

به نام خدا



شبه سازی دینامیک مولکولی با

Lammps

(بسته نرم افزاری متن باز)

مؤلفان :

دکتر نیر رزم آرا

استادیار گروه مهندسی مکانیک ، دانشگاه شهید مدنی آذربایجان

مهندس ایمان تصدیقی

عضو هیات علمی دانشکده مهندسی مکانیک موسسه غیر انتفاعی صنعتی فولاد

مهندس صادق سلیمانی آذر

کارشناس ارشد مهندسی مکانیک، دانشگاه شهید مدنی آذربایجان

فهرست مطالب

فصل اول: شبیه سازی دینامیک مولکولی	۱۷
۱-۱ مقدمه	۱۷
۲-۱ روش های شبیه سازی سیستم های مولکولی	۱۸
۳-۱ برهمکنش های بین مولکولی	۲۳
۱-۳-۱ تابع پتانسیل لنارد- جونز	۲۵
۲-۳-۱ پتانسیل قطع شده	۳۰
۳-۳-۱ برهمکنش بین سیال و سطح جامد	۳۱
۴-۱ مکان و سرعت اولیه ذرات	۳۲
۱-۴-۱ انتخاب پیکربندی اولیه	۳۲
۲-۴-۱ سرعت های اولیه	۳۴
۵-۱ شرایط مرزی	۳۶
۶-۱ انتگرال گیری زمانی	۴۰
۱-۶-۱ الگوریتم ورله	۴۱
۲-۶-۱ الگوریتم سرعت ورله	۴۲
۷-۱ مجموع های آماری و دماهای سیستم	۴۳
۱-۷-۱ دماها یا مجموع های آماری دما ثابت	۴۴
۱-۷-۱-۱ مقیاس بندی سرعت	۴۴
۸-۱ تعادل سیستم	۴۷
۱-۸-۱ نمونه برداری	۴۷

۴۸.....	۲-۸-۱ محاسبه متوسط آماری کمیت‌های ترمودینامیکی
۴۹.....	۱-۲-۸-۱ دما
۴۹.....	۲-۲-۸-۱ انرژی کل و آنتالپی
۵۱.....	۳-۲-۸-۱ تانسور تنش
۵۳.....	فصل دوم: آشنایی با لمپس
۵۳.....	۱-۲ معرفی لمپس
۵۸.....	۲-۲ ساختار کد ورودی لمپس
۶۲.....	۳-۲ نصب لمپس بر روی اوبونتو و ویندوز
۶۳.....	۱-۳-۲ نصب لمپس بر روی اوبونتو ۱۴.۰۴
۶۴.....	۲-۳-۲ نصب لمپس بر روی ویندوز
۷۱.....	فصل سوم: دستورهای کاربردی لمپس
۷۲.....	۱-۳ دستورهای مربوط به مرحله آغازین و قالب‌بندی
۷۲.....	۱-۱-۳ دستور units
۷۷.....	۲-۱-۳ دستور dimension
۷۸.....	۳-۱-۳ دستور boundary
۸۰.....	۴-۱-۳ دستور atom_style
۸۶.....	۲-۳ دستورهای مربوط به تعریف اتم‌ها و دامنه شبیه‌سازی
۸۶.....	۱-۲-۳ دستور lattice
۹۱.....	۲-۲-۳ دستور region
۱۰۱.....	۳-۲-۳ دستور create_box
۱۰۵.....	۴-۲-۳ دستور create_atoms

