طور گسترده‌ای بر شرایط مرزی تأثیر می‌گذارد. البته در روشی که توسط آن شرایط مرزی در مدل محقق می‌شوند، آزادی عمل وجود دارد. به عنوان مثال در مسئله‌ای که اینجا حل می‌شود، شرایط مرزی با در نظر گرفتن چگالی‌های متفاوت برای سیال و دیوار و پارامترهای متفاوت برای توابع پتانسیل مربوط به برهم‌کنش سیال - سیال و دیوار - سیال، مشخص می‌شود. همچنین برای نشان دادن آمیخته بودن شرایط مرزی پارامترهای تابع پتانسیل مربوط به برهم‌کنش دیوار - سیال در قسمت‌های مختلف دیوار، یعنی در نواحی جاذب و غیر جاذب، متفاوت در نظر گرفته می‌شود. ساده‌ترین حالت وقتی پیش می‌آید که سیستم ایزوله است. در این صورت هیچ برهم‌کنشی بین سیستم و محیط وجود ندارد. بنابراین تابع پتانسیل مربوط به برهم‌کنش بین مولکول‌ها به تنهایی مدل مناسبی برای سیستم ارائه می‌دهد.

تابع پتانسیل ندارد - جونز

استفاده از پتانسیل ندارد - جونز که تابعی تجربی است، در دینامیک مولکولی بسیار مرسوم است. این تابع تجربی برهم‌کنش وان‌دروالس - لندن بین دو اتم گاز ایده‌آل را بر حسب فاصله بین مراکز آنها توصیف می‌کند. این پتانسیل که اولین بار در سال ۱۹۲۴ توسط لندارد - جونز معرفی شد، یک مدل مفید برای دو کره نرم است.

(۱۶) این فرض pairwise additivity گفته می‌شود.

سادگی و دقت این تابع استفاده از آن را در دینامیک مولکولی مرسوم ساخته است. شکل این تابع به صورت زیر است.

$$U(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

که در آن  $r$  فاصله دو اتم،  $\varepsilon$  پارامتر انرژی یعنی میزان پتانسیل وقتی که این پتانسیل کمینه می‌شود (عمق چاه پتانسیل) و  $\sigma$  فاصله‌ای است که در آن پتانسیل فوق صفر می‌شود. از تابع پتانسیل می‌توان برای محاسبه نیرو استفاده کرد. به بیان ریاضی، نیرو مشتق جهت‌دار پتانسیل است.

$$\vec{F}(r) = \frac{24\varepsilon}{r^2} \left[ 2 \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \vec{r}$$

این رابطه نشان می‌دهد که نیرو در فاصله نزدیک دافعه و در فاصله دور جاذبه است.

پس از مشخص شدن تابع پتانسیل باید معادلات حرکت را به منظور محاسبه مسیرهای مولکولی در مرحله شبیه‌سازی فرمول‌بندی کنیم. در قسمت دینامیک مولکولی راجع به انواع معادلات حرکت صحبت خواهیم کرد.

### ۲-۳-۱ شبیه‌سازی مدل

بعد از ساختن مدل نوبت به شبیه‌سازی آن می‌رسد که خود شامل دو مرحله است:

۱- محاسبه مسیرهای مولکولی بر حسب زمان

۲- آنالیز این مسیرها برای بدست آوردن کمیات مورد نظر

محاسبه مسیرها در طی سه مرحله نشان داده شده در شکل ۱-۱ صورت می‌گیرد. در اولین مرحله (initialization) سیستم واحد مناسبی برای بیان کمیات فیزیکی مشخص می‌کنیم. به علاوه مقادیر اولیه کمیت‌های دینامیکی یعنی مکان‌ها و سرعت‌ها و در بعضی از الگوریتم‌ها مشتقات مراتب بالاتر مکان را ایجاد می‌کنیم. initialization تنها مرحله‌ای است که در آن از تولید تصادفی و توزیع احتمال استفاده می‌شود و در سایر قسمت‌های شبیه‌سازی، رویکرد، کاملاً تعیناً است. در مرحله متعادل‌سازی (equilibration) سعی می‌کنیم سیستم را به شرایط تعادلی نزدیک کنیم تا به این ترتیب نتایج شبیه‌سازی به شرایط اولیه ایجاد شده در مرحله قبلی وابسته نباشد. بعد از مطمئن شدن از تعادل، می‌توانیم مسیرهای حرکت را با حل عددی

معادلات دیفرانسیل بدست آورده و سپس خواص مورد نیاز را از آنها استخراج کنیم. این عملیات در مرحله production صورت می‌گیرد.

### مسیرهای فضای فاز

اکثر شبیه‌سازی‌های کامپیوتری بر اساس فرضیات مکانیک کلاسیک استوار هستند. بنابراین در مواجهه با سیستمی شامل  $N$  ذره کلاسیکی استفاده از مفهوم فضای فاز بسیار مفید خواهد بود. در این عبارت کلمه کلاسیک به این معنی است که حرکت ذرات تشکیل‌دهنده سیستم از قوانین مکانیک کلاسیک پیروی می‌کند. این یک تقریب عالی برای گستره وسیعی از مواد است. فقط وقتی انتقال و دوران اتم‌ها یا مولکول‌های سبک ( $H_2, He$ ) یا حرکت نوسانی با فرکانس  $\nu$  بطوریکه  $h\nu > k_B T$  باشد، باید نگران آثار کوانتومی باشیم.

مسیرهای حرکتی که به دست آمده‌اند باید علاوه بر مکان مولکول‌ها، تکانه آنها را نیز شامل شوند. ترکیبی از  $N$  مولکول یا اتم کروی در نظر بگیرید. مکان مولکول  $\vec{r}_i$  و تکانه آن توسط  $\vec{p}_i$  نمایش داده می‌شود. با گذشت زمان نه تنها مکان مولکول‌ها بلکه تکانه آنها نیز در اثر برهم‌کنش‌ها متحول می‌شود. بنابراین  $\vec{p}_i$ ‌ها نیز مانند  $\vec{r}_i$ ‌ها تابعی از زمان خواهند بود.

فضایی شامل  $3N$  مختصه مکان و  $3N$  مختصه تکانه فرض کنید. با معلوم بودن مکان و تکانه تمام ذرات در یک لحظه خاص می‌توانیم حالت سیستم را به صورت یک نقطه در این فضا مشخص کنیم. این فضای  $6N$  بعدی «فضای فاز» گفته می‌شود. با گذشت زمان مکان‌ها و تکانه‌های ذرات تغییر می‌کنند. به این ترتیب نقطه نماینده دستگاه در فضای فاز مسیر مشخصی را طی می‌کند. هدف شبیه‌سازی بدست آوردن مسیر پیموده شده توسط نقطه نماینده دستگاه است که معادل با بدست آوردن تحول زمانی مکان و تکانه ذرات می‌باشد. برای این منظور کافی است قانون دوم نیوتن یا قوانین حرکت معادل را حل کنیم. برای واضح شدن مفاهیم گفته شده، مثال یک نوسانگر ساده یک بعدی را نظر بگیرید.

جرم  $m$  به فنری بسته شده است. سیستم جرم و فنر را ایزوله در نظر می‌گیریم. انرژی پتانسیل آن عبارت

است از:

$$U(x) = \frac{1}{2}\gamma x^2$$

که  $x$  جابجایی جرم از وضع تعادل و  $\gamma$  ثابت فنر است.