

دانشکده مهندسی مکانیک

# فصل چهارم: تکنیک های استفاده شده در شبیه سازی های رایانه ای

## دینامیک مولکولی

ارائه: حسین نجات

نیمسال دوم ۱۳۹۷

## رئوس مطالب

- مقدمه
- شرایط مرزی
  - شرایط مرزی متناوب
  - شرایط مرزی غیر متناوب
- شعاع قطع پتانسیل
- لیست همسایگی
- لیست مرتبط و تقسیم سلولی
- نیروهای برد بلند
- حرکت رندم



## مقدمه

- شبیه سازی دستگاههای گسسته (اتمی) سه مرحله را در بر می گیرد:

۱- ایجاد یک مدل از ماده مورد نظر (جامد، مایع، گاز، ساختار مولکولی و یا ترکیبی از این موارد)

۲- محاسبه مسیرهای اتمی مدل

۳- تجزیه و تحلیل این مسیرها جهت کسب مقادیر عددی خواص دستگاه

مرحله دوم موضوع اصلی شبیه سازی را تشکیل می دهد. اختلاف بین شیوه های مختلف شبیه سازی، اختلاف در محاسبه ی این مسیرها می باشد:

شبیه سازی را میتوان عمدتاً از ۳ طریق انجام داد:

الف- شیوه تعیینی محاسبه ی مسیرها (دینامیک مولکولی MD)

ب- شیوه وابسته به اصول احتمالی برای محاسبه مسیرها (مونت کارلو MC)

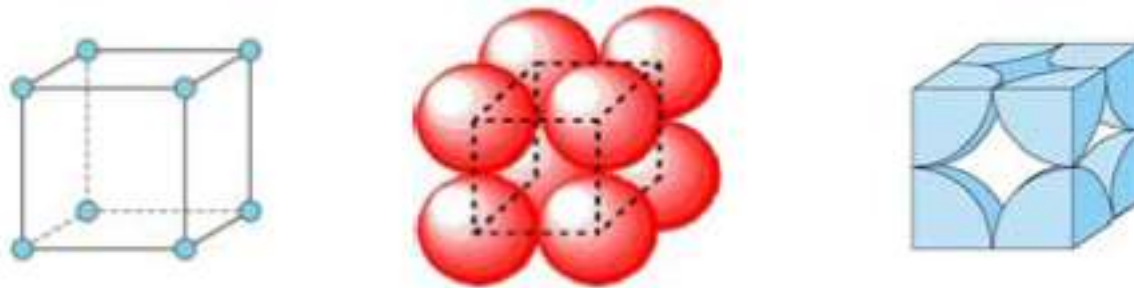
ج- شیوه تعیینی-آماری برای محاسبه مسیرها (دینامیک مولکولی استوکستیک Stochastic Molecular Dynamics)



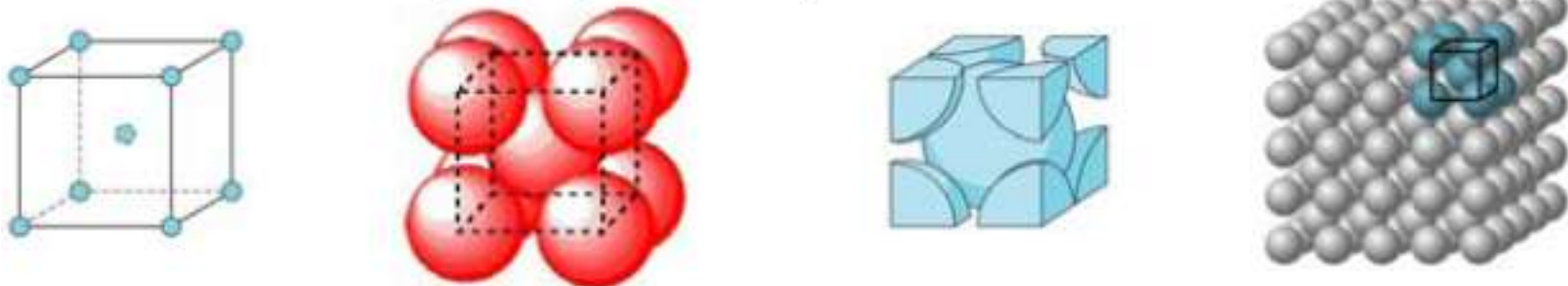
## برخی از اصول عمومی شبیه سازی: ایجاد ساختار اولیه

- در ابتدا بایستی ساختار یا پیکربندی اولیه سیستم ایجاد گردد.
- چینش اولیه اتم ها بستگی به ماده مورد نظر دارد. به عنوان مثال داریم:  
□ اگر ماده فلزی باشد ساختار کریستالی آن **SC**، **BCC**، **FCC** یا **HCP** است.

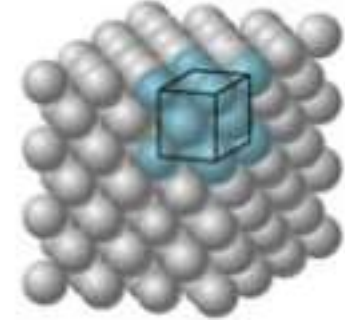
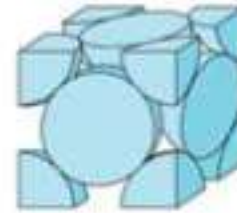
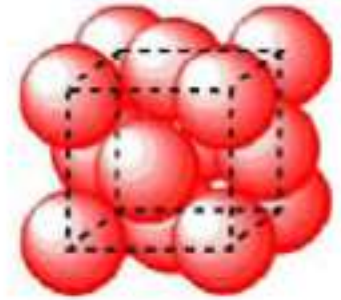
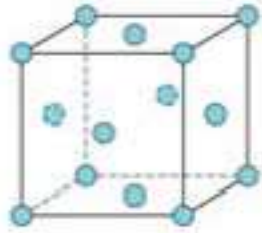
Simple Cubic (SC). Example: Po



Body Centered Cubic (BCC). Examples: Fe, Na, Li

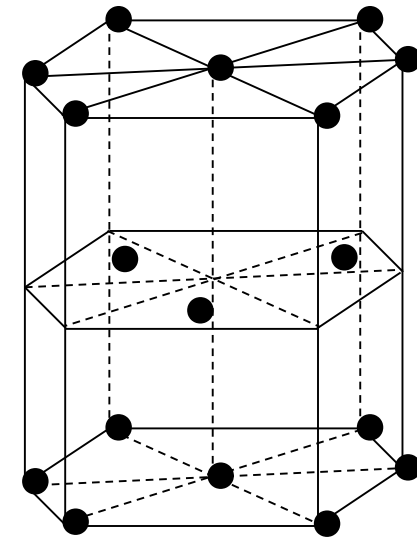


Face Centered Cubic (FCC). Examples: Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, Al, Pb



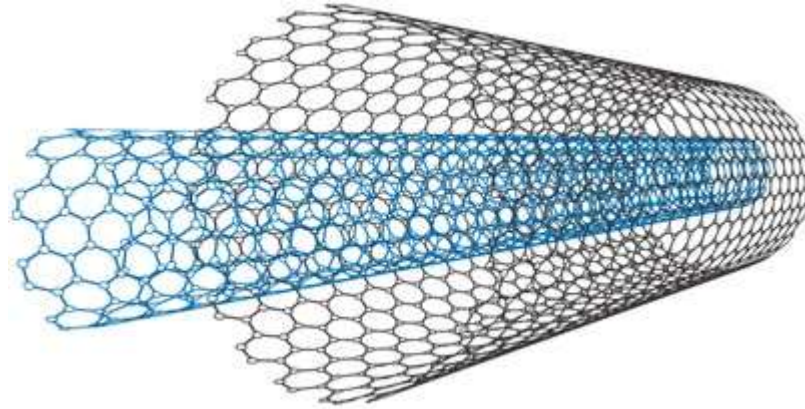
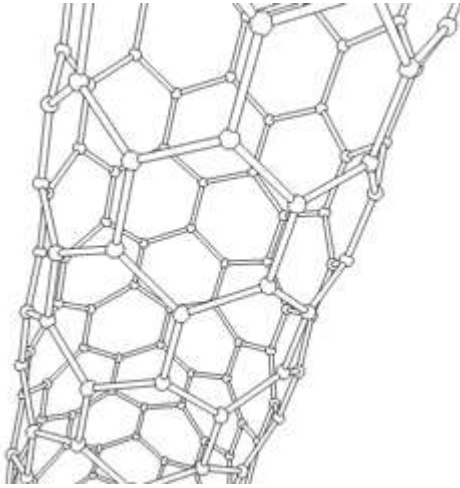
**Hexagonal Close Packing (HCP)**

Example: Be (Beryllium), Mg, Zn, Cd, Zr, Hf, Ti ( low temperature)

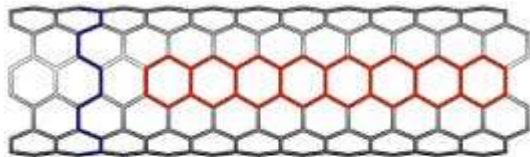


# Nanotubes

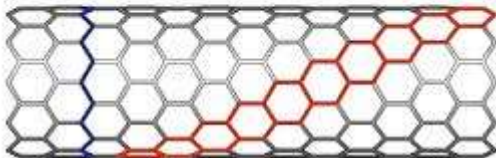
چینش ساختارهای کربنی (نانو تیوب ها) □



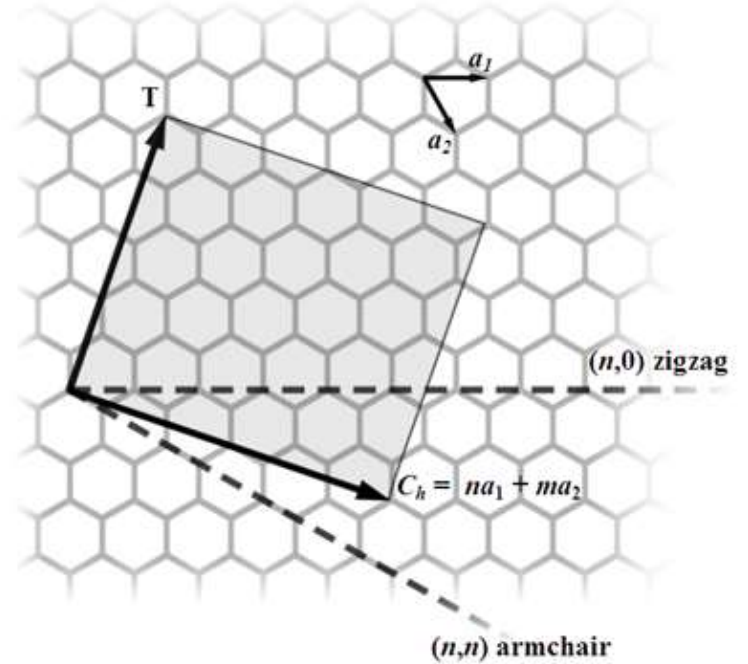
$$d = \frac{a}{\pi} \sqrt{(n^2 + nm + m^2)} = 78.3 \sqrt{((n + m)^2 - nm)} \text{pm},$$



Armchair

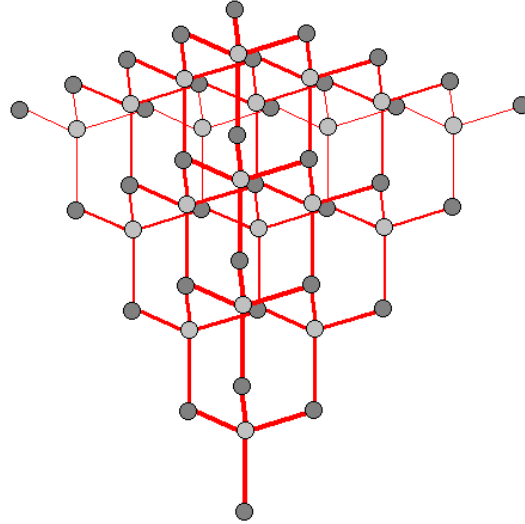
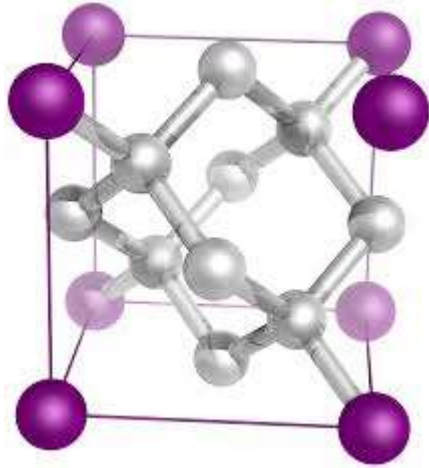


Zig-zag



چینش ساختارهای کربنی □

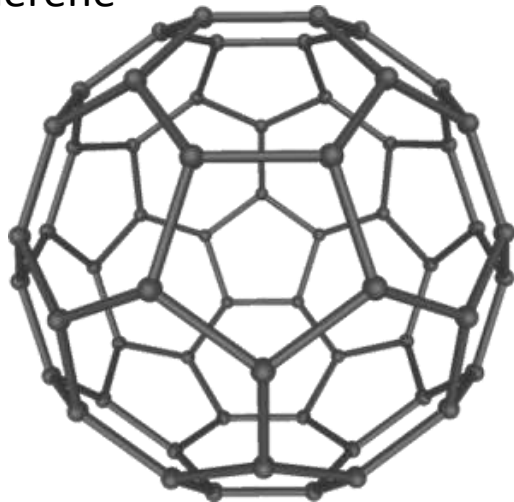
Diamond



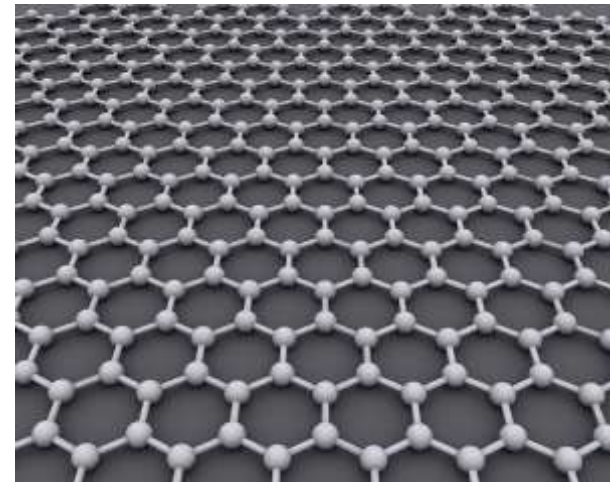
Nanobud: a carbon nanobud is a material that combines carbon nanotubes and spheroidal fullerenes



































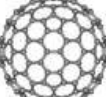
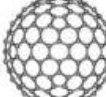

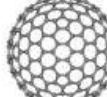
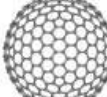

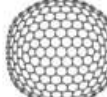
Fullerene



Graphene



# $C_n$ Fullerenes

 $C_{20}$	 $C_{24}$	 $C_{26}$	 $C_{28}$	 $C_{30}$	 $C_{32}$	 $C_{34}$	 $C_{36}$	 $C_{38}$	 $C_{40}$
 $C_{42}$	 $C_{44}$	 $C_{46}$	 $C_{48}$	 $C_{50}$	 $C_{52}$	 $C_{60}$	 $C_{70}$	 $C_{72}$	 $C_{74}$
 $C_{76}$	 $C_{78}$	 $C_{80}$	 $C_{82}$	 $C_{84}$	 $C_{86}$	 $C_{90}$	 $C_{92}$	 $C_{94}$	 $C_{96}$
 $C_{98}$	 $C_{100}$	 $C_{180}$	 $C_{240}$	 $C_{260}$	 $C_{320}$	 $C_{500}$	 $C_{540}$	 $C_{720}$	





## سایتهای مناسب برای ساختن ساختارهای کربنی

- ساختن نانوتیوب، گرافن، فولرین و ...

<http://turin.nss.udel.edu/research/tubegenonline.html>

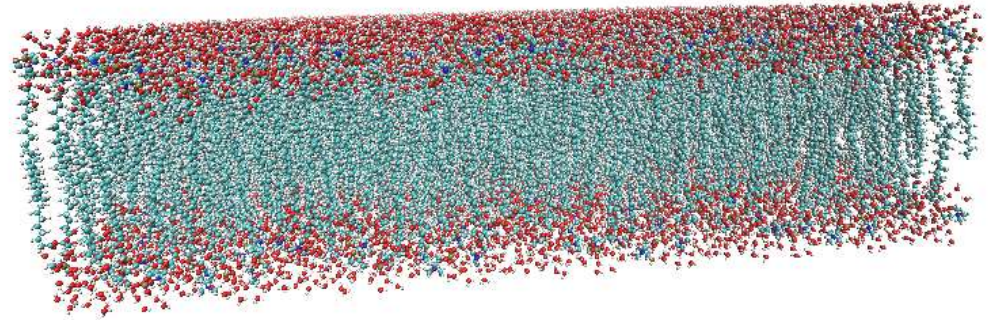
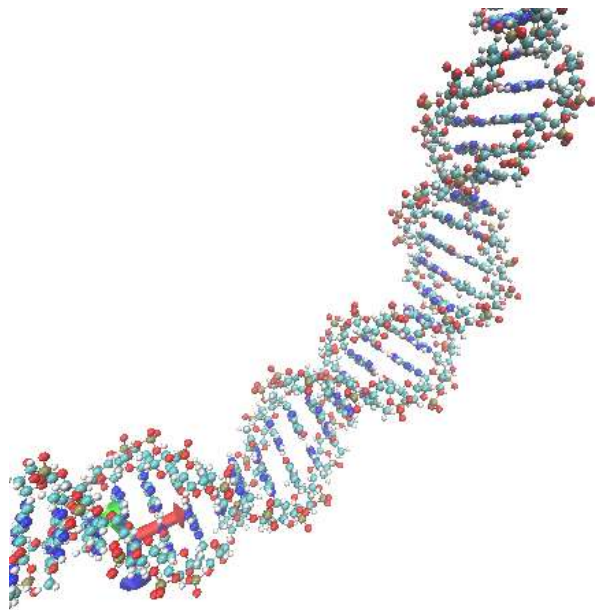
<http://wigner.elte.hu/science/?q=generator>