۱۱۰.....	۳-۳ دستورهای مربوط به تنظیمات و پیکربندی
۱۱۰.....	۳-۳-۱ دستور mass
۱۱۲.....	۳-۳-۲ دستور neighbor
۱۱۵.....	۳-۳-۳ دستور pair_style
۱۲۷.....	۳-۳-۴ دستور group
۱۲۷.....	دستور group
۱۳۵.....	۳-۳-۵ دستور fix
۱۴۲.....	۳-۳-۶ دستور fix nve
۱۴۶.....	۳-۳-۷ دستور fix nvt /npt/nph
۱۵۲.....	۳-۳-۸ دستور variable
۱۵۶.....	۳-۳-۹ دستور compute
۱۶۴.....	۳-۳-۱۰ دستور timestep
۱۶۵.....	۳-۴ دستورهای مربوط به اجرای شبیه‌سازی
۱۶۵.....	۳-۴-۱ دستور thermo
۱۶۶.....	۳-۴-۲ دستور thermo_style
۱۷۲.....	۳-۴-۳ دستور dump
۱۸۱.....	۳-۴-۴ دستور run
۱۸۴.....	فصل چهارم: نمونه‌هایی از کدهای شبیه‌سازی با لمپس
۱۸۷.....	۴-۱ نمونه‌ای از کد لمپس در زمینه مکانیک سیالات: جریان کوئت و پوآزوی
۱۸۷.....	۴-۱-۱ شبیه‌سازی جریان کوئت
۱۹۶.....	۴-۱-۲ شبیه‌سازی جریان پوآزوی

۲-۴ نمونه‌ای از کد لمپس درزمینه فیزیک: شبیه‌سازی سیستم حاوی ذرات دوقطبی	۱۹۸
۳-۴ نمونه‌ای از کد لمپس درزمینه محاسبه خواص ماکروسکوپی: ویسکوزیته	۲۰۸
۱-۳-۴ محاسبه ویسکوزیته سیال لناردجونز	۲۰۸
۲-۳-۴ محاسبه ویسکوزیته آب با استفاده از پتانسیل های مختلف	۲۱۵
۴-۴ نمونه‌ای از کد لمپس درزمینه مکانیک جامدات و مواد: پدیده پخش در آلیاژ زیرکونیوم-هیدروژن	۲۲۹
فهرست منابع	۲۳۹
ضمایم	۲۴۳
ضمیمه الف: نصب سیستم‌عامل اوبونتو ۱۴.۰۴	۲۴۳
ضمیمه ب: روش الحاق کردن پکیج خارجی در لمپس	۲۵۶
ضمیمه ج: مستندات پتانسیل ها	۲۵۸
ضمیمه د: نصب نرم‌افزار VMD در لینوکس	۲۶۸
ضمیمه ه: فولدر Tools	۲۷۱

فهرست اشکال

- شکل ۱-۱. فلوچارت کلی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی..... ۲۰
- شکل ۱-۲. روش‌های مدل‌سازی سیستم‌های نانو و درجه معین بودن آن‌ها..... ۲۲
- شکل ۱-۳. روش‌های مدل‌سازی در مقیاس‌های طولی مختلف ۲۳
- شکل ۱-۴. پتانسیل لنارد- جونز برحسب فاصله بین مولکولی ($\epsilon = \sigma = 1$) [3]..... ۲۷
- شکل ۱-۵. تقسیم پتانسیل لنارد- جونز به قسمت‌های جاذبه و دافعه [3]..... ۲۹
- شکل ۱-۶. نمایی از انواع ساختارهای شبکه‌ای استاندارد ۳۳
- شکل ۱-۷. انواع ساختارهای مختلف شبکه FCC..... ۳۴
- شکل ۱-۸. طرحواره‌ای از شرط مرزی تناوبی در یک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی [3]..... ۳۷
- شکل ۱-۹. طرحواره‌ای از جزئیات روش فهرست همسایه ورله [3]..... ۳۹
- شکل ۱-۱۰. قفسه‌های نمونه‌گیری خواص در یک نانوکانال به صورت دو و سه‌بعدی ۴۸
- شکل ۳-۱. نمایشی ساده از قانون کولن..... ۱۲۷
- شکل ۴-۱. ساختار کلی کد ورودی لمپس به همراه نمونه کد ۱۸۶
- شکل ۴-۲. جریان کوئت درون کانال..... ۱۸۸

