به نام خدا

مستندات نرم افزار دینامیک مولکولی

نسخه: ۱/۰

توسعه دهنده:	حسین رضا عباسی: دانشجوی دکترا	
تهیه کننده مستند:	حسین رضا عباسی	
تاریخ تنظیم سند:	۱۶ / ۱۳۹۳/۰۱	

Market Code

فهرست مطالب

عنوان صفحه

فهرست مطالب ۱
فهرست شکل‌ها ..... د
فهرست جدول‌ها ..... د
۱- مقدمه ۲
۲- معرفي متغيرهاي نرم‌افزار ۳
۳- اعمال تنظيمات و ورودي‌هاي برنامه ۳۵
٤- خروجي‌هاي نرم‌افزار ۳۷

فهرست شکل‌ها

عنوان صفحه

شکل ۳-۱: فايل ورودی برنامه با نام input.txt ٥
شکل ۳-۲: فايل ورودی برنامه با نام data.txt ٥

فهرست جدول‌ها

عنوان صفحه

جدول ۲-۱: متغيرهاي عددي برنامه ۳
جدول ۲-۲: متغيرهاي برداري برنامه (آرايه‌هاي يکبعدي) ٤
جدول ۲-۳: متغيرهاي آرايه‌اي دوبعدي و سه بعدی برنامه ٤

Market Code

۱ مقدمه

کد نوشته شده، یک کد دینامیک مولکولی سه بعدی می‌باشد. این کد با توجه به توضیحاتی که در بخش قبل آمده، نوشته شده است. این کد قادر است یک جریان سیال مایع را در ابعاد نانو شبیه سازی نماید. این کد دینامیک مولکولی قادر است اتمهای تک اتمی را در ابعاد نانو با در نظر گرفتن پتانسیل لنارد جونز و با روش انتگرال گیری بیمن[۱] شبیه‌سازی نماید. کد شامل ۱۱ زیربرنامه[۲] می‌باشد که هر کدام از این زیر برنامه ها در ادامه به طور مفصل توضیح داده خواهد شد. در این گزارش نحوه استفاده از این نرم‌افزار شرح داده شده است.

Market Code

---

[۱] Beeman

[۲] Subroutine

۲ معرفي متغيرهاي نرم افزار

در جدول ۷-۱، جدول ۷-۲ و

جدول ۷-۳ به ترتيب متغيرهاي عددي، برداري (آرايه‌هاي يک‌بعدي) و آرايه‌هاي دوبعدي که در برنامه مورد استفاده قرار گرفته‌اند؛ به ترتيب حروف الفبا ليست شده است.

جدول ۲-۱: متغیرهای عددی[۱] برنامه

متغیر	تعریف	واحد
num	تعداد اتمهای کل حوزه‌ی شبیه‌سازی	–
dim	بعد شبیه‌سازی می‌باشد که مقدار آن برابر با ۳ است	–
time_step	بازه‌ی زمانی	–
rcut	شعاع Cutoff	–
ucut	انرژی پتانسیل لنارد جونز در فاصله Cutoff	–
qmass	جرم ترموستات نووز–هوور	–
temp	دمای تنظیم شده	K
Temp۱	دمای به دست آمده	K
pressure	فشار	–
rho	چگالی اتمهای موجود در حوزه‌ی شبیه‌سازی	–
ncelx	تعداد سلولها در جهت x	–
ncely	تعداد سلولها در جهت y	–
ncelz	تعداد سلولها در جهت z	–
rcelx	اندازه سلول در جهت x	–
rcely	اندازه سلول در جهت y	–
rcelz	اندازه سلول در جهت z	–
etot	انرژی کل	–
ksi	ضریب اصطکاک برای ترموستات نووز–هوور	–

[۱] Scalar Variables

Market Code

متغیر	تعریف	واحد
cyc	تعداد تکرار	–

جدول ۲-۲: متغیرهای برداری[۱] برنامه (آرایه‌های یک‌بعدی)

متغیر	تعریف	اندازه	واحد
Link	لیست لینک برای جستجوی اتمها	تعداد اتمها	–
V_ave	سرعت متوسط	۳	–