<http://www.jcrystal.com/products/wincnt/>

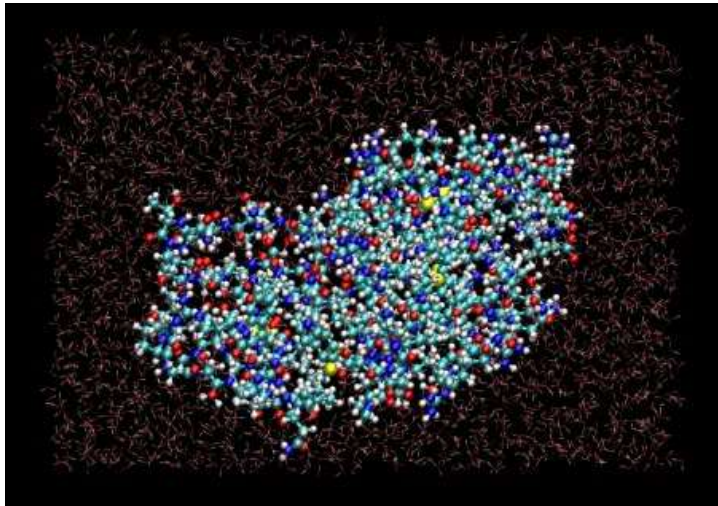
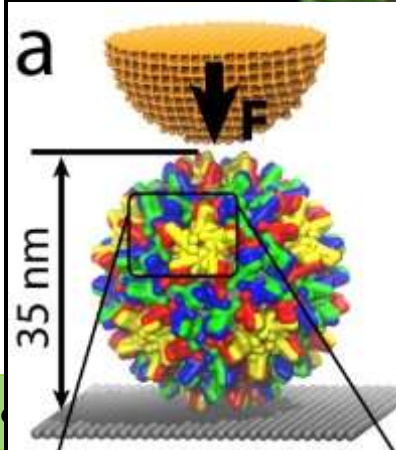
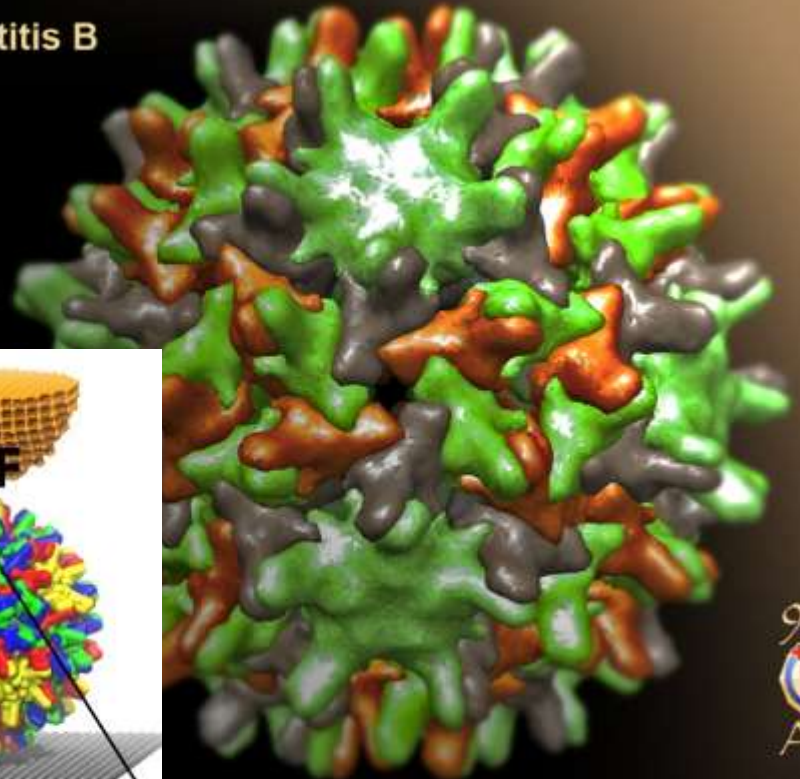
<http://www.nanotube.msu.edu/fullerene/>



• چالش ساختارهایی نظیر پروتئین ها و بیومولکول ها



Human Hepatitis B  
Viral Capsid  
PDB: 1qgt



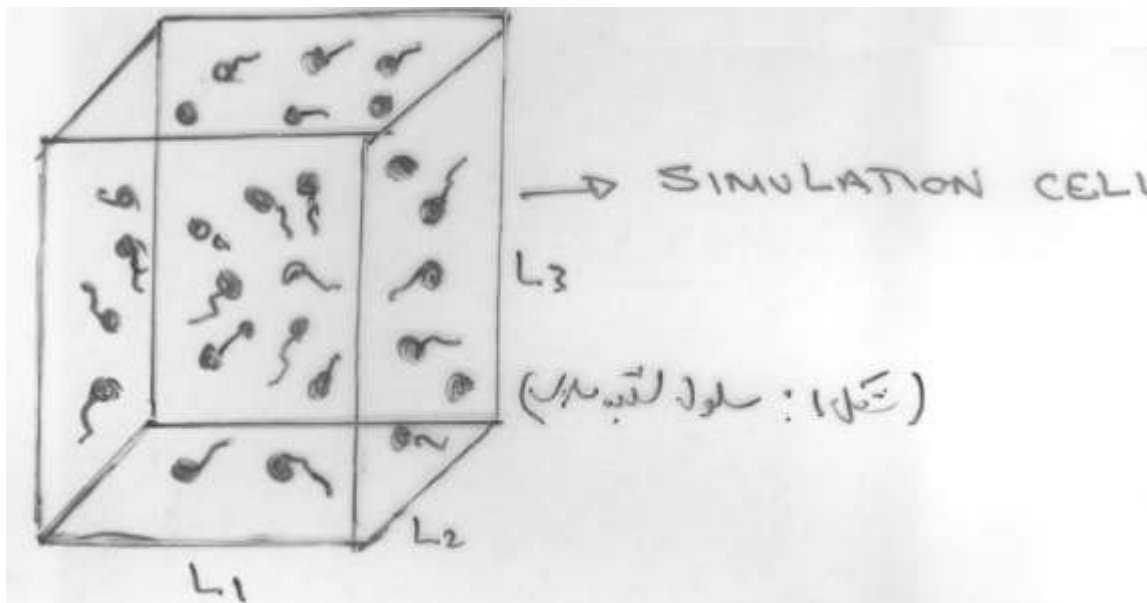
## سایتهای مناسب برای ساختن ساختارهای بیومولکولها

- سایتهایی که اطلاعات بیومولکولها را می توان از آنها استخراج نمود:
- <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>
- <http://www.bmrb.wisc.edu/>
- <http://www.ebi.ac.uk/pdbe/>
- <http://pd bj.org/>
- دانلود DNA با توالی مشخص (فایل **.pdb**)
- از طریق سایت <http://w3dna.rutgers.edu/index.php/rebuild> و انتخاب نوع مولکول (B-DNA) و توالی آن (ACCTGTACG) فایل pdb مورد نظر دانلود شد



## اعمال شرایط مرزی

- هدف اصلی شبیه سازی دینامیک مولکولی، محاسبه مسیرهای اتمی و مولکولی است. شبیه سازی با یک دستگاه کوچک انجام می شود. یعنی دستگاهی با  $N$  اتم ( $10 < N < 10^9$ ) در یک حجم ثابت  $V$  که سلول شبیه سازی را تشکیل می دهد.



- این دستگاه می تواند به عنوان مثال نشان دهنده یک گاز نمونه باشد.
- اندازه  $N$  وابسته به قدرت محاسباتی ما دارد.

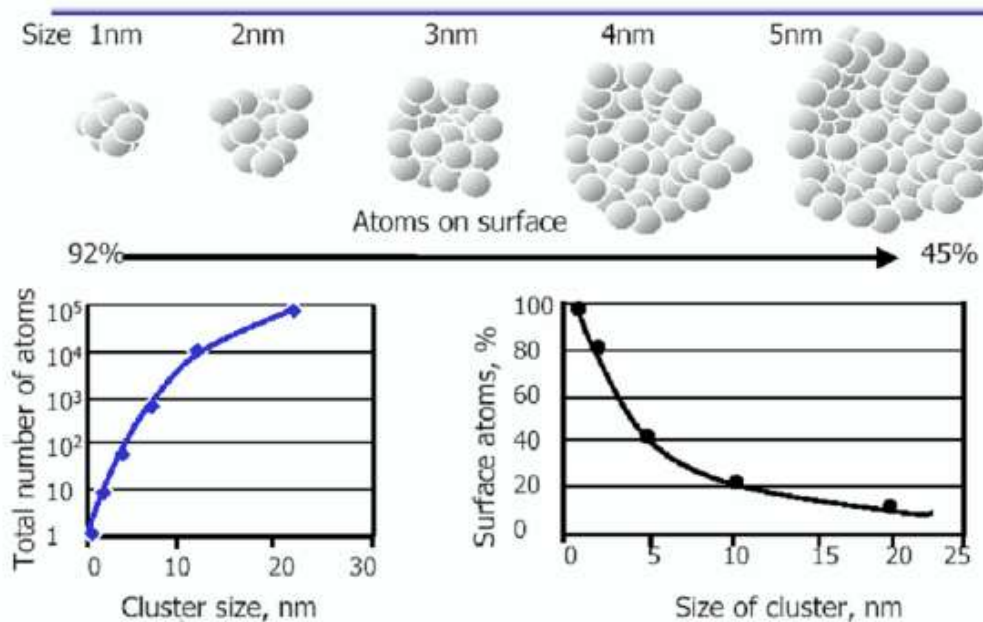
• اگر دستگاه مورد نظر برای مدلسازی یک سیستم در ابعاد میکرو یا ماکرو باشد مدلسازی این دستگاه تنها با یک سلول نمونه ایجاد اشکال می کند.

• انتخاب دستگاه کوچک باعث معرفی سطوح مصنوعی می شود زیرا در دستگاه ماکرو واقعی این

سطوح موجود نیستند. مثلا در یک گاز ۱۰۰۰ مولکولی بیش از ۴۸۸ مولکول بر روی این سطوح قرار می

گیرند و خواص این دستگاه کوچک به علت اهمیت اثرات سطحی با خواص توده ای (Bulk) دستگاه واقعی

کاملا متفاوت خواهد بود.



• به علت وجود این سطوح مصنوعی اطلاعات ما مربوط به خواص سطحی خواهند بود نه خواص توده ای.



# شرایط مرزی متناوب Periodic Boundary Conditions

- برای آنکه بتوان در یک شبیه سازی با استفاده از تعداد نسبتا کمی از ذرات خواص ماکروسکوپی را تعیین نمود باید مرزها و اثرات مرزی را به درستی در نظر گرفت.
- در شبیه سازی های با اعمال شرایط مرزی متناوب این سطوح حذف می شوند. به کمک شرایط مرزی متناوب (PBC) می توان با استفاده از تعداد نسبتا کمی از ذرات یک شبیه سازی را به گونه ای انجام داد که نیروهای وارد بر ذرات، مشابه شرایط توده یک سیال واقعی باشد.
- می توان گفت هر شکلی که در اثر **عمل انتقالی** در سه بعد تمام فضا را پر کند می تواند برای سلول شبیه سازی در نظر گرفته شود.

Cube



Truncated Octahedron



Hexagonal Prism



Rhombic Dodecahedron



- **سلول مکعبی ساده ترین سیستم متناوب است که برنامه نویسی ساده ای دارد.**

# شرایط مرزی متناوب Periodic Boundary Conditions

- استفاده از سلولهای تناوبی مختلف بسته به مساله مورد شبیه سازی صورت می پذیرد.
- در بعضی مسائل شرایط تناوبی **تنها در دو راستا** و یا **تنها در یک راستا** بایستی در نظر گرفته شود.

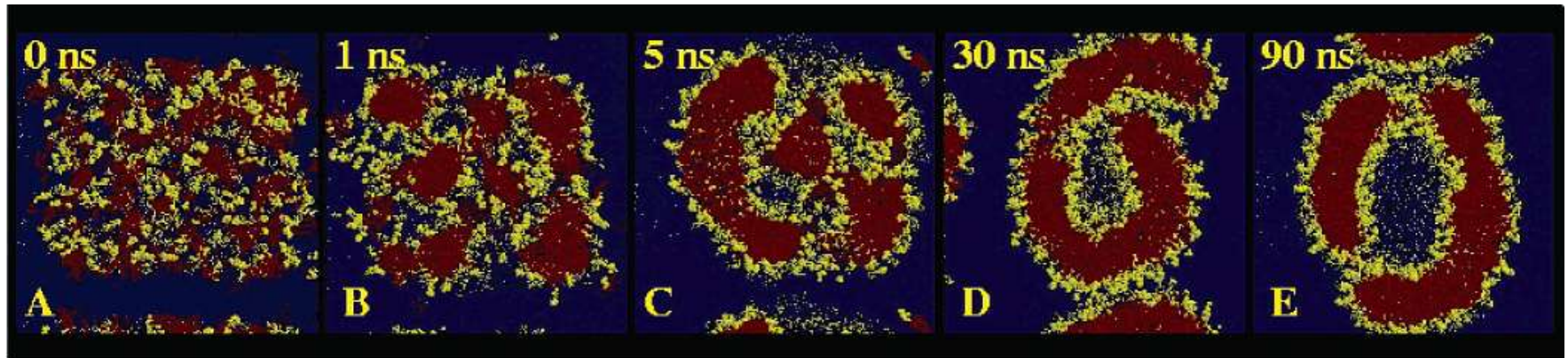
## • محدودیتها:

- یکی از محدودیتهای روش شرایط مرزی متناوب این است که این شرایط مرزی تنها ساختارها و رفتارهایی را مدلسازی می نماید که دارای **طول موج کمتر از طول سلول** باشند.
- **طول سلول بایستی بزرگتر از برد تبادلات نیرویی بین اجزای سیستم باشد.** مثلاً برای در نظر گرفتن برهم کنش های لنارد-جونز بایستی طول سلول بزرگتر از  $6\sigma$  باشد. در صورت وجود نیروهای برد بلند مجبور به استفاده از سلولهای بزرگی هستیم.
- قضیه پارش انرژی تغییر می نماید.



## نمونه هایی از مسائلی با شرایط مرزی متناوب

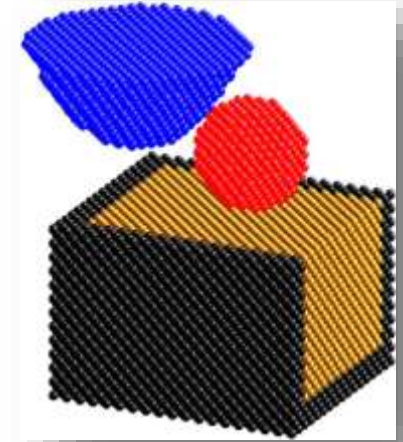
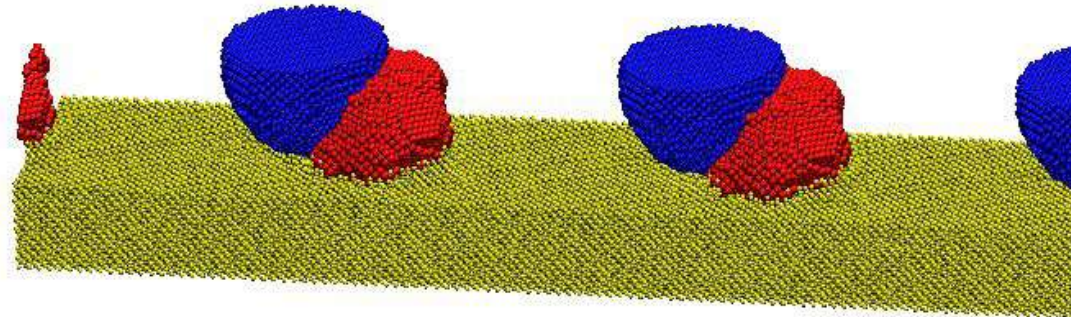
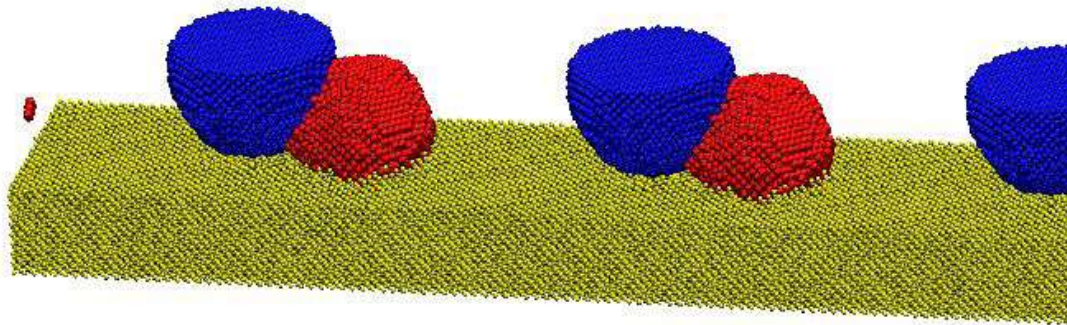
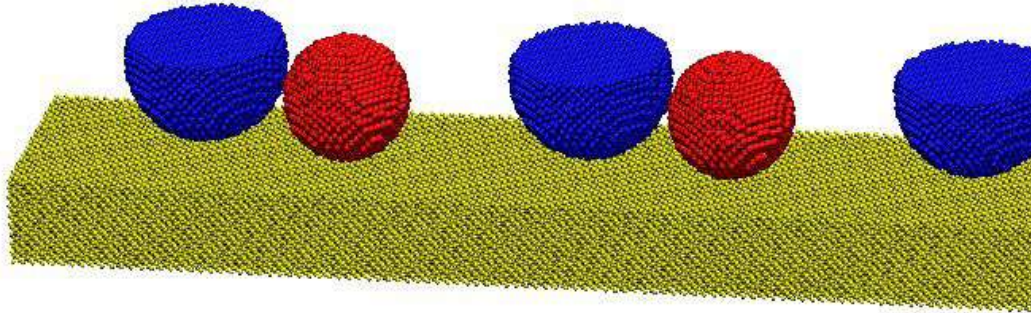
• شکل گیری ویزیکل چربی