- شکل ۴-۳. جریان پوآزوی درون کانال..... ۱۹۶
- شکل ۴-۴. سیستم حاوی ذرات دوقطبی ۱۹۸
- شکل ۴-۵. پیکر بندی مولکولی برای مدل SPC/E برای ۱۰۰۰ مولکول آب ۲۲۸
- شکل ۴-۶. موقعیت اتمی ذرات هیدروژن که به صورت تصادفی در ساختار زیرکونیوم پخش شده اند ... ۲۲۹
- شکل ج-۱. منحنی پتانسیل لنارد جونز ۲۵۹
- شکل ج-۲. پتانسیل مورس ۲۶۱
- شکل ج-۳. اعمال پتانسیل نامناسب لنارد جونز به نانولوله کربنی ۲۶۷

فهرست جداول

جدول ۱-۳ مقادیر بی بعد کمیت‌ها در سیستم واحد lj	۷۳
جدول ۲-۳ ابعاد کمیت‌ها در سیستم واحدهای مختلف.....	۷۴
ادامه جدول ۲-۳ ابعاد کمیت‌ها در سیستم واحدهای مختلف.....	۷۶
جدول ۳-۳ مشخصه‌های اضافی مربوط به هر سبک اتمی و انواع سیستم‌های فیزیکی مدل شده با آن‌ها.....	۸۲
جدول ۴-۳ کلیدواژه و آرگومان‌های دستور <code>lattice</code>	۸۸
جدول ۵-۳ سبک‌های مورد استفاده در دستور <code>region</code>	۹۲
جدول ۶-۳ کلیدواژه و آرگومان‌های دستور <code>region</code>	۹۴
جدول ۷-۳ فواصل شبکه برای دستور <code>lattice</code>	۱۰۰
جدول ۸-۳ کلیدواژه‌های دستور <code>create_box</code>	۱۰۳
جدول ۹-۳ سبک و آرگومان‌های دستور <code>create_atoms</code>	۱۰۶
جدول ۱۰-۳ کلیدواژه‌های دستور <code>create_atoms</code>	۱۰۷
جدول ۱۱-۳ پتانسیل‌های دستور <code>pair_style</code> و کاربرد آن‌ها.....	۱۱۹
جدول ۱۲-۳ سبک‌های دستور <code>group</code> و آرگومان‌های مربوط به هر یک از سبک‌ها.....	۱۲۸

جدول ۳-۱۳	سبک‌های مختلف fix در لمپس به همراه عملیات مربوطه	۱۳۶
جدول ۳-۱۴	لیست کلیدواژه‌ها و آرگومان‌های دستور fix nvt /npt/nph	۱۴۸
جدول ۳-۱۵	سبک‌ها و آرگومان‌های دستور variable	۱۵۳
جدول ۳-۱۶	آرگومان‌های سبک‌های equal و atom در دستور variable	۱۵۴
جدول ۳-۱۷	سبک‌های دستور compute و محاسبات مربوطه	۱۵۷
جدول ۳-۱۸	ارجاع به دستور compute	۱۶۲
جدول ۳-۱۹	مقدار پیش‌فرض برای گام زمانی در سیستم واحدهای مختلف	۱۶۵
جدول ۳-۲۰	آرگومان‌های سبک custom در دستور thermo_style	۱۶۷
جدول ۳-۲۱	مشخصات اتمی در دستور custom	۱۷۸
جدول ۳-۲۲	کلیدواژه‌ها و آرگومان‌های دستور run	۱۸۲
جدول ۴-۱	جرم ، بار و فاصله پیوند مولکولهای آب	۲۱۸
جدول ۴-۲	پارامترهای لنارد-جونز	۲۱۸