جدول ۲-۳: متغیرهای آرایه‌ای دوبعدی و سه بعدی برنامه

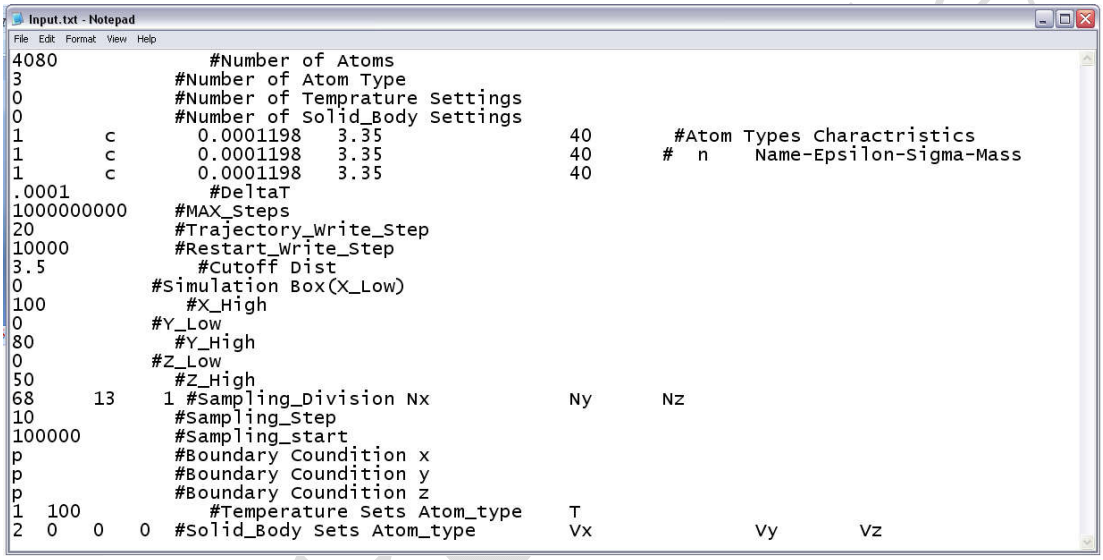
متغیر	تعریف	اندازه	واحد
Cell	ماتریس سلول	Ncelx×ncely×ncelz	–
atom	اطلاعات نوع اتم مبنی بر نوع، ε، σ و جرم اتم	ntype×٤	–
trace	ماتریس مربوط به دنبال کردن هر اتم برای محاسبه ضریب دیفیوژن	num×dim	–
pos	اطلاعات همه‌ی اتمها مبنی بر نوع، محل قرار گیری اولیه و شماره‌ی اتم	num× dim+۲	–
Vel	سرعت اتمها	num× dim	–
force	نیروی هر اتم	num× dim	–

[۱] Vector Variables

Market Code

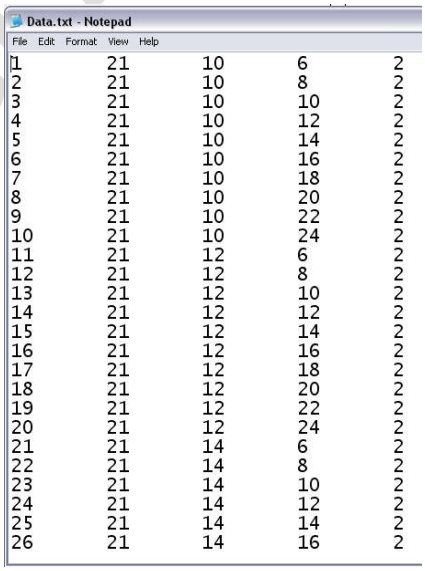
۳ اعمال تنظیمات و ورودي‌هاي برنامه

در شکل زیر متغیرهاي ورودي نرم‌افزار که در فایل input.txt آمده است، لیست شده است.



```
Input.txt - Notepad
File  Edit  Format  View  Help
4080              #Number of Atoms
3               #Number of Atom Type
0               #Number of Temprature Settings
0               #Number of Solid_Body Settings
1       c         0.0001198   3.35                40       #Atom Types Charactristics
1       c         0.0001198   3.35                40      #  n    Name-Epsilon-Sigma-Mass
1       c         0.0001198   3.35                40
.0001             #DeltaT
1000000000      #MAX_Steps
20              #Trajectory_Write_Step
10000           #Restart_Write_Step
3.5               #Cutoff Dist
0             #Simulation Box(X_Low)
100             #X_High
0             #Y_Low
80              #Y_High
0             #Z_Low
50              #Z_High
68      13     1 #Sampling_Division Nx            Ny      Nz
10              #Sampling_Step
100000          #Sampling_start
p               #Boundary Coundition x
p               #Boundary Coundition y
p               #Boundary Coundition z
1  100            #Temperature Sets Atom_type    T
2  0    0    0  #Solid_Body Sets Atom_type       Vx              Vy       Vz
```

شکل ۳-۱: فایل ورودی برنامه با نام input.txt



```
Data.txt - Notepad
File  Edit  Format  View  Help
1       21      10      6       2
2       21      10      8       2
3       21      10      10      2
4       21      10      12      2
5       21      10      14      2
6       21      10      16      2
7       21      10      18      2
8       21      10      20      2
9       21      10      22      2
10      21      10      24      2
11      21      12      6       2
12      21      12      8       2
13      21      12      10      2
14      21      12      12      2
15      21      12      14      2
16      21      12      16      2
17      21      12      18      2
18      21      12      20      2
19      21      12      22      2
20      21      12      24      2
21      21      14      6       2
22      21      14      8       2
23      21      14      10      2
24      21      14      12      2
25      21      14      14      2
26      21      14      16      2
```