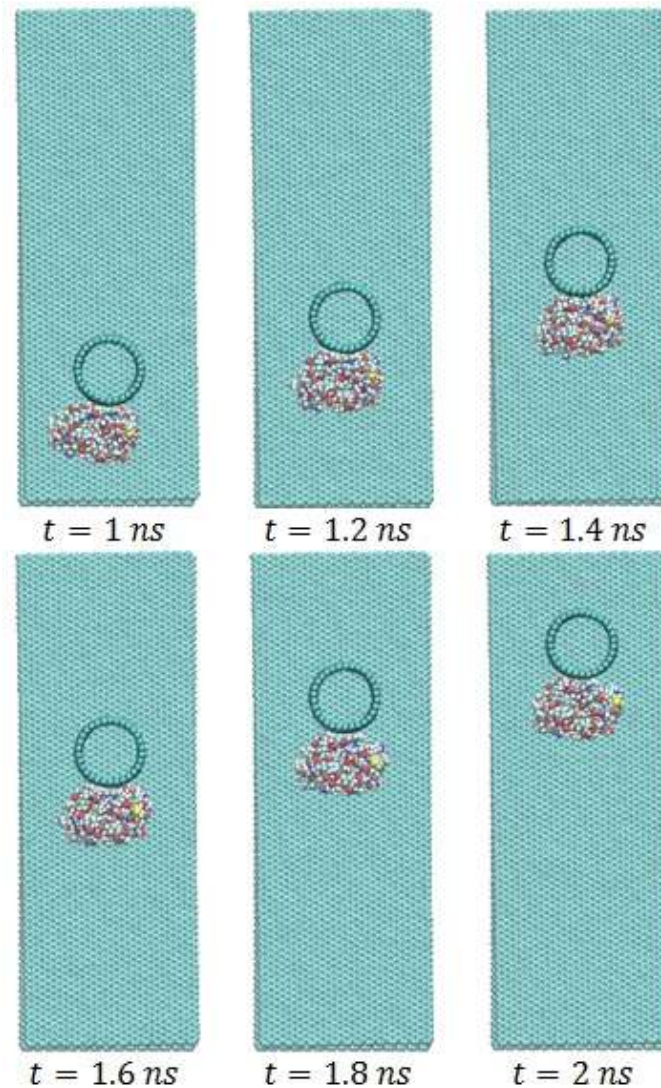
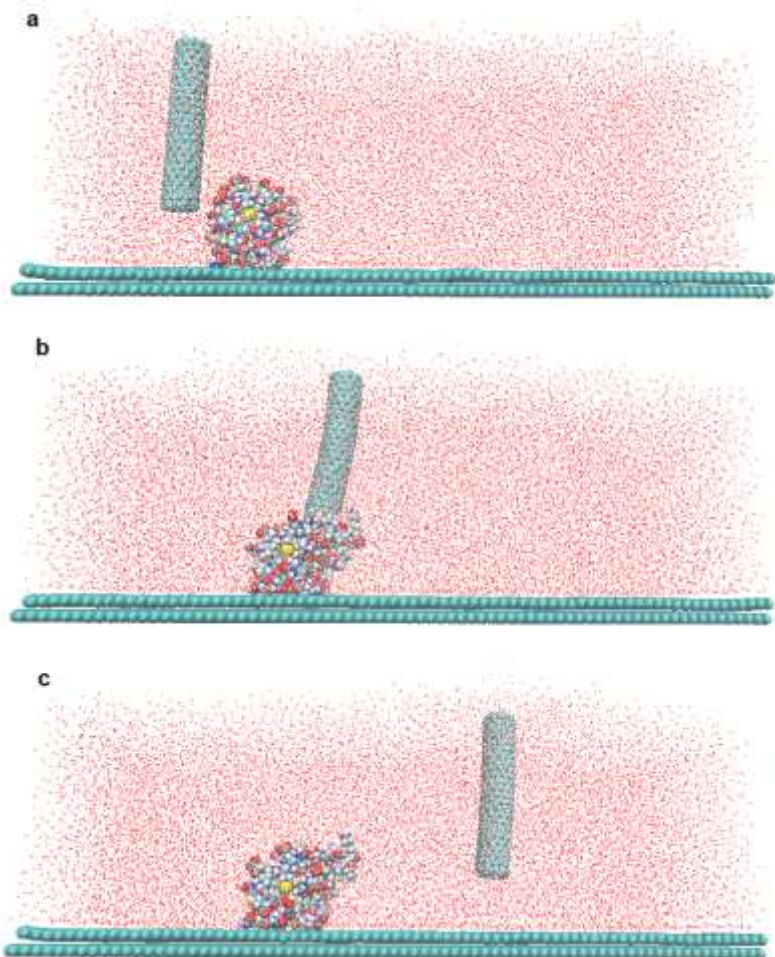
**Snapshots of molecular dynamics  
simulation of lipid aggregation in water.  
Lipid headgroups**



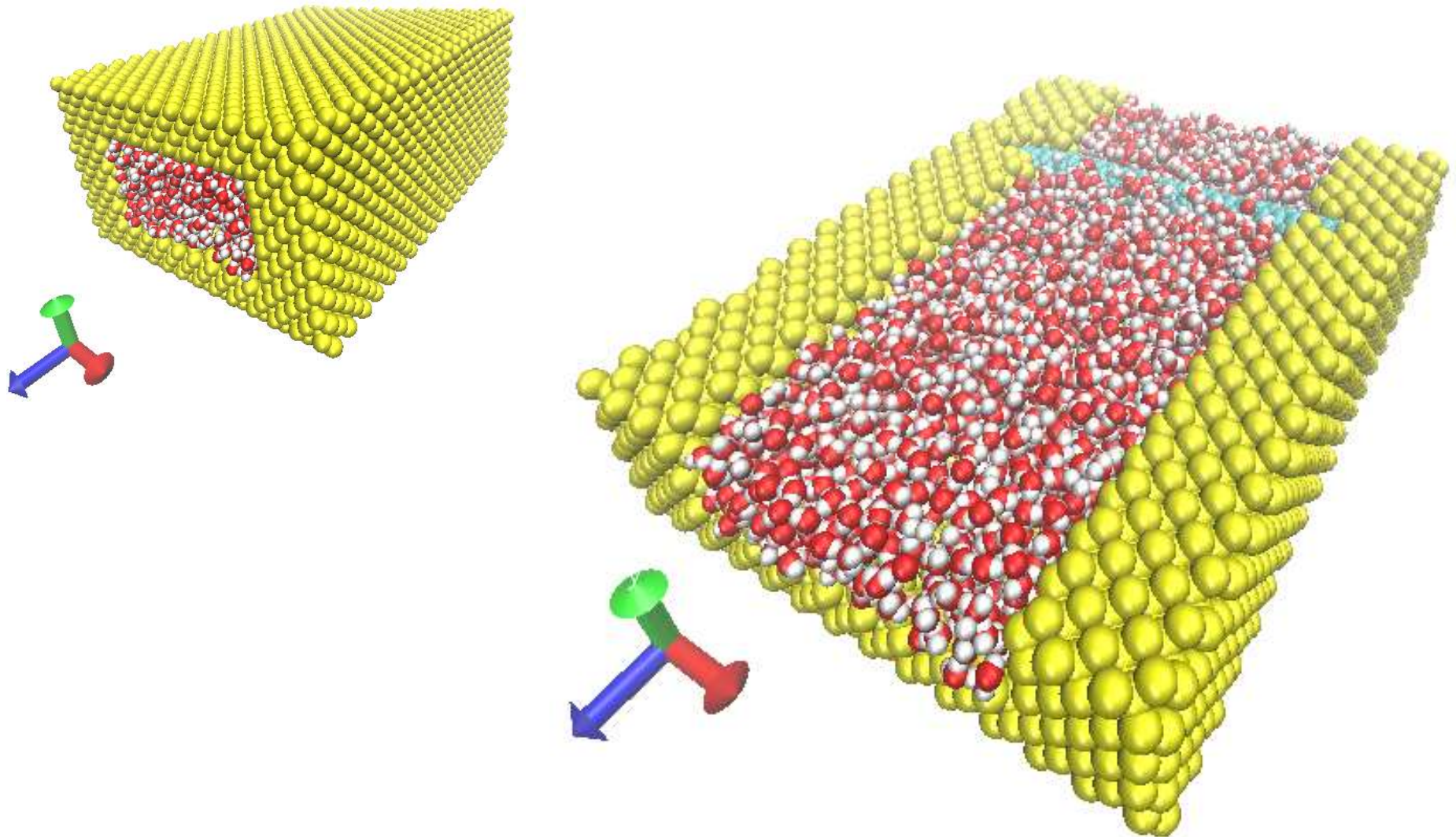
## منیپولیشن ذرات فلزی



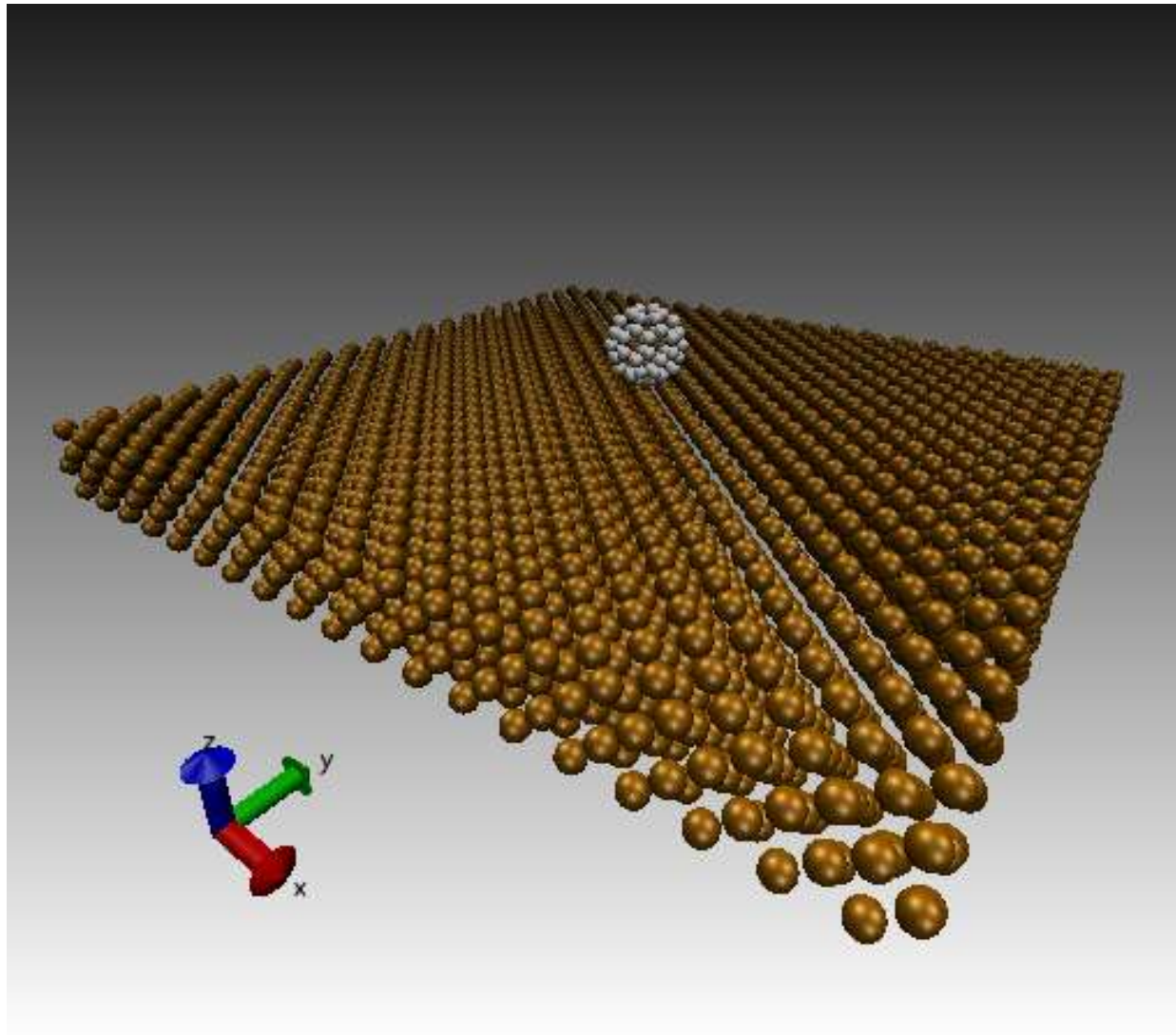
# بیومنیپولیشن



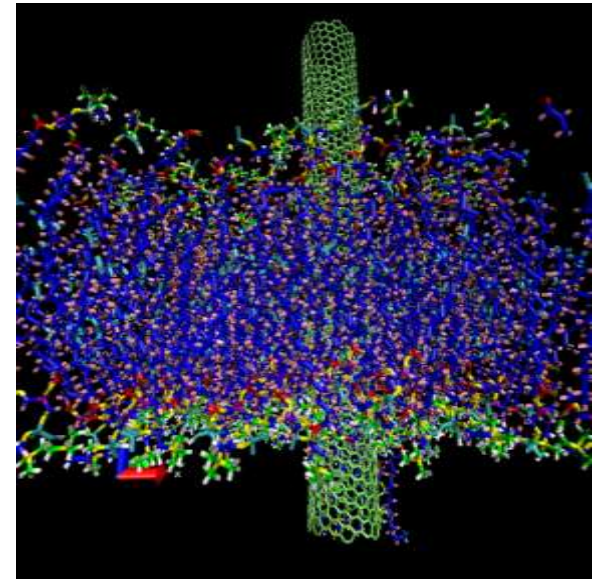
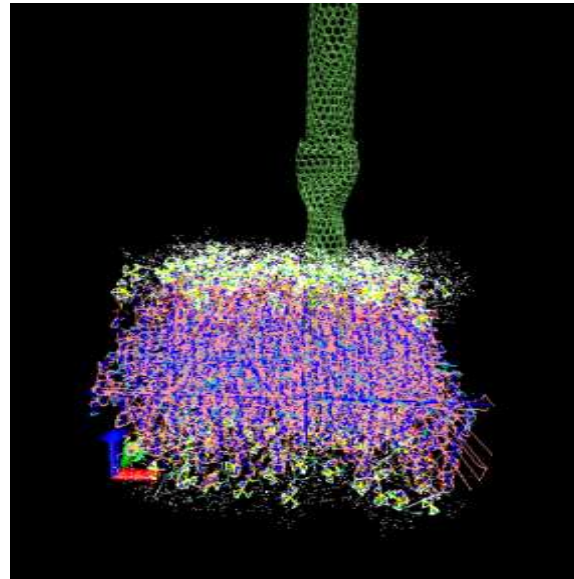
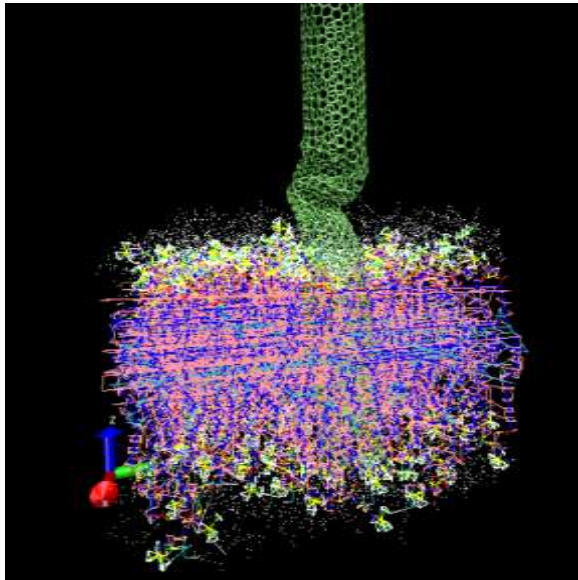
## حسگر سرعت سنج



# شبیه سازی حرکت یک فولرین روی سطح طلا

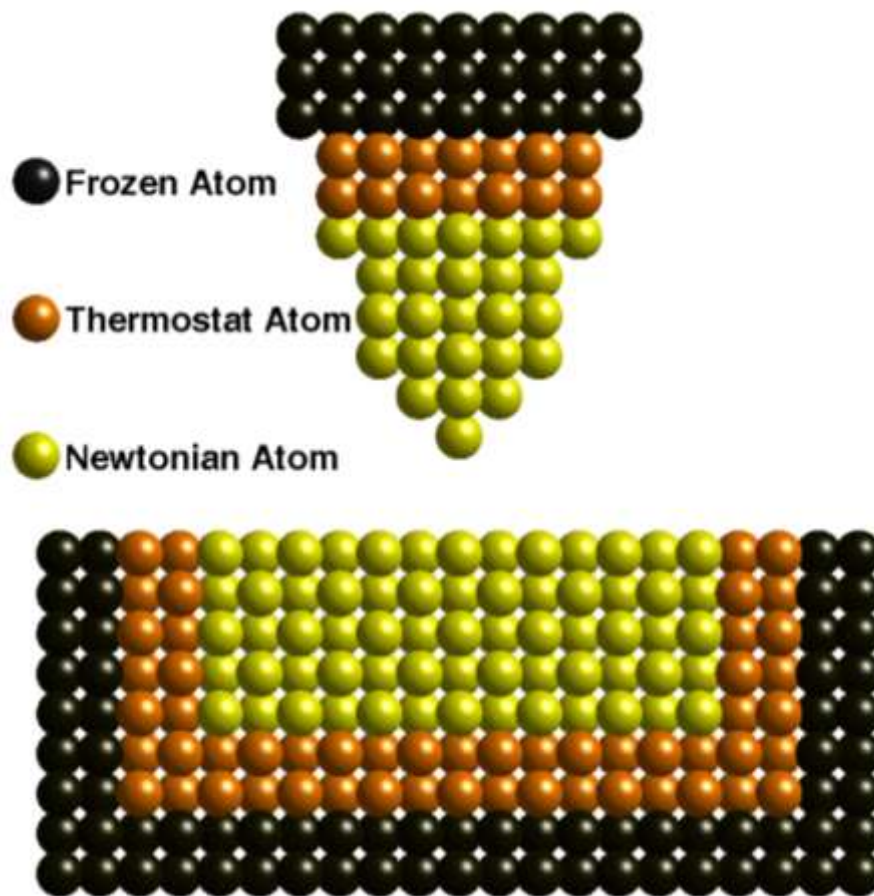


# شبیه سازی فرو رفتن نانو تیوب داخل غشاء سلولی

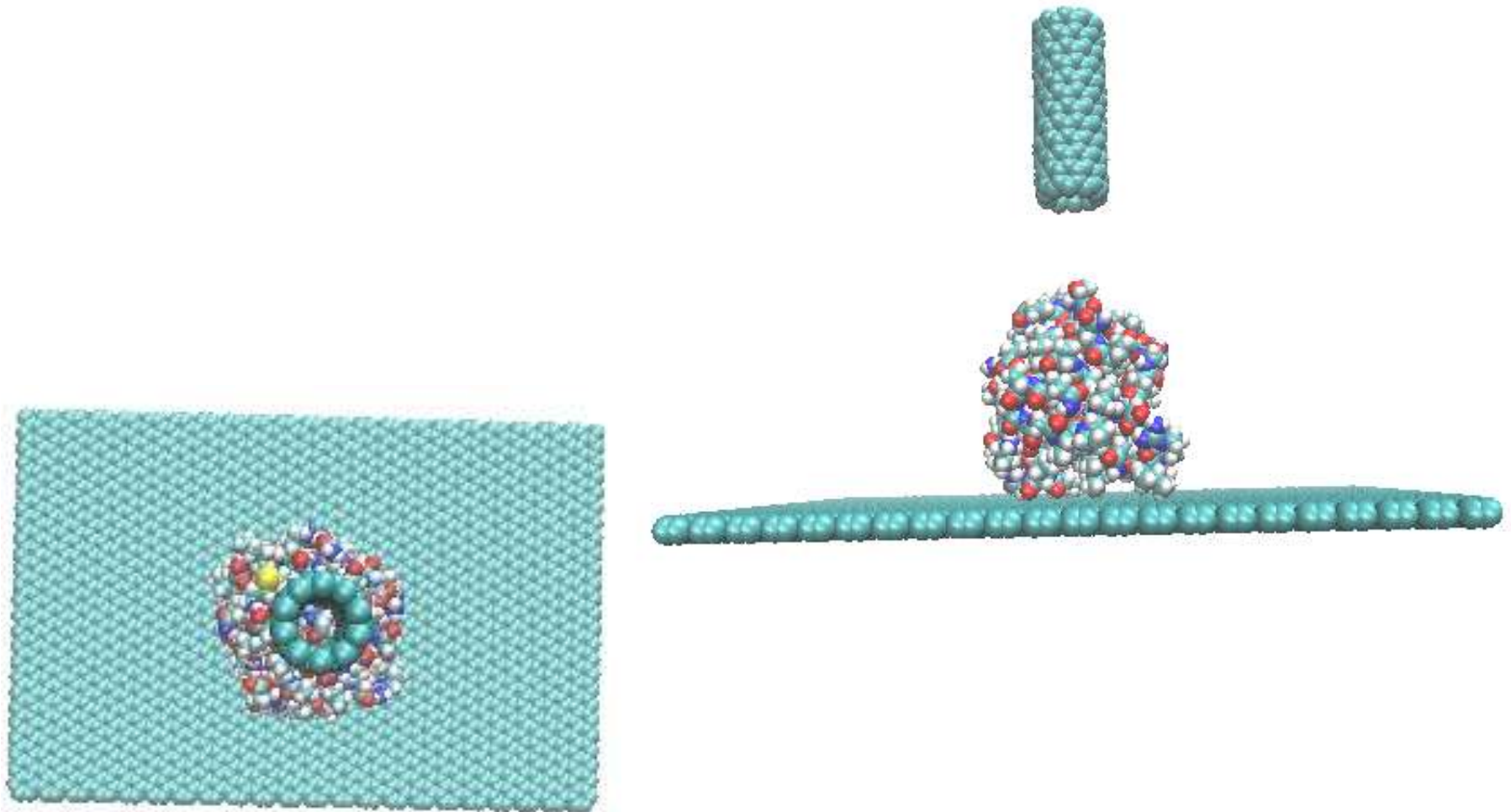


## مثالهایی از شرایط مرزی غیر متناوب

- در مدل سازی بسیاری از سیستمها شرایط تناوبی نداریم. برخی از سیستم ها (نظیر قطرات مایع) دارای مرز هستند.