فهرست نمادها

نمادهای لاتین	
a	شتاب
d	درجه آزادی یا بعد سیستم
E_{total}	انرژی داخلی کل
F	نیروی بین مولکولی
I	ممان اینرسی
K_B	ثابت استفان بولتزمن $(3.18 \times 10^{-23} J / K)$
KE	انرژی جنبشی
m	جرم ذره
N	تعداد ذرات
P	فشار سیستم
PE	انرژی پتانسیل
r	بردار مکان
r_{ij}	فاصله بین اتم i ام و j ام
r_c	شعاع قطع
S_{ab}	مؤلفه های تنش
T	دما

T_A	دمای واقعی
T_D	دمای مورد نظر
t	زمان
V	حجم
v	سرعت
نمادهای یونانی	
$\vec{\tau}_{ij}$	گشتاور مغناطیسی
Φ	پتانسیل برهمکنش
σ	فاصله بین مولکولی (nm)
ε	شدت برهمکنش (J)
ξ	عدد تصادفی
ρ	چگالی عددی
λ	ضریب مقیاس بندی سرعت
λ	مسافت آزاد بین مولکولی
τ	زمان مشخصه
ω	سرعت زاویه‌ای
μ	ممان مغناطیسی
μ_0	نفوذ پذیری مغناطیسی خلاء ($4\pi \times 10^{-7} H / m$)
κ	کمیت ماکروسکوپی

زیرنویس‌ها	
i	اتم i ام
j	اتم j ام
$total$	کل
بالانویس‌ها	
LJ	لنارد-جونز
*	کمیت بی‌بعد

خط مشی کیفیت انتشارات مؤسسه فرهنگی هنری دیباگران تهران در عرصه کتاب‌هایی است که بتواند خواسته‌هایی به روز جامعه فرهنگی و علمی کشور را تا حد امکان پوشش دهد.

حمد و سپاس ایزد منان را که با الطاف بی‌کران خود این توفیق را به ما ارزانی داشت تا بتوانیم در راه ارتقای دانش عمومی و فرهنگی این مرز و بوم در زمینه چاپ و نشر کتب علمی دانشگاهی، علوم پایه و به ویژه علوم کامپیوتر و انفورماتیک گام‌هایی هرچند کوچک برداشته و در انجام رسالتی که بر عهده داریم، مؤثر واقع شویم.

گسترده‌گی علوم و توسعه روزافزون آن، شرایطی را به وجود آورده که هر روز شاهد تحولات اساسی چشمگیری در سطح جهان هستیم. این گسترش و توسعه نیاز به منابع مختلف از جمله کتاب را به عنوان قدیمی‌ترین و راحت‌ترین راه دستیابی به اطلاعات و اطلاع‌رسانی، بیش از پیش روشن می‌نماید.

در این راستا، واحد انتشارات مؤسسه فرهنگی هنری دیباگران تهران با همکاری جمعی از اساتید، مؤلفان، مترجمان، متخصصان، پژوهشگران، محققان و نیز پرسنل ورزیده و ماهر در زمینه امور نشر درصدد هستند تا با تلاش‌های مستمر خود برای رفع کمبودها و نیازهای موجود، منابعی پُر بار، معتبر و با کیفیت مناسب در اختیار علاقمندان قرار دهند.

کتابی که در دست دارید با همت "دکتر نیر رزم آرا - مهندس ایمان تصدیقی - مهندس صادق سلیمانی آذر" و تلاش جمعی از همکاران انتشارات میسر گشته که شایسته است از یکایک این گرامیان تشکر و قدردانی کنیم.

کارشناسی و نظارت بر محتوا: زهره قزلباش

در خاتمه ضمن سپاسگزاری از شما دانش‌پژوه گرامی درخواست می‌نماید با مراجعه به آدرس dibagaran.mft.info (ارتباط با مشتری) فرم نظرسنجی را برای کتابی که در دست دارید تکمیل و ارسال نموده، انتشارات دیباگران تهران را که جلب رضایت و وفاداری مشتریان را هدف خود می‌داند، یاری فرمایید.