شکل ۳-۲: فایل ورودی برنامه با نام data.txt

Mark

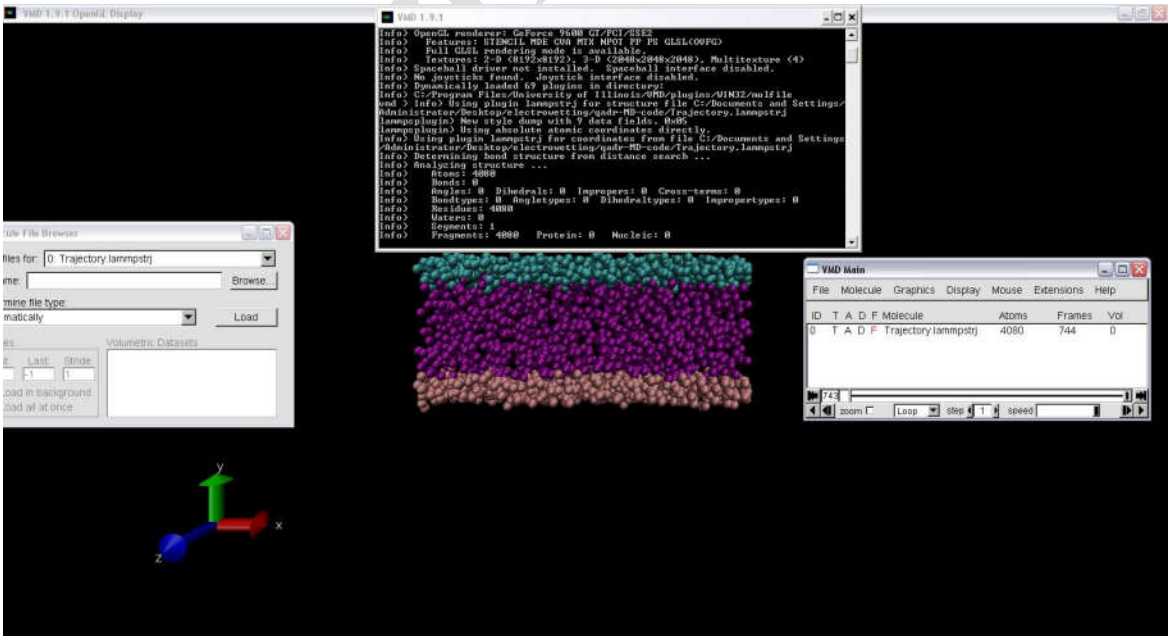
دمای سیستم شبیه‌سازی و چگالی آن در هنگام اجرای برنامه از کاربر خواسته می‌شود. توجه داشته باشید که این چگالی باید با چگالی اتمهای ورودی به کد برابر باشد برای مثال اگر چیدمان اتمهای موجود در فایل data.txt مقدار ۰.۸ می‌باشد در هنگام اجرا نیز مقدار چگالی باید ۰.۸ قرار داده شود. علاوه بر این در فایل input.txt همه‌ی موارد آورده شده از قبیل ε(۱۰^{۷} J/mole)، σ(آنگستروم)، جرم (gr/mole) و نوع هر اتم، بازه‌ی زمانی، گام زمانی، فاصله‌ی Cutoff، محدوده‌ی شبیه‌سازی (شامل x، y و z حوزه‌ی شبیه-سازی) و شرط مرزی باید توسط کاربر مقدار دهی شود. همچنین در فایل data.txt چیدمان اتمها به صورتی که کاربر می‌خواهد، صورت می‌گیرد. برای آشنایی بهتر است از فایل ورودی input.txt و data.txt که همراه کد می‌باشند، استفاده نمود. در هنگام اجرا نیز مقدار دما ۳۰۰ و مقدار چگالی را ۰.۸ قرار داده شود.

Market Code

٤ خروجي‌هاي نرم افزار

فايل خروجي اين كد يک فايل به نام Trajectory.lammpstrj مي‌باشد كه خروجي مانند نرم افزار LAMMPS توليد مي‌نمايد. اين فايل اطلاعات مربوط به موقعيت هر اتم در گام زماني مورد نظر را مي‌آورد. براي ديدن نتايج اين فايل خروجي كه به صورت انيميشن مي‌باشد، از نرم افزار VMD بايد استفاده گردد.

براي ديدن انيميشن ابتدا نرم افزار را نصب مي‌كنيم، سپس نرم افزار را اجرا مي‌كنيم، پس از اجرا سه صفحه ظاهر مي‌شود در پانل VMD Main از طريق File-> New Molecules پانل Molecule File Browser را باز مي‌كنيم و از طريق Browse فايل Trajectory.lammpstrj را آپلود مي‌نماييم و در نهايت با فشردن LOAD انيميشن خروجي كد ملاحظه خواهد شد. شكل ٢-٧ نمايي از پانل هاي مختلف نرم افزار VMD را نشان مي‌دهد.



شكل ٢-٧- پانلهاي مختلف نرم افزار VMD و مدل شبيه‌سازي شده در آن

علاوه بر این فایل test.dat نیز که شامل اطلاعات فشار، انرژی کل، دما و ضریب دیفیوژن می‌باشد با نرم افزار tecplot قابل نمایش است.

Market Code

مستندات آموزشی

Market Code