# مدلسازی تصویربرداری از یک بیومولکول



# شرایط مرزی متناوب Periodic Boundary Conditions

• شرایط مرزی تناوبی چگونه اعمال می شوند؟

(۱) فرض می کنیم که **حجم  $V$  بخش کوچکی از دستگاه** را تشکیل می دهد و نام آن را سلول مرکزی می گذاریم. (Central Cell)

(۲) این سلول مرکزی را توسط **سلولهای کاملا مشابه که سلولهای تصویری (image cell)** نامیده می شوند در هر سه بعد محاصره می کنیم. این سلولها دارای شکل و اندازه ی مشابه سلول مرکزی هستند.

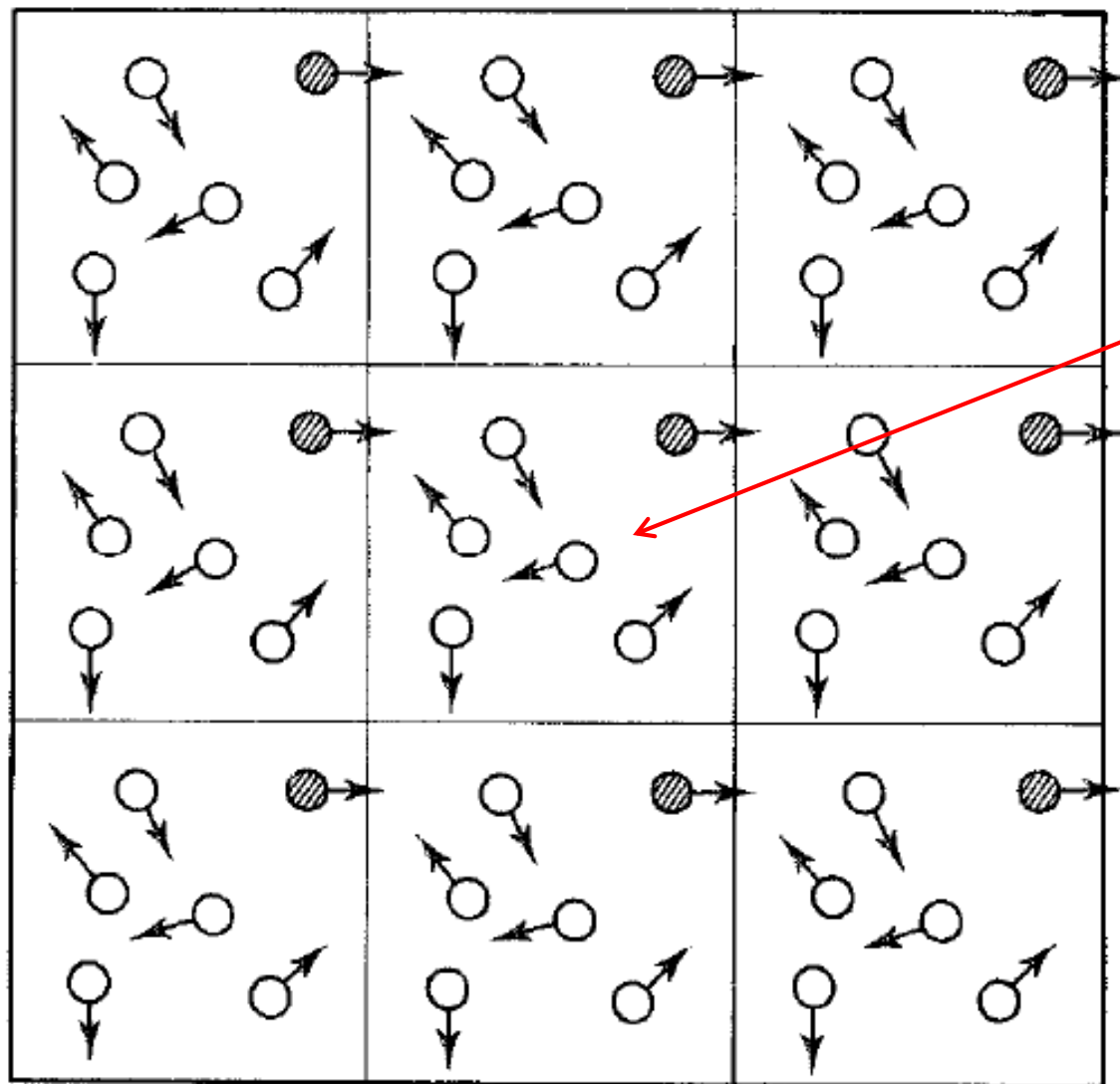
(۳) هر سلول تصویری دارای  $N$  اتم تصویری می باشد.

(۴) در نتیجه فرض بر آن است که **سلول مرکزی و سلولهای تصویری نشان دهنده دستگاه ماکروسکوپیک می باشند.**





• شکل اعمال شرایط مرزی تناوبی



سلول مرکزی



(۵) مکان هر اتم سلول تصویری به طریق ذیل به مکان اتم سلول مرکزی مرتبط می شود:

$$\mathbf{r}_{i(k)}^{(0)} = \mathbf{r}_{i(k)}^{(k)} + \mathbf{r}_{(k)}^{(0)}$$

محل سلول مرجع اندازه گیری  
شماره اتم      شماره سلول

این رابطه با توجه به رابطه  $\mathbf{r}_{i(0)}^{(0)} = \mathbf{r}_{i(k)}^{(k)}$  نوشته شده است.

با فرض یکسان بودن سه ضلع سلول مرکزی، سلول  $k$  ام با انتقال سلول مرکزی به صورت زیر ساخته می شود:

$$\mathbf{r}_{(k)}^{(0)} = L \mathbf{e}$$

$$\mathbf{e} = (0, 0, 0), (1, 0, 0), (0, 1, 0), \dots, (1, 1, 1), \dots, (-1, -1, -1), \dots$$

- در نتیجه **برای محاسبه یک تصویر** ما فقط احتیاج به مکان اتم (i) در سلول مرکزی و بردار انتقال سلول تصویر یا همان **e** داریم.

- در نتیجه طی شبیه سازی ما فقط احتیاج به ذخیره سازی یا **storing** مکان های **N** اتم در سلول مرکزی داریم.

(۶) هر اتم تصویر دارای همان تکانه ای است که اتم متناظر آن در سلول مرکزی دارا می باشد.

(۷) کاربرد شرایط تناوبی بدان معناست که **مرزهای سلول ها باز هستند**. هنگامی که یک اتم از سلول مرکزی خارج می شود یک تصویر آن اتم از طرف مقابل وارد می شود.

(۸) نحوه محاسبه نیرو با داشتن شرایط مرزی تناوبی

**N** اتم در سلول مرکزی را در نظر می گیریم که از طریق پتانسیل جفتی جمع پذیر در کنش با یکدیگر قرار دارند. پتانسیل مربوط به سلول مرکزی عبارت است از:

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \phi(\mathbf{r}_{ij(0)}^{(0)})$$

در اینجا  $\mathbf{r}_{ij(0)}^{(0)}$  بردار فاصله دو اتم در سلول مرکزی است.

- در دستگاههای مرزی تناوبی علاوه بر اتم های درون سلول مرکزی، اتم های موجود در سلول های تصویر نیز در پتانسیل کل تاثیر دارند.

- به عنوان مثال برهم کنش ایجاد شده با یک اتم A در سلول مرکزی عبارت است از:

$$\Phi_A = \frac{1}{2} \sum_m \sum_{j \neq A}^N \phi(\mathbf{r}_{Aj}^{(0)} - mL) \quad \text{where } \sum_m = \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \sum_{m_z=-\infty}^{\infty}$$

- اگر تصویر اتم A اتم A' باشد این تصویر همان مسیری را در سلول خود طی می نماید که A در سلول مرکزی می پیماید.

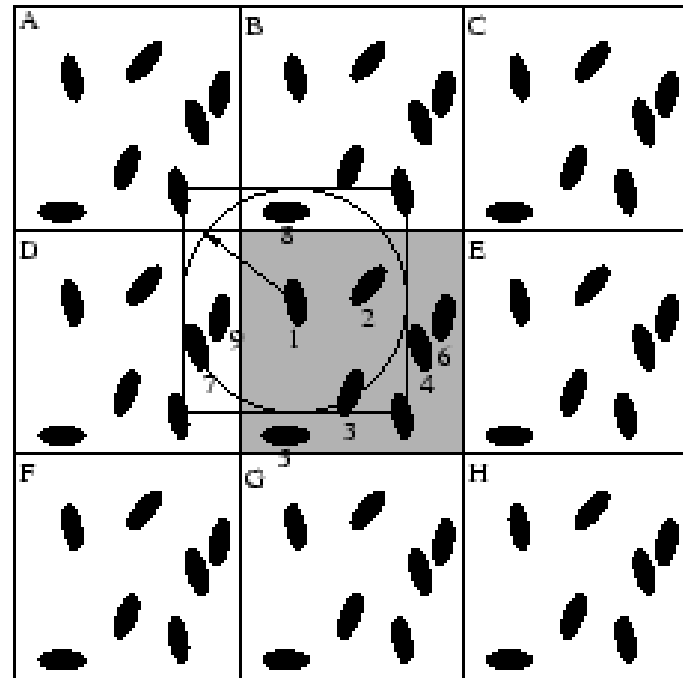
- کل نیروی وارده بر اتم A در سلول مرکزی را می توان به صورت زیر نوشت:

$$\mathbf{F}_A = \sum_m \sum_{j \neq A}^N \mathbf{f}(\mathbf{r}_{Aj}^{(0)} - mL)$$

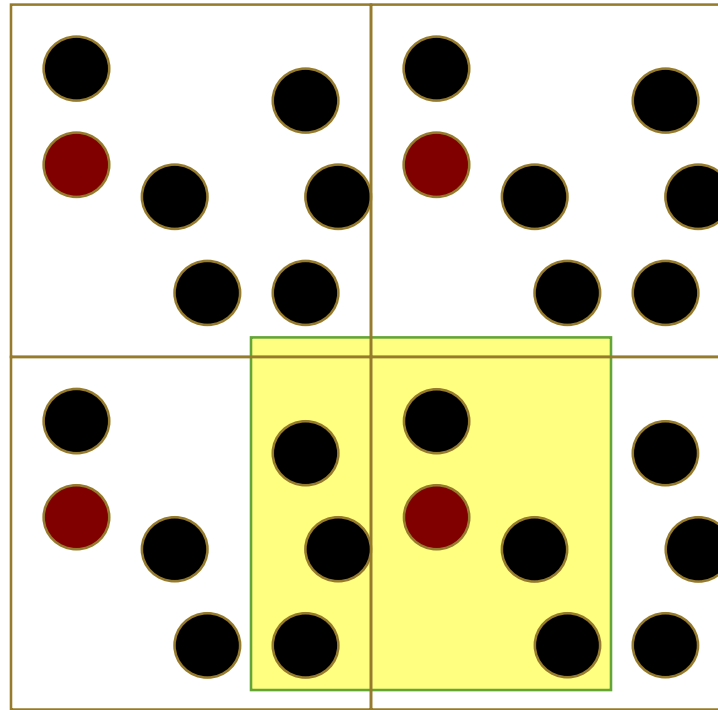
## تقریب کنش با نزدیکترین تصاویر (Minimum Image Interaction)

- در سلول مرکزی اتم  $i$  با  $N-1$  اتم کنش دارد و از طرف دیگر اتم  $i$  با تصاویر تمامی اتمها در سلولهای مجاور بر هم کنش دارد و با توجه به این که تعداد سلولها بی نهایت است تعداد کنش ها نیز بی نهایت می شود.
- **هنگامی که نیروها در مقایسه با اندازه  $L/2$  دارای برد کوتاه هستند**، ما فقط احتیاج به در نظر گرفتن آن سلولهای تصویر داریم که در مجاورت بلافاصله سلول مرکزی قرار دارند. یعنی

$$\mathbf{F}_i = \sum_{m_x=-1}^1 \sum_{m_y=-1}^1 \sum_{m_z=-1}^1 \sum_{j \neq i}^N \frac{\partial \phi(\mathbf{r}_{ij} - m\mathbf{L})}{\partial \mathbf{r}_i}$$



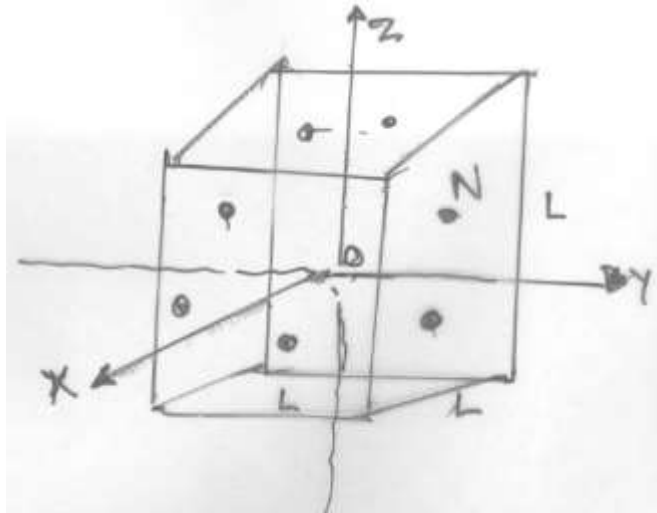
- جهت پیاده کردن این فرض، تقریب کنش با نزدیکترین تصویر را بکار می گیریم.



- مربع زرد نشان داده شده، معرف محدوده ای می باشد که اتم قرمز با اتمهای دیگر کنش دارد.
- برای کنش های برد بلند بایستی از این تقریب صرف نظر نمود.

## کد کامپیوتری پیاده سازی شرط مرزی تناوبی

- فرض کنید  $N$  اتم در سلول مکعبی که ضلع آن  $L$  است را در دست داریم. محور مختصات را در وسط سلول قرار می دهیم. یعنی



- تمام اتمها دارای مختصه در فاصله  $(-L/2, L/2)$  هستند. همانطوریکه در طول شبیه سازی اتم ها در داخل سلول مرکزی جابجا می شوند تصاویر آن ها نیز در داخل سلولهای تصویری جابجا می شوند.
- هنگامی که **یک اتم از یکی از مرزها خارج می شود** تمرکز ما بر روی اتم تصویر که از ضلع مقابل وارد می شود قرار می گیرد. این کار را می توانیم با اضافه کردن و یا کم کردن  $L$  از مختصه مربوطه انجام دهیم.

• در زبان FORTRAN داریم:

If (Rx(i).GT.(L/2)) then

$$R_x(i) = R_x(i) - L$$

End if

If (Rx(i).LT.(-L/2)) then

$$R_x(i) = R_x(i) + L$$

End if

همچنین این کار را برای  $R_y$  و  $R_z$  می توان انجام داد. این عبارت را می توان با استفاده از دستور ANINT نیز در FORTRAN انجام داد و دیگر از IF استفاده نکرد.

$$R_x(i) = R_x(i) - L * ANINT(R_x(i)/L)$$

$$R_y(i) = R_y(i) - L * ANINT(R_y(i)/L)$$

$$R_z(i) = R_z(i) - L * ANINT(R_z(i)/L)$$

عملکرد تابع ANINT آن است که نزدیکترین عدد کامل به  $x$  را ارائه می دهد و سپس آنرا به یک عدد حقیقی تبدیل می کند. مثلا  $ANINT(0.55)=1$  و  $ANINT(-0.3)=0$





• با استفاده از روابط گفته شده همیشه مختصه های  $N$  اتم را در حالت جاری که در سلول مرکزی قرار دارند در دست داریم.