امیدواریم همواره بهتر از گذشته خدمات و محصولات خود را تقدیم حضورتان نماییم.

مدیر انتشارات

مؤسسه فرهنگی هنری دیباگران تهران
Publishing@mftmail.com

پیشگفتار

امروزه شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای به‌عنوان ابزاری مناسب در کنار فعالیتهای آزمایشگاهی، کمک شایانی به فهم پدیده‌های فیزیکی می‌کند. به دلیل محدودیت‌های آزمایشگاهی در مقیاس میکرو و نانو، علم محاسباتی نانو به‌عنوان مکمل علوم آزمایشگاهی، محققان را در فهم پدیده‌ها در مقیاس میکرو و نانو یاری می‌نماید. در این میان روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، به‌عنوان یک روش معین، در میان روش‌های شبیه‌سازی مولکولی، در سال‌های اخیر مورد توجه محققان قرار گرفته است.

با توجه به گسترش روزافزون استفاده از نرم‌افزارهای منبع باز و رویکرد مثبت محققان نسبت به این‌گونه بسته‌های نرم‌افزاری، شبیه‌سازی‌های مولکولی نیز پیشرفت قابل توجهی در این زمینه داشته است. یکی از بسته‌های نرم‌افزاری مهم و پرکاربرد، بسته نرم‌افزاری لمپس است که در دانشگاه سندپای ایالات متحده پایه ریزی شده است. پیشرفت این بسته به‌گونه‌ای بوده که در سال‌های اخیر بالغ بر صدها کد توسط محققان دانشگاه‌های مختلف بدان اضافه شده است. در مجموعه حاضر، استفاده از این بسته نرم‌افزاری به همراه کدهای نمونه با استفاده از زبان برنامه‌نویسی C++ و همسو با کدهای پردازش موازی (MPI و GPU)، به منظور کاهش زمان شبیه‌سازی‌ها، در پیشبرد اهداف این کتاب ارائه می‌گردد.

با عنایت به تألیف، ترجمه و گردآوری چند کتاب طی سال‌های اخیر در خصوص اصول روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و گسترده‌ی استفاده از این روش در تحقیقات اخیر در دانشگاه‌های سراسر کشور و عدم وجود منبع فارسی در استفاده از نرم‌افزار لمپس در این حوزه نانو، بر آن شدیم که با توجه به تخصص گروه تألیف کتاب طی شش سال گذشته و انتشار مقالات متعدد در این موضوع، کتاب حاضر تهیه و تدوین گردد.

تمرکز اصلی کتاب بر معرفی و آموزش نرم‌افزار لمپس در حوزه شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی است. به همین دلیل صرفاً اصول و مبانی روش مزبور در حد نیاز توضیح داده می‌شود لذا در صورت نیاز به مفاهیم و اصول تخصصی به مراجع اصلی مندرج در انتهای کتاب مراجعه نمایید. در فصل اول، مقدماتی در باره روش دینامیک مولکولی بیان می‌شود و سپس در فصل دوم با نرم‌افزار لمپس آشنا شده و در فصل سوم ساختار کد نویسی برای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بیان شده و دستورات اساسی لمپس معرفی می‌گردند. در نهایت در فصل چهارم نمونه‌هایی از کدهای شبیه‌سازی سیستم‌های مختلف را بیان خواهیم نمود.

با امید به اینکه این اثر بتواند راهگشای محققان و دانش پژوهانِ فارسی زبان، در تحقیقات در سطح مولکولی باشد، از آنجا که هیچ اثری در گام اول به نوبه خود کامل و عاری از هرگونه نقصی نمی‌باشد لذا بی‌صبرانه منتظر شنیدن نظرات و پیشنهادهای شما جهت ارائه هر چه بهتر ویرایش و جلد بعدی کتاب هستیم.

نیر رزم آراء، ایمان تصدیقی، صادق سلیمانی آذر

IMAN.TASDIGHI@GMAIL.COM