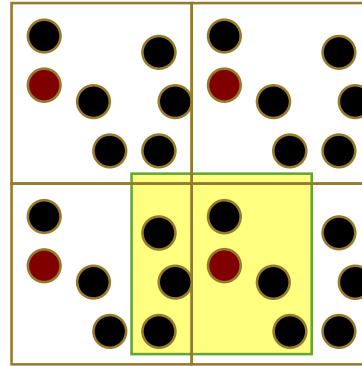
• پیاده کردن کنش با نزدیکترین تصاویر:

این تقریب را می توان به آسانی در یک شبیه سازی پیاده نمود. بلافاصله پس از محاسبه فاصله بین یک جفت اتم  $D_{xij}$ ،  $D_{yij}$  و  $D_{zij}$  روابط ذیل را پیاده می کنیم

$$D_{xij} = D_{xij} - L * ANINT(D_{xij}/L)$$

$$D_{yij} = D_{yij} - L * ANINT(D_{yij}/L)$$

$$D_{zij} = D_{zij} - L * ANINT(D_{zij}/L)$$



در اینجا

$$D_{xij} = R_x(i) - R_x(j)$$

$$D_{yij} = R_y(i) - R_y(j)$$

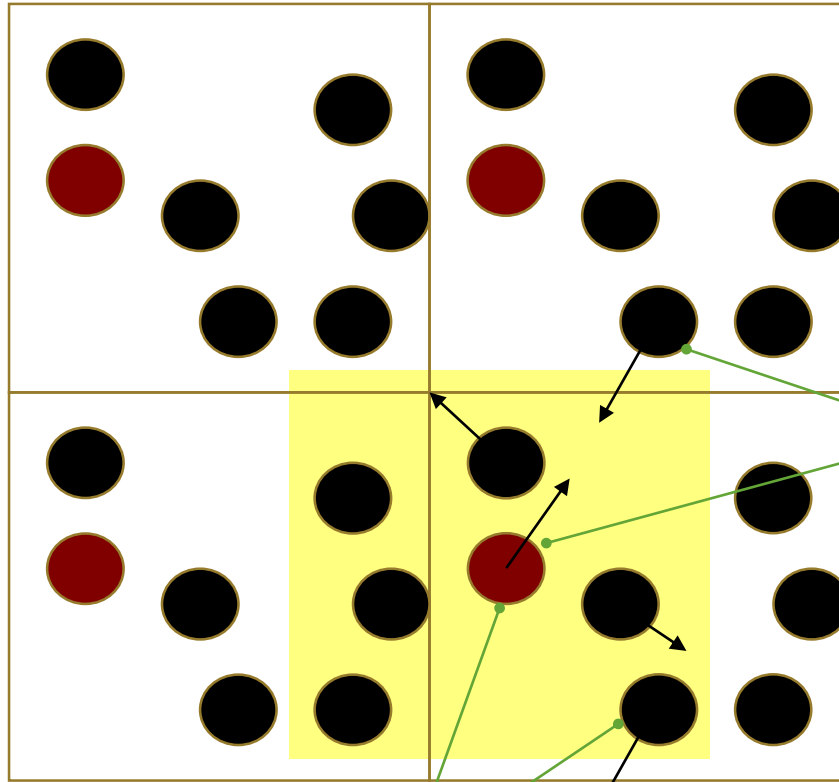
$$D_{zij} = R_z(i) - R_z(j)$$

## شعاع قطع پتانسیل

- مهم ترین و طولانی ترین مرحله ی یک شبیه سازی دینامیک مولکولی، **محاسبه ی انرژی پتانسیل و نیروهای وارد بر اتمهای سیستم** است.
- تعداد جملات کششی، خمشی، و پیچشی در یک میدان نیرو همگی متناسب با تعداد اتمهاست اما تعداد جملات ناپیوندی بسته به اینکه پتانسیل جفتی باشد یا چندین اتمی حداقل از مرتبه ی  $N$  به توان ۲ است.
- به طور کلی بایستی برهم کنش های ناپیوندی برای تمام جفت اتمهای موجود در سیستم محاسبه شود اما در بسیاری از موارد، عملاً چنین کاری امکان پذیر نیست.
- اگر به پتانسیل لنارد-جونز دقت کنیم مقدار تابع پتانسیل با افزایش فاصله به سرعت افت می کند به طوریکه در فاصله  $2.5\sigma$  پتانسیل لنارد-جونز تنها 1.6 درصد مقدار بیشینه آن در  $r_m = \sqrt[6]{2} \sigma$  است.
- بنابراین شاید بتوان از برهم کنش میان اتمهایی که فاصله ی زیادی دارند صرف نظر نمود.
- در روش شرایط مرزی متناوب از قرارداد نزدیکترین تصویر استفاده می شود تا تنها برهم کنش مولکول مورد نظر با مولکولهایی که در ناحیه نزدیکترین تصویر (مربع مشخص شده در صفحه بعد) قرار دارند لحاظ گردد.



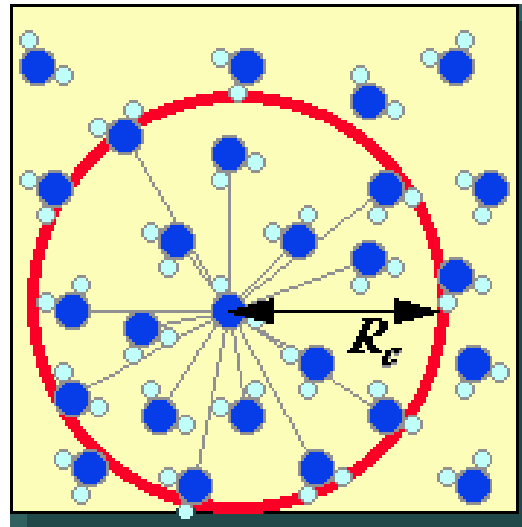
# قرارداد نزدیکترین تصویر برای کاهش حجم محاسبات



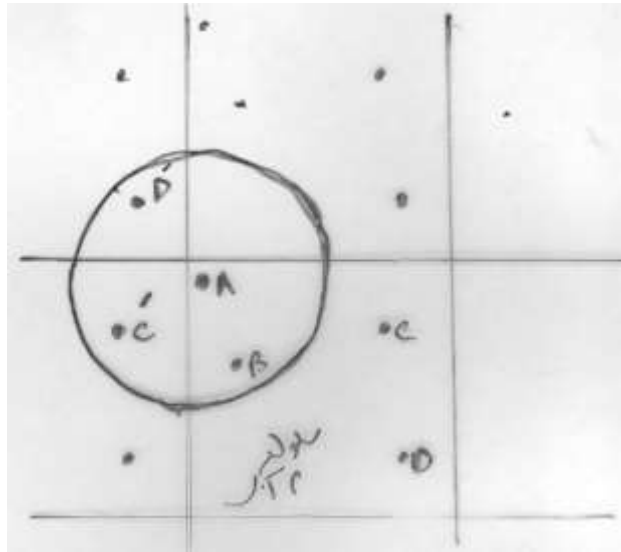
...but these will collide

These two are checked...

- با استفاده از قرارداد نزدیکترین تصویر، محاسبه انرژی بر اساس برهم کنش های افزودنی جفتی مستلزم ارزیابی  $N(N-1)/2$  جمله است.
- این تعداد هنوز برای سیستمی که دارای تعداد زیادی اتم در سلول مرکزی برای شرایط مرزی متناوب است بسیار زیاد خواهد بود.
- با استفاده از یک تقریب دیگر می توان شرایط را بهتر کرد. از آنجا که بخش اعظم پتانسیل و نیروها ناشی از همسایه های نزدیک هر مولکول است برای نیروهای کوتاه برد معمولاً یک **قطع کروی** انجام می شود.
- یعنی پتانسیل جفتی به ازای فواصلی بزرگتر از شعاع قطع برابر با صفر قرار داده می شود.



- مطابق این تقریب در سلول مرکزی کنش بین اتم  $A$  و اتمهای  $B$ ،  $C$  و  $D$  توسط کنشهای نزدیکترین تصاویر جانشین می شود، یعنی  $A$  با  $B$ ،  $C'$  و  $D'$ .



- در شبیه سازی های دینامیک مولکولی فاصله قطع بایستی با قرارداد نزدیکترین تصویر سازگار باشد. برای این منظور فاصله قطع نباید از  $L/2$  بزرگ تر باشد، زیرا در غیر اینصورت ممکن است یک ذره تصویر خودش را ببیند.  $r_{cutoff} \leq L/2$
- در غیر این صورت، نه تنها به علت کوچک بودن سلول و برهم کنش هر اتم با اتم تصویر خودش، تقارن های مصنوعی بر سیستم تحمیل می شود بلکه دیگر نمی توان از قرار داد نزدیکترین تصویر استفاده کرد.

- در یک مساله با شرایط مرزی متناوب، **فاصله ی قطع را بایستی کمتر از نصف طول کوتاه ترین لبه ی جعبه** انتخاب نمود.

- قید دیگری که فاصله ی قطع بایستی رعایت کند با توجه به برهم کنش های ناپیوندی موجود در سیستم مشخص می شود. اگر در یک سیستم، تنها برهم کنش های ناپیوندی پتانسیل لnard-جونز باشد، با استفاده از

$$\text{فاصله } 2.5\sigma \text{ خطای بسیار اندکی در نتایج ایجاد می شود. } r_{cutoffLJ} \geq 2.5\sigma$$

- اما اگر در سیستمی بر هم کنشهای الکترواستاتیکی موجود باشند فاصله ی قطع باید بسیار بزرگتر انتخاب شود.

- **استفاده از فاصله ی قطع گرچه برای انجام شبیه سازی منطقی و مفید است ولی منجر به نادیده گرفتن بخشهای برد-بلند انرژی پتانسیل می شود.** در چنین مواردی بهتر است که نتایج شبیه سازی را تصحیح کنیم تا این کاهش انرژی پتانسیل جبران گردد.

- به عنوان نمونه همانطور که قبلا گفتیم در محاسبه تبادلات نیرویی دو سطح با یکدیگر، علاوه بر در نظر گرفتن نیروهای کوتاه برد که بین اتمهای دو سطح برهمکنش دارند بهتر است اثر نیروی وارده بین بخشهای میکروسکوپی را نیز در نظر بگیریم.

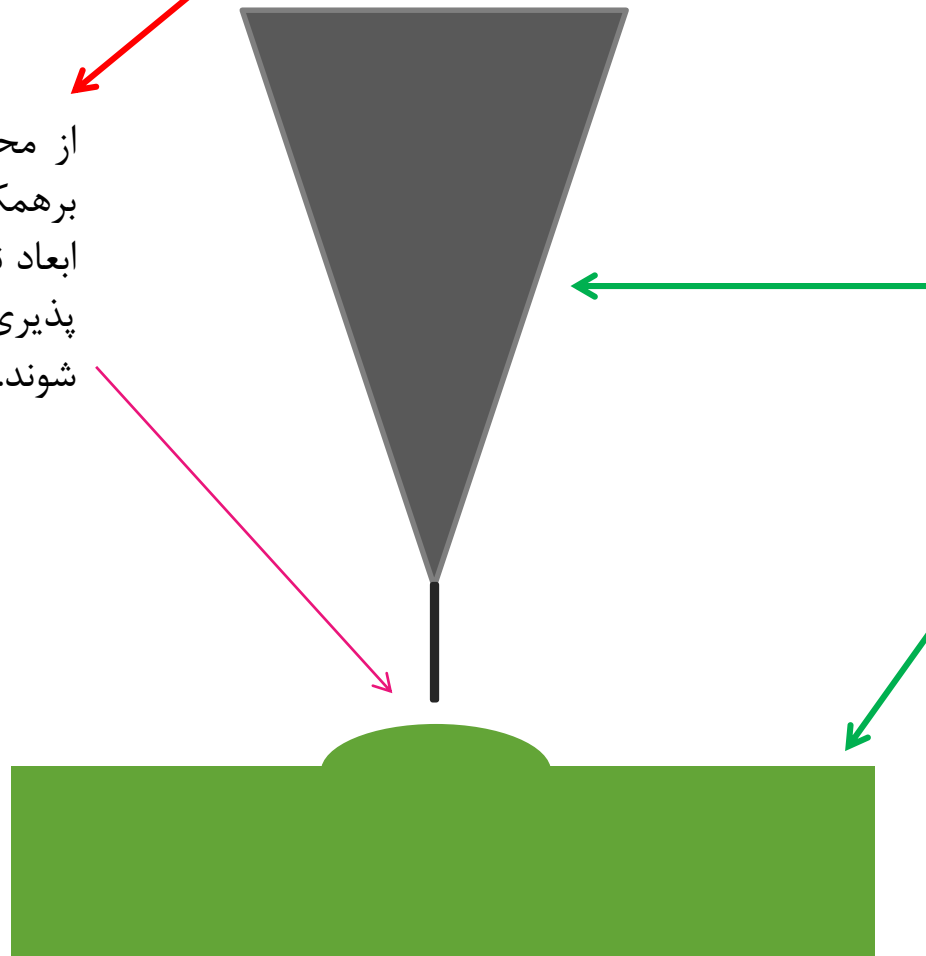


- به عنوان مثال در تعیین تبادلات نیرویی یک تیپ با سطح

$$f_{\text{interaction}} = f_{\text{short-range}} + f_{\text{long-range}}$$

از محاسبات دینامیک مولکولی  
برهمکنش بین دو قسمت در  
ابعاد نانو بدست می آید. انعطاف  
پذیری سیستمها لحاظ می  
شوند.

نیروهای وان در والسی برد  
بلند را می توان بین مخروط و  
سطح بدست آورد. با توجه به  
جنس دو سطح، هندسه آنها و  
فواصل بین دو سطح این نیرو  
تعیین می شود. دو سطح  
صلب لحاظ می شوند.



- جدول زیر فرمول های محاسبه نیروهای وان در والسی برد بلند را ارائه می دهد.

van der Waals interaction laws for most common AFM geometries

Geometry	Force
Two flat surfaces	$f = -\frac{A_H}{6\pi D^3}$ per unit area
Two spheres	$F = -\frac{A_H}{6D^2} \frac{R_1 R_2}{R_1 + R_2}$
Sphere—flat surface	$F = -\frac{A_H R}{6D^2}$
Cone—flat surface	$F = -\frac{A_H \tan^2 \theta}{6D}$
Paraboloid—flat surface	$F = -\frac{A_H}{12D^2} \frac{l_{xy}^2}{l_z}$
Cylinder—flat surface	$F = -\frac{A_H R^2}{6D^3}$

$A_H$  is the Hamaker constant,  $D$  is the distance,  $R$  is the radius of the sphere or of the cylinder,  $\theta$  is the semi-aperture of the cone,  $l$  is the semi-axis of the paraboloid.  $A_H = \pi^2 C \rho_1 \rho_2$ , where  $C$  is the constant in the atom–atom pair potential and  $\rho_1$  and  $\rho_2$  are the number of atoms per unit volume.





List of measurements of the Hamaker constant between materials commonly used in atomic force microscopy

Material 1	Material 2	Medium	Calculated $A_H$ ( $\times 10^{-20}$ J)	Reference	Experimental $A_H$ ( $\times 10^{-20}$ J)	Reference
TiO <sub>2</sub>	TiO <sub>2</sub>	Water	6	[325]	6 ± 2	[169]
			5.3–5.7	[326]		
Au	Au	Water	40	[309]	7–25	[327]
					25	[328]
					10	[329,330]
Ag	Ag	Vacuum	20–49	[315]	38.5 ± 0.5	[315]
Cu	Cu	Vacuum	25–40	[315]	27.5	[315]
Ag	Cu	Vacuum	22–44	[315]	32.6–34	[315]
Si <sub>3</sub> N <sub>4</sub>	Si <sub>3</sub> N <sub>4</sub>	Water	4.8–5.9	[326]	6.1	[331]
Si <sub>3</sub> N <sub>4</sub>	Mica	Water	2.45	[326]	3.4	[331]
Si <sub>3</sub> N <sub>4</sub>	Mica	Ethanol			11.6	[332]
SiO <sub>2</sub>	SiO <sub>2</sub>	Ethanediol	0.6	[333]	0.2	[333]
SiO <sub>2</sub>	SiO <sub>2</sub>	Water	0.77–0.84	[334]	1	[335]
			0.46–0.7	[326]	0.85	[336]
			0.85	[333]		
SiO <sub>2</sub>	Air	Water	–1	[309]	–1	[337]
SiO <sub>2</sub>	Au	Air			2.2–4.1	[338]
SiO <sub>2</sub>	Au	Water			12–15	[338]
SiO <sub>2</sub>	Ag	Vacuum	11–18	[315]	13	[315]
SiO <sub>2</sub>	Cu	Vacuum	12–17	[315]	14	[315]
SiO <sub>2</sub>	TiO <sub>2</sub>	Water	0.69	[326]	1.4	[339,340]
SiO <sub>2</sub>	Teflon	Cyclohexane	–0.54	[341]	–0.41	[341]
SiO <sub>2</sub>	Mica	Water	1.2	[334]	1.2	[322]
			1.16	[326]		
ZrO <sub>2</sub>	ZrO <sub>2</sub>	Water	7.2–8.1	[326]	6	[342]
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Water	5.3	[333]	5.3	[343]
Mica	Mica	Water	2–2.2	[334]	2.2	[344]
			1.3–1.9	[326]		
Teflon	Teflon	Air			3.9	[345]
BSA	BSA	Water			0.4	[346]

Only measurements performed with AFM are listed.



## کد فرترن برای نوشتن شعاع قطع

- همانطور که قبلا گفته شد منظور از شعاع قطع پتانسیل، فاصله ای است که اگر فاصله جفتی بزرگتر از این مقدار گردد پتانسیل جفتی (و تمام نیروها) صفر می شود.
- از آنجایی که محاسبه ی **مربع فاصله** بین دو ذره ساده تر است، **برای صرفه جویی زمان** از آن استفاده می شود و این مقدار با مربع فاصله قطع مقایسه می شود.
- بعد از محاسبه ی بردار بین مولکولی، کد زیر اعمال می گردد:

$$R2_{ij} = Dx_{ij} * Dx_{ij} + Dy_{ij} * Dy_{ij} + Dz_{ij} * Dz_{ij}$$

If (R2<sub>ij</sub><R2<sub>cut</sub>) then

کد محاسبه و ذخیره انرژی و نیروها

end

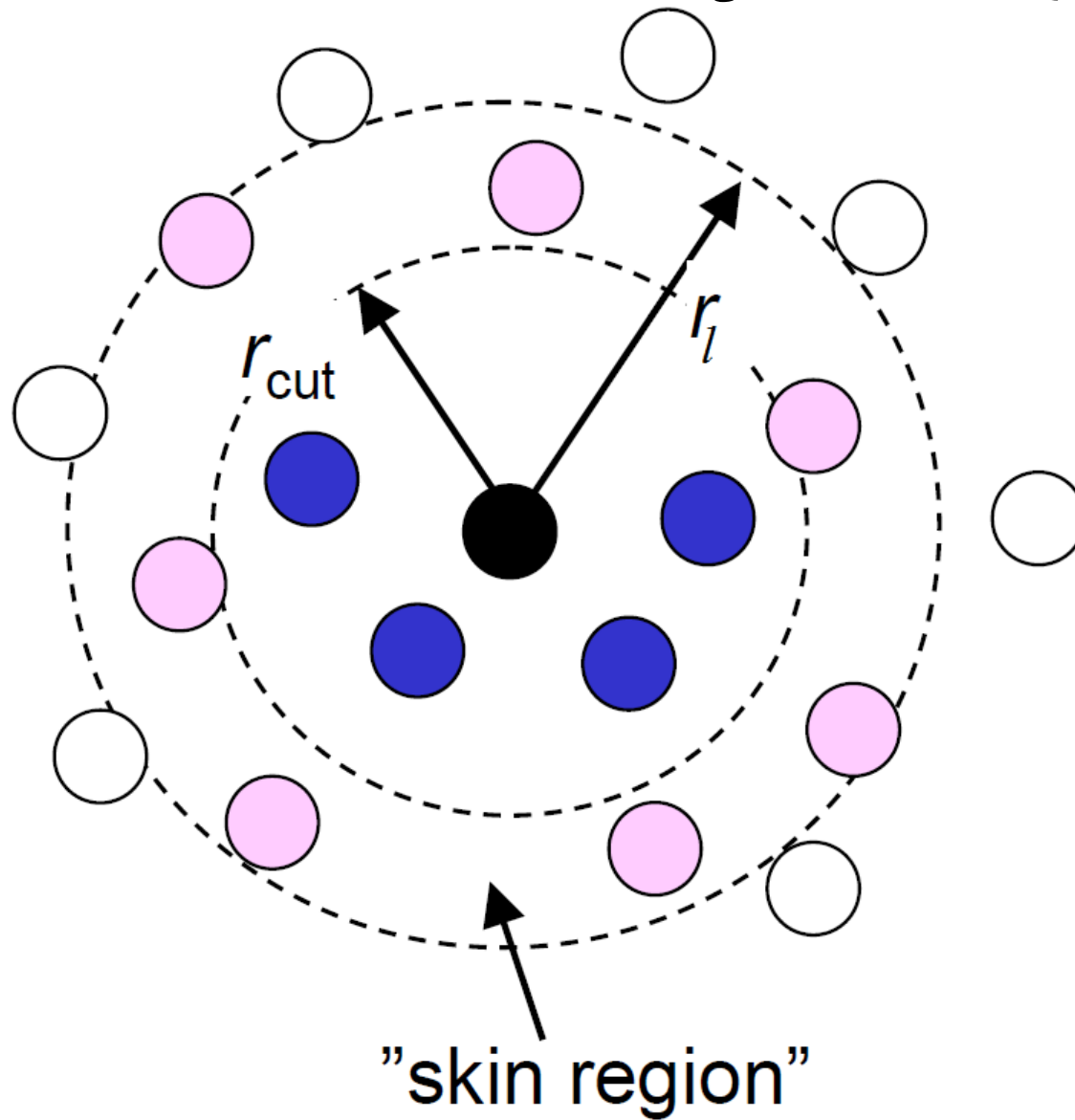


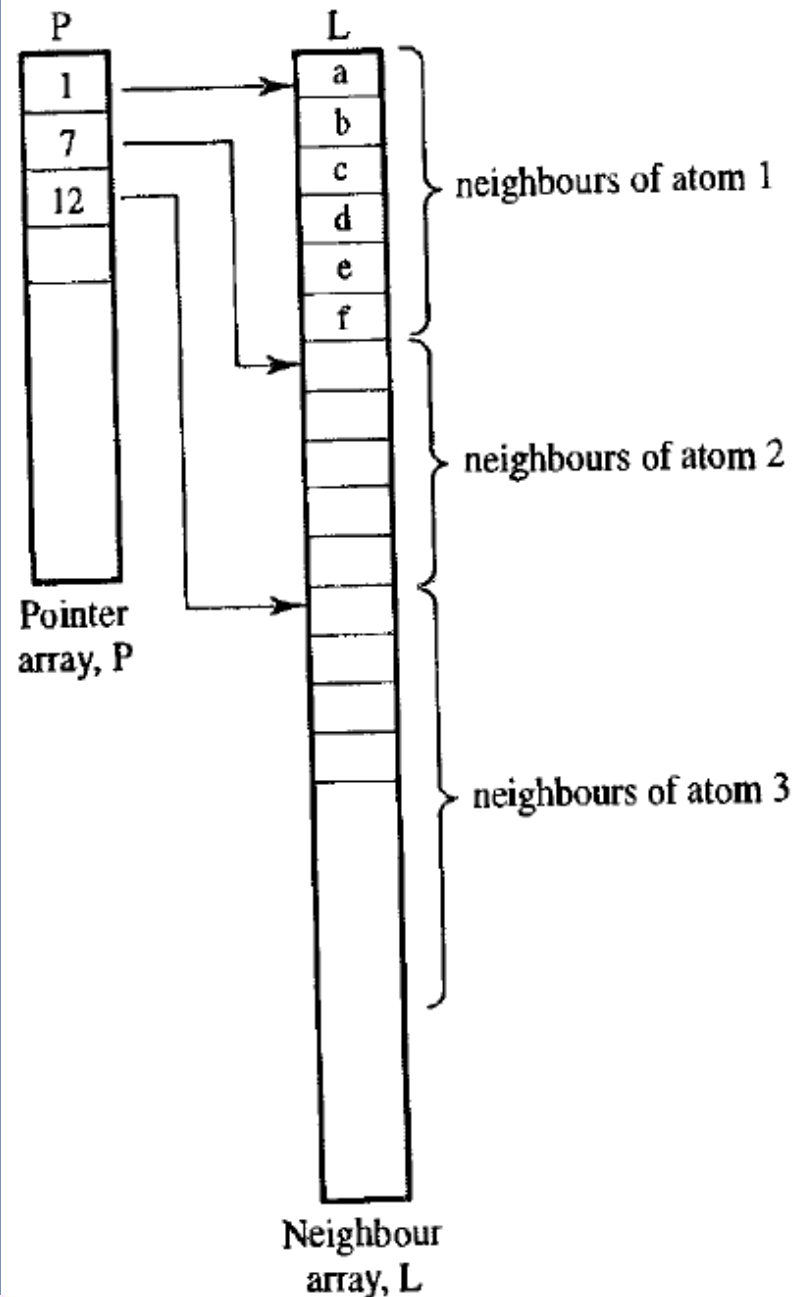
# لیست همسایه های ناپیوندی non-bonded neighbor list

- استفاده از فاصله ی قطع به تنهایی کاهش چشم گیری در زمان محاسبه برهم کنشهای ناپیوندی ایجاد نمی کند، زیرا هنوز هم باید فاصله هر دو اتم را در سیستم محاسبه کنیم و آنگاه تصمیم بگیریم که آیا فاصله ی آنها در حدی است که بتوانند بر هم کنش داشته باشند یا خیر.
- محاسبه ی فاصله بین  $N$  اتم نیاز به محاسبه  $N(N-1)/2$  فاصله دارد که برای سیستمهای بزرگ زمان زیادی را لازم دارد.
- در اکثر شبیه سازی های دینامیک مولکولی، همسایه های یک اتم (یعنی اتمهایی که در فاصله ی قطع آن اتم قرار دارند) در حین هر ۱۰ تا ۲۰ مرحله شبیه سازی تغییر چندانی نمی کند. بنابراین اگر بدانیم که چه اتمهایی را باید در محاسبه ی پتانسیل ناپیوندی در نظر بگیریم (به عنوان مثال، با ذخیره کردن در یک آرایه)، می توانیم همسایه های هر اتم را مستقیماً و بدون نیاز به محاسبه ی فاصله تشخیص دهیم.
- این روش اولین بار توسط ورله پیشنهاد شد. در روش لیست همسایه های ورله، کره قطع پتانسیل به شعاع  $r_c$  که هر اتم خاص را احاطه می کند، خود با یک پوسته بزرگتر احاطه می شود تا کره ی بزرگتری به شعاع  $r_l$  ایجاد گردد. (شکل صفحه ی بعد)



- کره قطع و کره مربوط به لیست همسایگی





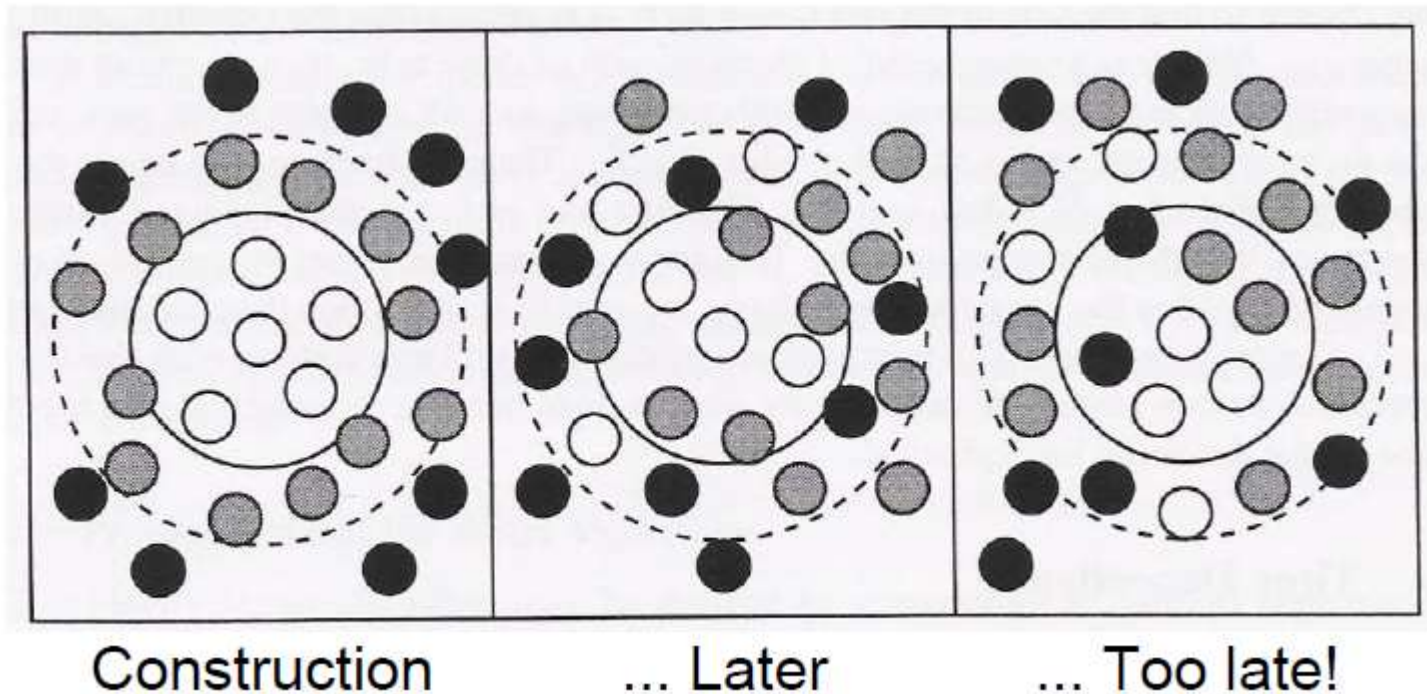
- در اولین مرحله شبیه سازی، لیستی از همسایه های هر اتم که در فاصله  $r_i$  نسبت به آن قرار دارند ساخته می شوند. این همسایه ها در یک آرایه ی بزرگ که آن را  $L$  می نامیم، ذخیره می شوند.

- به طور همزمان آرایه ی دومی از اشاره گرها به نام  $P$  که اندازه ی آن برابر  $N$  است، نیز تشکیل می شود. عنصر  $P[i]$  آرایه اشاره گر مشخص می کند که اولین همسایه اتم  $i$  در کدام موقعیت آرایه همسایه ها  $L$  قرار دارد.

- آخرین همسایه اتم  $i$  در عنصر  $P[i+1]-1$  لیست همسایه ها واقع است. بنابراین همسایه های اتم  $i$  در عناصر  $L[P[i]]$  تا  $L[P[i+1]-1]$  آرایه  $L$  ذخیره می شوند.

- اگر  $P[i+1]$  بزرگتر از  $P[i]$  نباشد یعنی مولکول  $i$  هیچ همسایه ای ندارد و می توان آن را از محاسبه حذف کرد.

- علت موفقیت لیست همسایگی ورله این است که پوسته اطراف  $r_c$  به قدر کافی ضخیم می شود که در فاصله دو به هنگام کردن لیست، امکان ورود یک مولکول از بیرون  $r_l$  به داخل  $r_c$  وجود ندارد.
- فاصله بین دو به هنگام کردن لیست معمولا در ابتدای برنامه مشخص می شود و اغلب برابر ۱۰ تا ۲۰ مرحله است. اگر  $r_l$  را کاهش دهیم بایستی فرکانس به هنگام کردن آن را افزایش دهیم و اگر  $r_l$  را افزایش دهیم می توانیم آن را دیرتر update کنیم.



# کد فرترین شعاع قطع و لیست همسایگی

Subroutine RearrangeAtoms

ACount=0

بردار اشاره گر

do i = 1,atomNum

P(i)=ACount+1

do j = 1,atomnum

DxTemp = atom(i).X - atom(j).X

DyTemp = atom(i).Y - atom(j).Y

DzTemp = atom(i).Z - atom(j).Z

r2t=((DxTemp)\*(DxTemp) + (DyTemp)\*(DyTemp)+ (DzTemp)\*(DzTemp))

if (r2t>0) then

if (r2t<=(4\*max(mat(ex(1).mat).a2,mat(ex(2).mat).a2))) then

بردار لیست همسایگی

ACount=ACount+1

L(ACount)=j

endif

endif

end do

end do

P(atomnum+1)=ACount+1

PosCheck=1

در اینجا شعاع همسایگی دو برابر میانگین هندسی ثابت شبکه دو ماده لحاظ شده است.

End Subroutine



## لیست مرتبط و تقسیم سلولی **Linked list and cell division**

- در روش لیست همسایگی ورله، حجم محاسبات فاصله ها بین اتم ها کاهش می یابد و دیگر احتیاج نیست که در هر مرحله برای تعیین همسایگان یک اتم جستجو صورت پذیرد و تنها در هر ۱۰ یا ۲۰ مرحله (یا بر اساس پیشینه جابجایی اتم ها) لیست همسایگی به روز می گردد.
- این روش علیرغم سریع تر بودن نسبت به روش قبلی (جستجو برای اتم های داخل شعاع بریدن در بین کل اتم ها در هر مرحله شبیه سازی) همچنان کند است زیرا برای یافتن لیست همسایگان بایستی تمام اتم ها جستجو شوند و مرتبه ی تعداد محاسبات از مرتبه ی  $O(N^2)$  است.
- **موقعی که اندازه  $N$  خیلی بزرگ است**، با استفاده از تقسیم سلول شبیه سازی **cell division** به قسمت های کوچک تر و ایجاد یک لیست مرتبط **Linked list** می توان حجم محاسبات را باز هم کاهش داد و به مرتبه ی  $O(N)$  رساند.



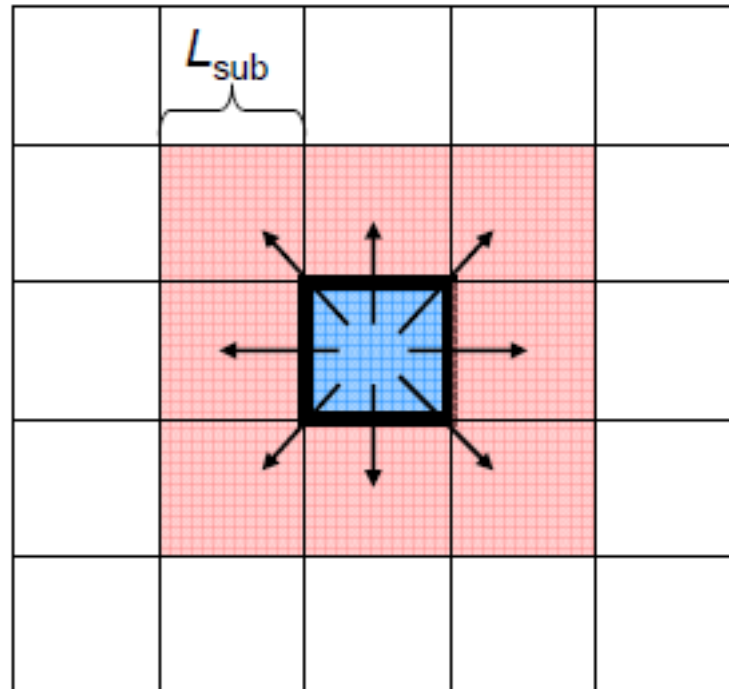


- در این روش ما سلول اصلی شبیه سازی را به  $M \times M \times M$  سلول کوچک تر تقسیم می نماییم. اندازه ی

تقسیم بندی بایستی در رابطه زیر صدق نماید:

$$L_{sub} = \frac{L_{cell}}{M} > r_l$$

- حال اگر ما به اتمی در سلول آبی نگاه می کنیم برای تعیین لیست همسایگی کافی است به دنبال اتم هایی باشیم که قبلا در ناحیه صورتی بوده اند:



- تعداد متوسط اتم ها در هر سلول عبارتند از

$$N_{\text{sub}} = N/M^3$$

- در این حالت به جای اینکه لازم باشد ما از مرتبه ی  $O(N^2)$  محاسبه انجام دهیم تا اتمهای همسایه را حساب کنیم فقط لازم است از مرتبه ی زیر است:

$$27 \times N_{\text{sub}} \times N$$

- نکته ی مهمی که در استفاده از الگوریتم لیست مرتبط و تقسیم سلولی **Linked list** and **cell division** بایستی توجه شود این است که **بایستی یک آرایه اضافی دیگری ایجاد کنیم که بگوید هر اتم در کدام سلول قرار دارد.**

## نکات دیگری در مورد شعاع قطع

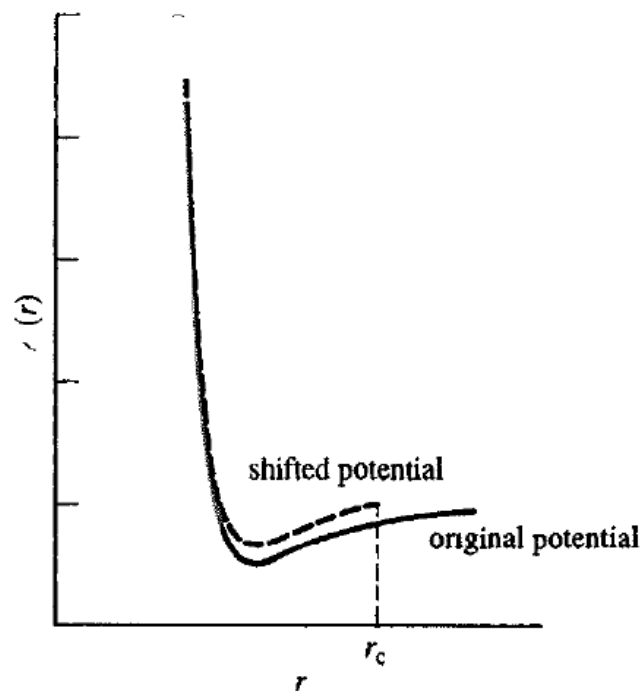
- وقتی در یک سیستم برهم کنش های الکترواستاتیکی بین مولکولها قوی باشد بهتر است برای برهمکنشهای الکترواستاتیکی و واندروالسی از **فاصله ی قطع مختلفی** استفاده گردد زیرا برد بر هم کنشهای الکترواستاتیکی بسیار بلندتر است.
- **روش برد دو گانه:** در این روش تمام برهم کنشهای مربوط به فاصله های کمتر از شعاع قطع کوچک تر به طور معمول در هر مرحله محاسبه می شوند. **در مقابل برهم کنشهای ناشی از اتمهایی که در فاصله حد وسط دو شعاع قطع باشد، فقط موقع به هنگام کردن لیست همسایه ها محاسبه می شوند** و در فاصله ی این به هنگام کردن ها ثابت نگه داشته می شوند.



## مشکلات مربوط به شعاع قطع و راهکارهایی جهت رفع آنها

- صرف نظر کردن از پتانسیل قطع پس از یک فاصله ی قطع، مشکلاتی را در تعریف یک پتانسیل و نیروی مناسب برای استفاده در شبیه سازی دینامیک مولکولی ایجاد می نماید.
- از آنجایی یک تابع پتانسیل استفاده شده در فاصله ی شعاع قطع یک ناپیوستگی دارد هر زمان که فاصله یک جفت اتم از شعاع قطع بیشتر شود پایستگی انرژی از بین می رود.

□ راه حل اول: پتانسیل منتقل شده (Shifted Potential):



$$v'(r) = v(r) - v_c \quad r \leq r_c$$

$$v'(r) = 0 \quad r > r_c$$

• **مشکل اصلی روش انتقال پتانسیل این است که نیرو همچنان ناپیوسته است.** مقدار ناپیوستگی برای

می شود.  $r_c = 2.5\sigma$  برابر با  $0.016 \frac{\epsilon}{\sigma}$  است. این ناپیوستگی منجر به ایجاد خطا در حل عددی معادلات دیفرانسیل

□ **راه حل دوم: پتانسیل نیرو- انتقالی (Shifted-force potential):** در این روش یک جمله خطی

کوچک به انرژی اضافه می شود تا مشتق آن در فاصله ی قطع صفر شود:

$$v'(r) = v(r) - v_c - \left( \frac{dv(r)}{dr} \right)_{r=r_c} (r - r_c) \quad r \leq r_c$$

$$v'(r) = 0 \quad r > r_c$$

با این کار ناپیوستگی به جای نیرو در گرادیان نیرو ایجاد می شود. نیرو به صورت پیوسته به مقدار صفر در  $r_c$  نزدیک می شود تا از مشکلات مربوط به ناپیوستگی در انرژی و ناپایداری حل عددی معادلات حرکت جلوگیری شود.



□ راه حل سوم: استفاده از تابع سوئیچ کننده (Switching function): روش دیگر حذف ناپیوستگی

در معادلات انرژی و نیرو، استفاده از یک تابع سوئیچ کننده است. این تابع معمولا یک چند جمله ای از فاصله

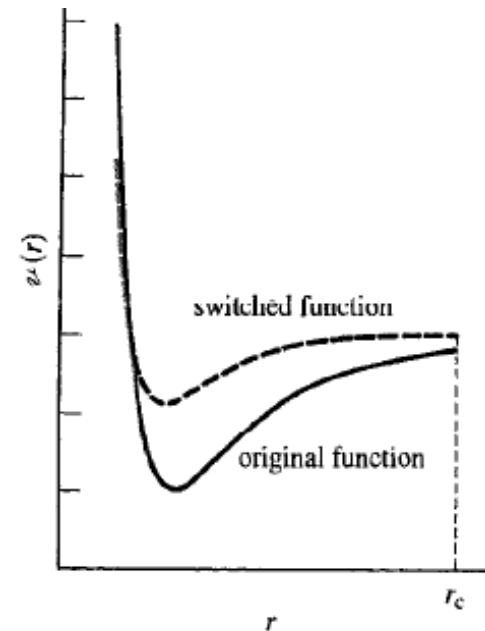
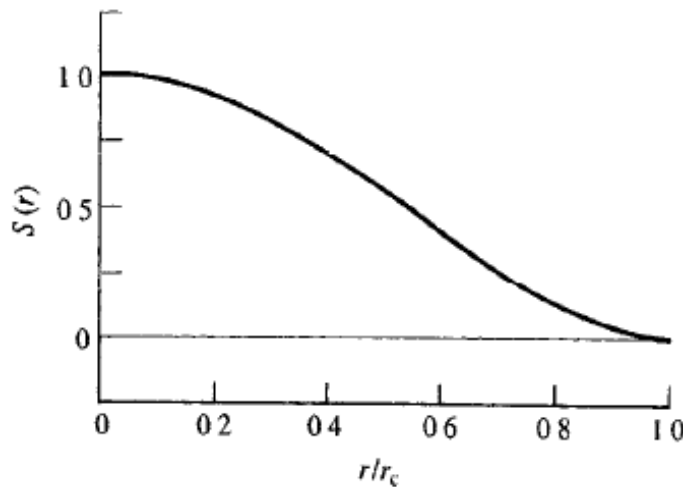
است که در تابع انرژی پتانسیل ضرب می شود. بنابراین پتانسیل تغییر یافته به صورت  $v'(r) = v(r)S(r)$

با پتانسیل واقعی ارتباط دارد.

• برخی از توابع سوئیچ کننده بر کل دامنه پتانسیل تا فاصله قطع، اعمال می شوند. نمونه ای از این توابع به

صورت زیر است:

$$v'(r) = v(r) \left[ 1 - 2 \left( \frac{r}{r_c} \right)^2 + \left( \frac{r}{r_c} \right)^4 \right]$$



- اعمال تابع سوئیچ کننده بر تابع پتانسیل در کل دامنه، مشکلاتی ایجاد می کند. زیرا به کلی **سطوح پتانسیل و ساختارهای تعادلی را به هم می ریزد.**

- یک روش معقول این است که پتانسیل را به تدریج بین دو مقدار قطع کم نماییم. پتانسیل در فواصل کوچکتر فاصله ی قطع کوچک، مقدار واقعی خود را دارد و بین دو فاصله  $r_l$  و  $r_u$  پتانسیل در تابع سوئیچ کننده که مقدار ۱ در حد پایین و مقدار صفر در حد بالا را دارد ضرب می شود. یک تابع سوئیچ کننده ساده

$$S = 1 \quad r_{ij} < r_l \quad \text{خطی به فرم زیر است}$$

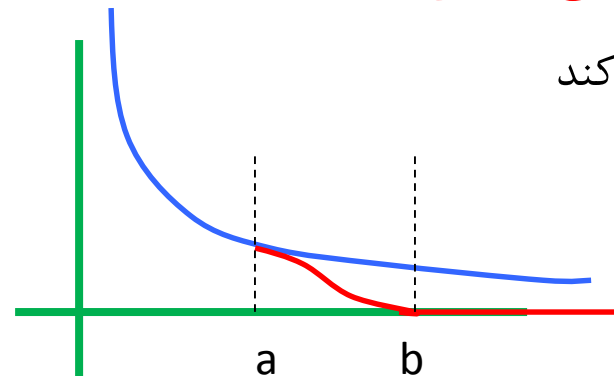
$$S = (r_u - r_{ij}) / (r_u - r_l) \quad r_l \leq r_{ij} \leq r_u$$

$$S = 0.0 \quad r_u < r_{ij}$$

- **یک تابع خطی چندان مناسب نیست، زیرا شرط پیوستگی نیرو برقرار نیست.** تابعی زیر پیوستگی نیرو را ایجاد می کند

$$S(r) = \begin{cases} 1 & r < a \\ 1 + y(r)^2 [2y(r) - 3] & a \leq r \leq b \\ 0 & r > b \end{cases} \quad X_1, \dots, X_n$$

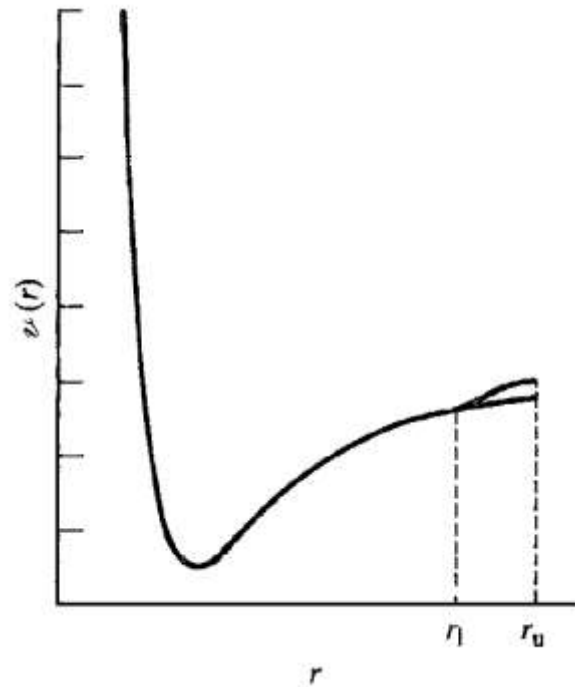
$$y(r) = \frac{r^2 - a^2}{b^2 - a^2}$$



- تابعی که شروط زیر را دارا باشد ضمن ایجاد پیوستگی نیرو با ایجاد پیوستگی مشتق دوم انرژی منجر به اطمینان از صحت الگوریتم انتگرال گیری می شود:

$$S_{r=r_1} = 1; \quad \left(\frac{dS}{dr}\right)_{r=r_1} = 0; \quad \left(\frac{d^2S}{dr^2}\right)_{r=r_1} = 0$$

$$S_{r=r_u} = 0; \quad \left(\frac{dS}{dr}\right)_{r=r_u} = 0; \quad \left(\frac{d^2S}{dr^2}\right)_{r=r_u} = 0$$



- یک نمونه تابع سوئیچ کننده که در محدوده باریک عمل می کند و

شروط پیوستگی انرژی، نیرو و مشتق دوم انرژی برای آن برقرار است به فرم

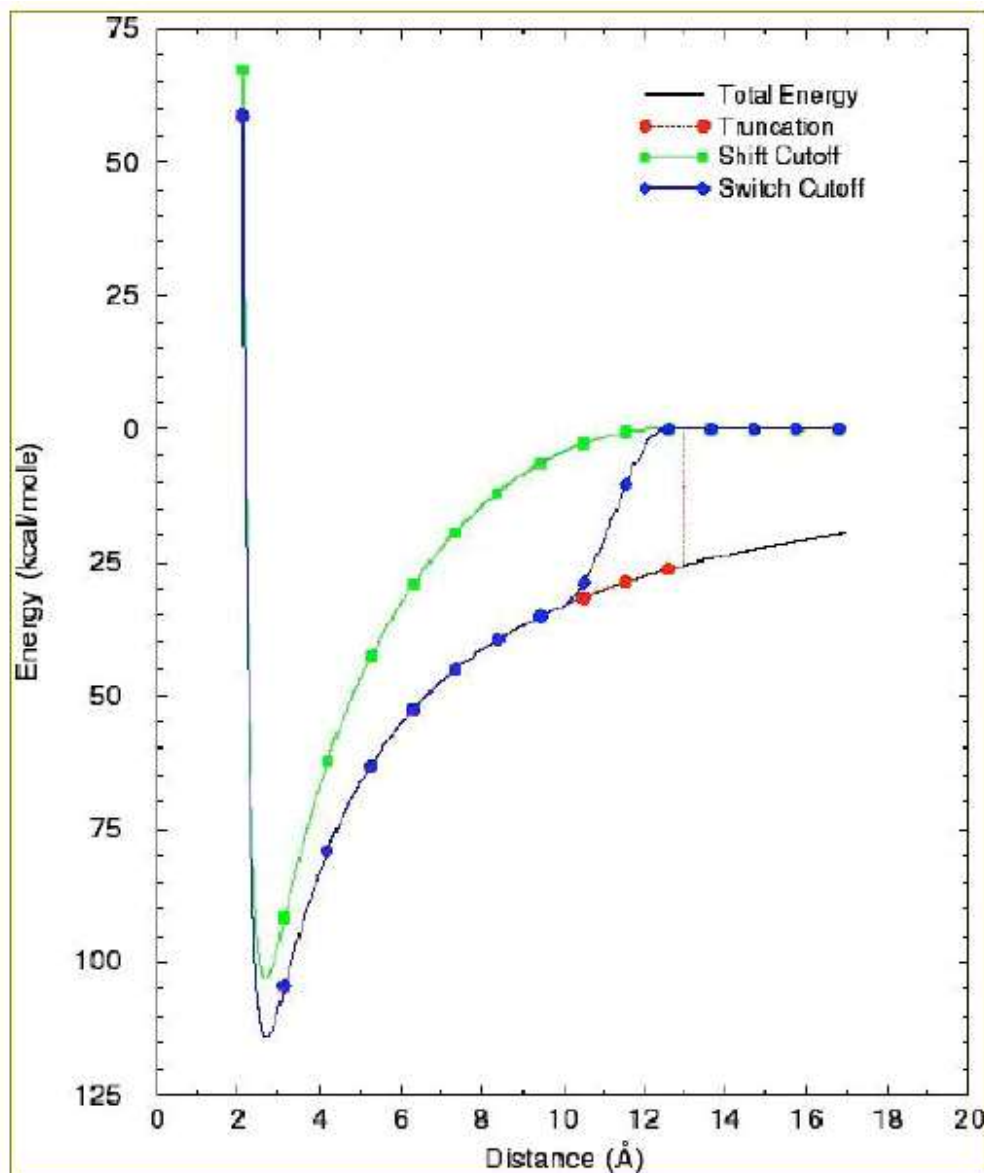
زیر است:

$$S(r) = c_0 + c_1 \left[\frac{r-r_1}{r_u-r_1}\right] + c_2 \left[\frac{r-r_1}{r_u-r_1}\right]^2 + c_3 \left[\frac{r-r_1}{r_u-r_1}\right]^3 + c_4 \left[\frac{r-r_1}{r_u-r_1}\right]^4 + c_5 \left[\frac{r-r_1}{r_u-r_1}\right]^5$$

$$c_0 = 1; \quad c_1 = 0; \quad c_2 = 0; \quad c_3 = -10; \quad c_4 = 15; \quad c_5 = -6$$



# خلاصه ای از اثر شعاع قطع بر انرژی پتانسیل و روشهای رفع آن



□ راه حل چهارم: در نظر گرفتن توابع خاص با توجه به شکل پتانسیل:

به عنوان نمونه پتانسیل تعمیم یافته مورس را در نظر بگیرید:

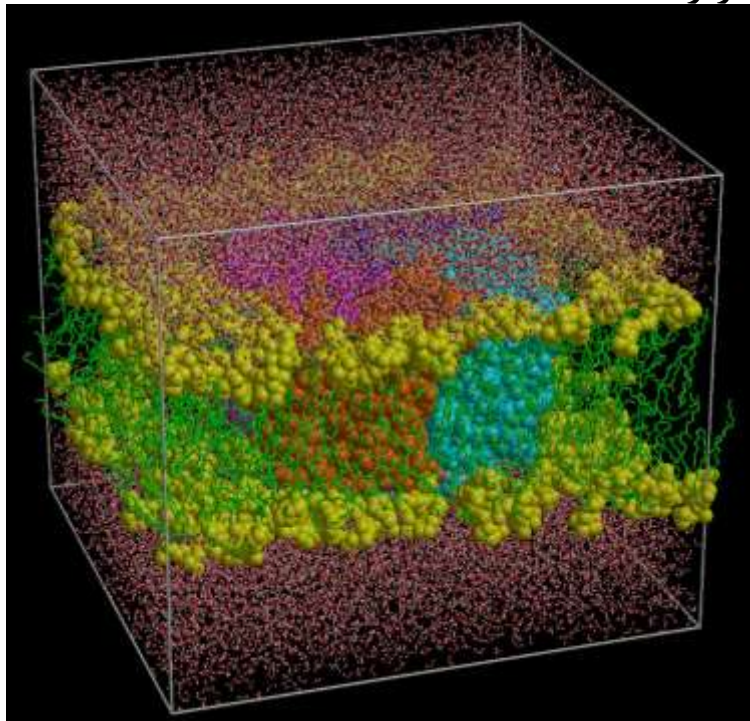
$$E_{GM}^{MC} = \sum_i \sum_{j>i} D_{MC} \left( e^{-N_{MC}\alpha_{MC}(r_{ij}-r_{0MC})} - N_{MC}e^{-\alpha_{MC}(r_{ij}-r_{0MC})} \right) \\ - D_{MC} \left( e^{-N_{MC}\alpha_{MC}(r_{cut}-r_{0MC})} - N_{MC}e^{-\alpha_{MC}(r_{cut}-r_{0MC})} \right) \\ - \frac{D_{MC}N_{MC}\alpha_{MC}}{\lambda} (1 - e^{\lambda(r_{ij}-r_{cut})}) \left( e^{-N_{MC}\alpha_{MC}(r_{cut}-r_{0MC})} - e^{-\alpha_{MC}(r_{cut}-r_{0MC})} \right)$$

مقدار پارامتر  $\lambda$  را روی عدد بزرگ مانند ۲۰ تنظیم می کنند تا اثر آن فقط در نزدیکی شعاع بریدن باشد.

# تکنیک هایی برای محاسبه ی نیروهای برد بلند

- با توجه به اینکه نیروهای الکترواستاتیکی به صورت  $1/r$  کوچک می شوند استفاده از شعاع قطع معمول باعث ایجاد خطای زیاد در محاسبه برهم کنش های یک سیستم دارای ذرات باردار می گردد.

• برای محاسبه تبادلات انرژی و نیرو بایستی سراغ روشهای دقیق تر رفت:



• روش جمع اوالد

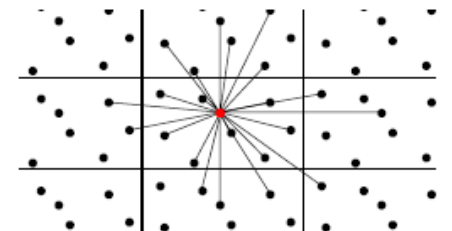
• روش جمع چند قطبی

• روش های میدان واکنش و بار مجازی

• روش درخت

• مثال: بررسی یک سیستم دارای پروتئینی با ذرات باردار

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} \frac{q_i q_j}{|\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{n}L|}$$





## روش جمع اوالد Ewald Summation Method

• روش جمع اوالد در سال ۱۹۲۱، برای مطالعه ی انرژی کریستال های یونی پیشنهاد شد.

• در این روش یک ذره در سلول مرکزی با همه ی ذرات دیگر در سلول مرکزی و ذرات موجود در سلولهای دیگر تبادلات نیرویی دارد.

• فرض کنید که در سلول مرکزی N ذره ی باردار قرار دارند.

• تبادلات الکترواستاتیکی بین همه ی ذرات باردار در سلول مرکزی

به صورت زیر می باشد:

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}$$

• و تبادلات الکترواستاتیکی بین همه ی ذرات باردار در سلول مرکزی با یکدیگر و با تمام سلولهای تصویری

دیگر به صورت زیر می باشد:

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{n}|}$$

$\mathbf{n} (= (n_x L, n_y L, n_z L))$  with  $n_x, n_y, n_z$  being integers):



- برای اینکه تبادلات بین اتمهای یکسان در سلول مرکزی را از رابطه ی فوق حذف نمایند، رابطه را به

$$V = \frac{1}{2} \sum'_{|\mathbf{n}|=0} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{n}|}$$

صورت زیر می نویسند:

- علامت پریم نشان می دهد که برای  $|\mathbf{n}| = 0$  حالت  $i=j$  بایستی حذف شود.

- نکته ای که در مورد رابطه ی فوق بایستی توجه شود این است که سری بالا، در فواصل بسیار کوچک بارها از هم، مقدار بزرگی دارد و از طرف دیگر به کندی با افزایش فاصله کاهش می یابد.

- روشی که برای محاسبه ی مجموع اوالد پیشنهاد شد این است که سری بالا را تبدیل به **جمع دو سری** کنیم که **خیلی سریع همگرا** می شوند.

$$\frac{1}{r} = \frac{f(r)}{r} + \frac{1-f(r)}{r}$$

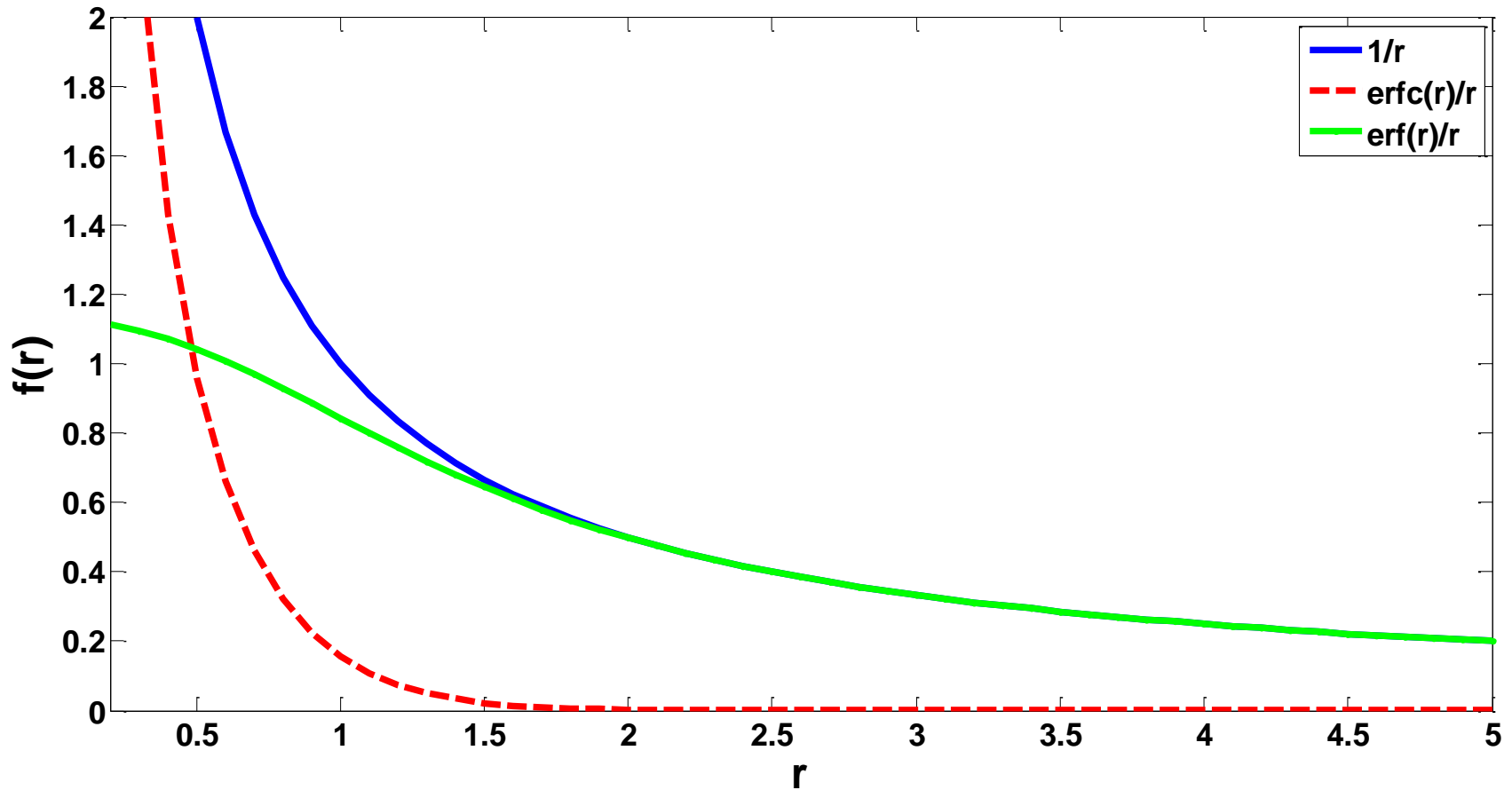
اساس ریاضی این روش به صورت زیر است:

- بنابراین هدف یافتن تابع  $f(r)$  است طوری که دو سری ایجاد شده سریعا همگرا شوند.



- در روش جمع اوالد تابع  $f(r)$  را به صورت تابع مکمل خطا لحاظ می نمایند:

$$\text{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{\infty} \exp(-t^2) dt$$

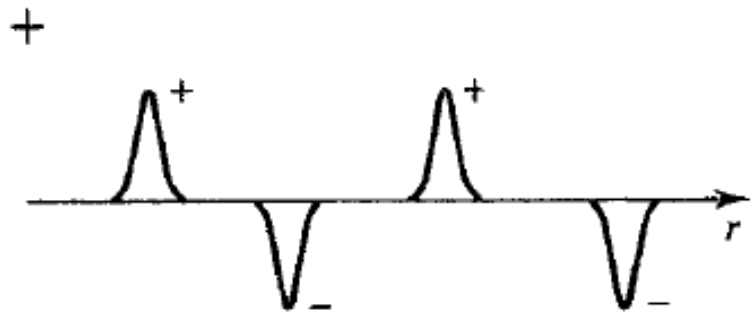
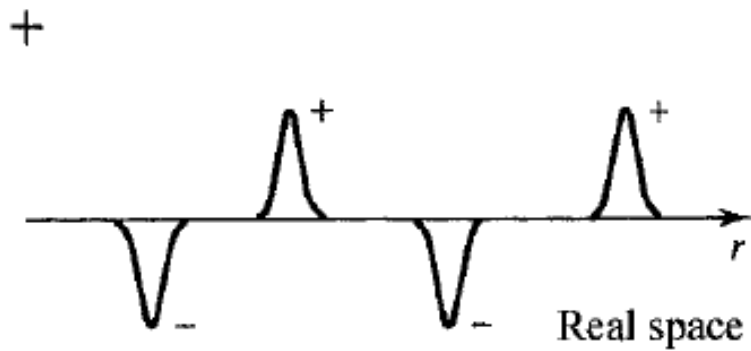
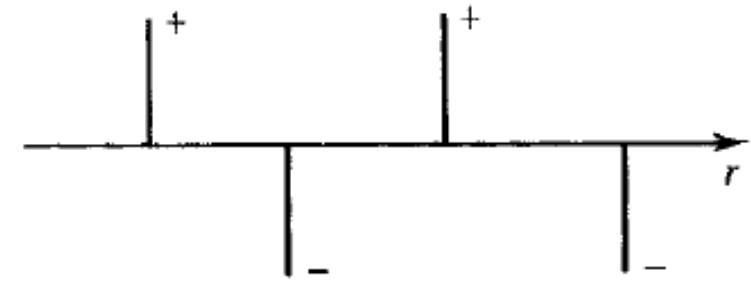


- دلیل انتخاب این تابع مکمل خطا به این ایده برمی گردد که فرض می کنند در اطراف هر بار نقطه ای (که دارای چگالی بار تابع دلتای دیراک است) یک بار (با همان اندازه ولی علامت متفاوت) با توزیع

نرمال گوسی در اطراف آن قرار دارد.

- توزیع بار گوسی دارای رابطه ی زیر است:

$$\rho_i(\mathbf{r}) = \frac{q_i \alpha^3}{\pi^{3/2}} \exp(-\alpha^2 r^2)$$



Reciprocal space

• بنابراین رابطه ی تبادلات الکترواستاتیکی بین بارهای نقطه ای تبدیل به تبادلات بین بارهایی با توزیع متفاوت می شود.

• با توجه به اینکه ما  $1/r$  را با دو جمله جایگزین نمودیم دو سری متفاوت خواهیم داشت.

• سری اول که به سرعت در فواصل نسبتا کمی از سلول مرکزی همگرا می شود دارای رابطه ی زیر

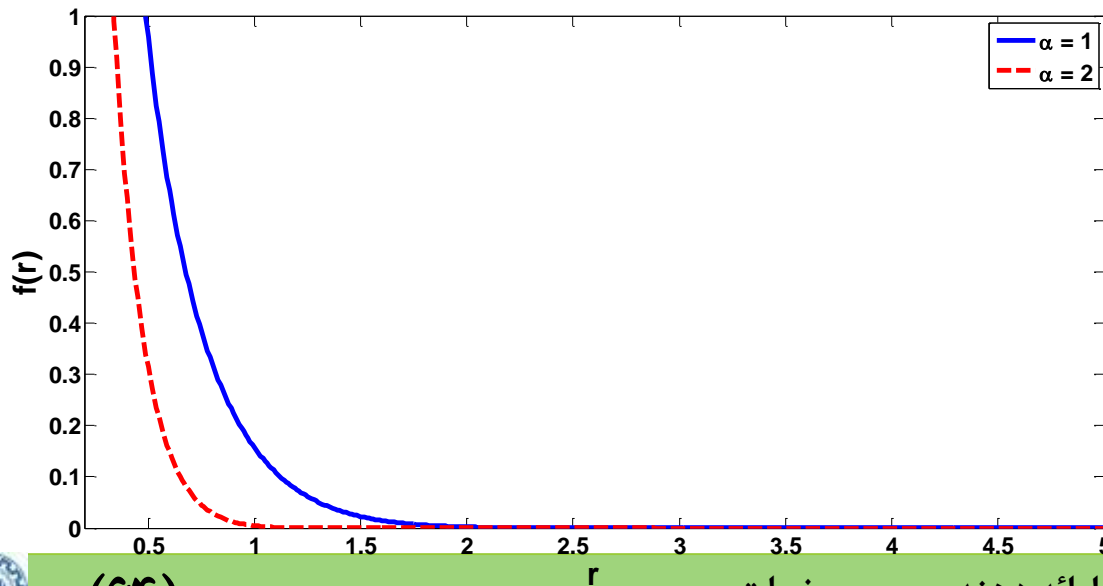
$$\psi = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum'_{|\mathbf{n}|=0} \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0} \frac{\text{erfc}(\alpha|\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{n}|)}{|\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{n}|}$$

است:

• نرخ همگرایی سری فوق (یا به عبارتی همان سری اول) وابسته به پهنای تابع توزیع گوسی یا همان  $\alpha$  دارد. با

افزایش آلفا همگرایی سری اول

سریع تر می شود.





- به طور کلی بهتر است  $\alpha$  را طوری انتخاب نماییم که تنها جملات مربوط به  $|n| = 0$  محاسبه شوند یعنی اینکه به قدری سری همگرایی سریعی دارد که محاسبه ی تبدلات بین بارهای موجود در سلول مرکزی برای محاسبه ی سری اول کفایت نماید.
- یا در صورتیکه که شعاع قطع تعریف شده است  $\alpha$  را طوری تعیین نماییم که محاسبه ی تبدلات بین اتمهایی که در فاصله ی شعاع قطع از هم قرار دارند کفایت کند و نیازی به محاسبه ی تبدلات با سلول های تصویری نباشد.

## ❖ محاسبات مربوط به سری دوم

- سری دوم مطابق با جمله ی  $\frac{1-f(r)}{r}$  است.
- این سری در فضای حقیقی به کندی همگرا می شود ولی می توان نشان داد که در فضای **reciprocal** یا تبدیل فوریه به سرعت همگرا می شود.



- سری دوم را می توان به کمک تبدیل فوریه به صورت زیر نوشت:

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{1}{\pi L^3} \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0} \frac{4\pi^2}{k^2} \exp\left(-\frac{k^2}{4\alpha^2}\right) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{ij})$$

- این مجموع در فضای reciprocal (یا همان تبدیل فوریه) انجام شده است. بردار  $\mathbf{k}$  بردار فضای reciprocal است و بوسیله رابطه زیر با بردار سلول های تصویری ارتباط دارد:

$$\mathbf{k} = 2\pi\mathbf{n}/L.$$

- سری دوم در فضای reciprocal سریعاً همگرا می شود ولی با افزایش آلفا تعداد جملاتی که بایستی برای سری دوم در نظر گرفت افزایش می یابد.

- مقدار مناسب برای آلفا  $\alpha \sim 5/L$  است و حدود ۱۰۰-۲۰۰ بردار reciprocal نیاز است تا سری همگرا شود.
- مجموع توابع گوسی در فضای حقیقی شامل تبادلات توزیع های گوسی با هم می شود که بایستی این اثر را

$$\mathcal{V} = -\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=1}^N \frac{q_k^2}{4\pi\epsilon_0}$$

حذف نمود:

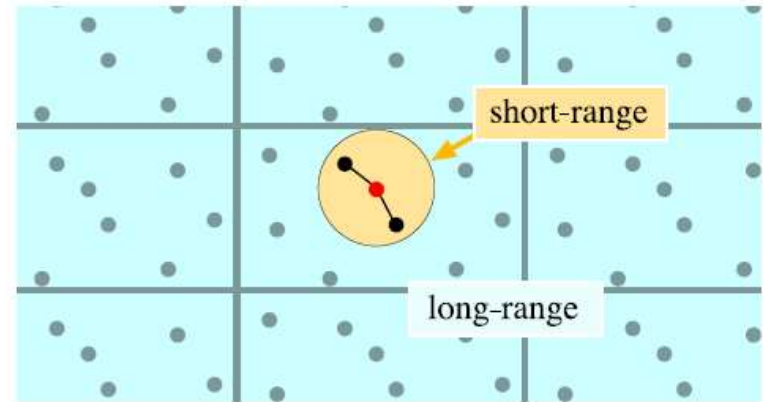
# Ewald Summation

• تبدیل پتانسیل به دو بخش برد کوتاه و برد بلند:

- electrostatic potential

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \sum'_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} \frac{q_i q_j}{|\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{n}L|}$$

straightforward summation  
impracticable



- **Trick 1:** Split problem into 2 parts with help of:

$$V = \underbrace{V_{dir}}_{\text{direct space}} + \underbrace{V_{rec}}_{\text{fourier space}}$$

smooth  $V_{rec}$  needs only few  $\mathbf{k}$

- فرم کلی جمع اوالد به صورت زیر خواهد بود:

$$\psi = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left\{ \begin{array}{l} \sum_{|\mathbf{n}|=0}^{\infty} \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0} \frac{\text{erfc}(\alpha|\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{n}|)}{|\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{n}|} \\ + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{1}{\pi L^3} \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0} \frac{4\pi^2}{k^2} \exp\left(-\frac{k^2}{4\alpha^2}\right) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{ij}) \\ - \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=1}^N \frac{q_k^2}{4\pi\epsilon_0} \end{array} \right.$$

- روش جمع اوالد یکی از دقیق ترین روشها جهت محاسبه ی تبادلات دور برد است.

- این روش به طور وسیعی در شبیه سازی سیستمهای یونی و باردار استفاده می شود. استفاده از این روش در دولایه های لیپیدی، پروتئین ها و DNA رو به افزایش است.



## بهینه تر کردن روش جمع اوالد

- زمان پردازش مورد نیاز برای یک جمع اوالد کاملاً بهینه از مرتبه  $N^2$  است. با این وجود با در نظر گرفتن شعاع قطع، بیشترین بخش محاسبات مربوط به بخش فضای reciprocal است که برای یک شعاع قطع ثابت (برای بخش حقیقی و بخش reciprocal) منجر به داشتن محاسباتی در فضای reciprocal از مرتبه  $N^2$  می شود.
- راه حل های مختلفی برای افزایش کارایی محاسبه جمع فضای reciprocal ارائه شده است. یکی از بهترین روشها، استفاده از تبدیل فوریه سریع (FFT) یا همان روش Particle Mesh Ewald (PME) است که زمان پردازش را از مرتبه  $N^2$  به مرتبه  $N \log N$  کاهش می دهد. افزون بر آن، اگر پهنای توزیع گاوسی به اندازه  $N$  کافی بزرگ انتخاب شده باشد و بتوان شعاع قطعی کوچکی انتخاب نمود محاسبات فضای حقیقی از مرتبه  $N$  شده و در کل مرتبه محاسبات  $N \log N$ ، PME خواهد بود.
- برای استفاده از FFT باید داده ها ناپیوسته باشند. بنابراین بارها را با یک شبکه مش بندی جایگزین می نماییم. هر یک از بارهای نقطه ای اتمی باید به گونه ای در نقاط شبکه ای توزیع شود که همان پتانسیل الکترواستاتیکی مربوط به بارهای اتمی به دست آید. هر چه تعداد مش ها بیشتر شود دقت و زمان محاسبات افزایش می یابند.

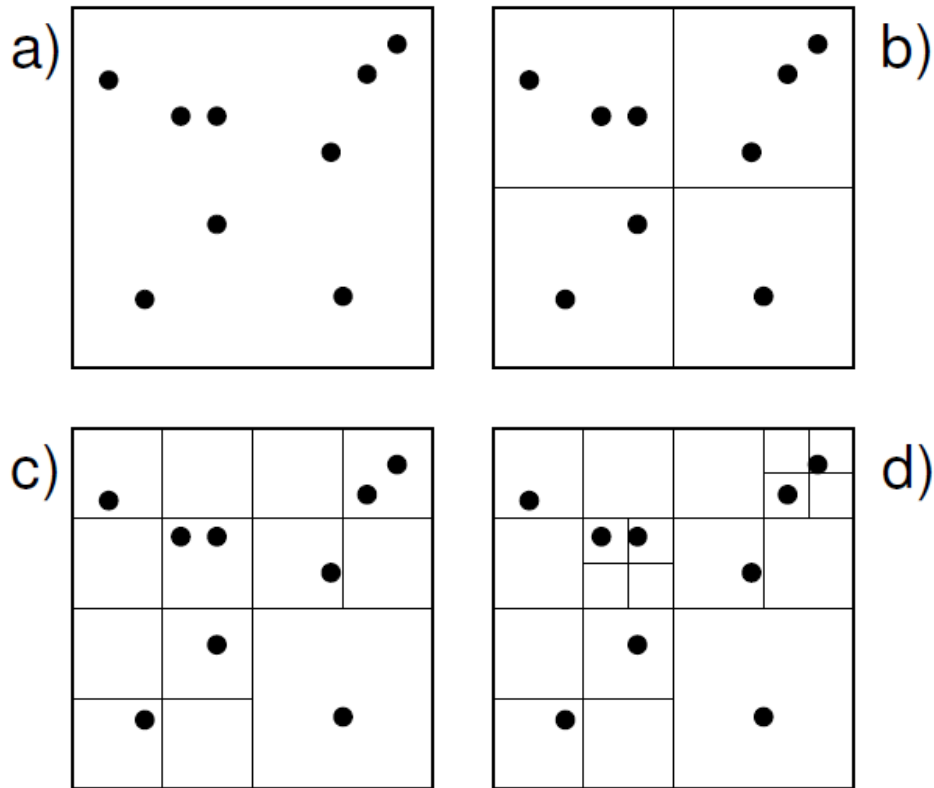


# روش درخت Barnes-Hut Tree Algorithm

- در محاسبه ی نیروهای بین ذرات مختلف یک نکته تشخیص همسایه های نزدیک از همسایه های خیلی دور است.
- در روش معمولی ما تمایزی در محاسبه ی نیروها بین همسایه های خیلی دور و همسایه های نزدیک نمی دهیم و همان حجم محاسباتی را استفاده می نمایم.
- در سال ۱۹۸۶ ، بارنس و هات یک روشی را در فضای فیزیکی پیشنهاد نمودند که فضا را به صورت سیستماتیک تقسیم بندی می نمود که یک ارتباطی را بین هر ذره و همسایه هایش ایجاد نماید که به ساختار درخت معروف است.
- ساختار درخت ایجاد شده می تواند گروهی از همسایه های دور را به عنوان یک ذره ببیند و تعداد محاسبات نیرویی را کاهش دهد.
- این روش در ابتدا برای محاسبه ی نیروهای گرانشی بین اجرام فضایی توسعه یافت.



- در این روش ابتدا کل ناحیه سه بعدی به ۸ سلول (در حالت دو بعدی ۴ سلول) تقسیم بندی می شود، سپس در صورتیکه در هر سلول بیش از یک ذره باشد دوباره آن سلول به ۸ سلول کوچکتر تقسیم می شود. این فرآیند تا زمانی ادامه می یابد که در هیچ سلولی بیش از یک ذره قرار نگیرد. شکل زیر تقسیم بندی سلولی برای حالت دو بعدی را نشان می دهد.



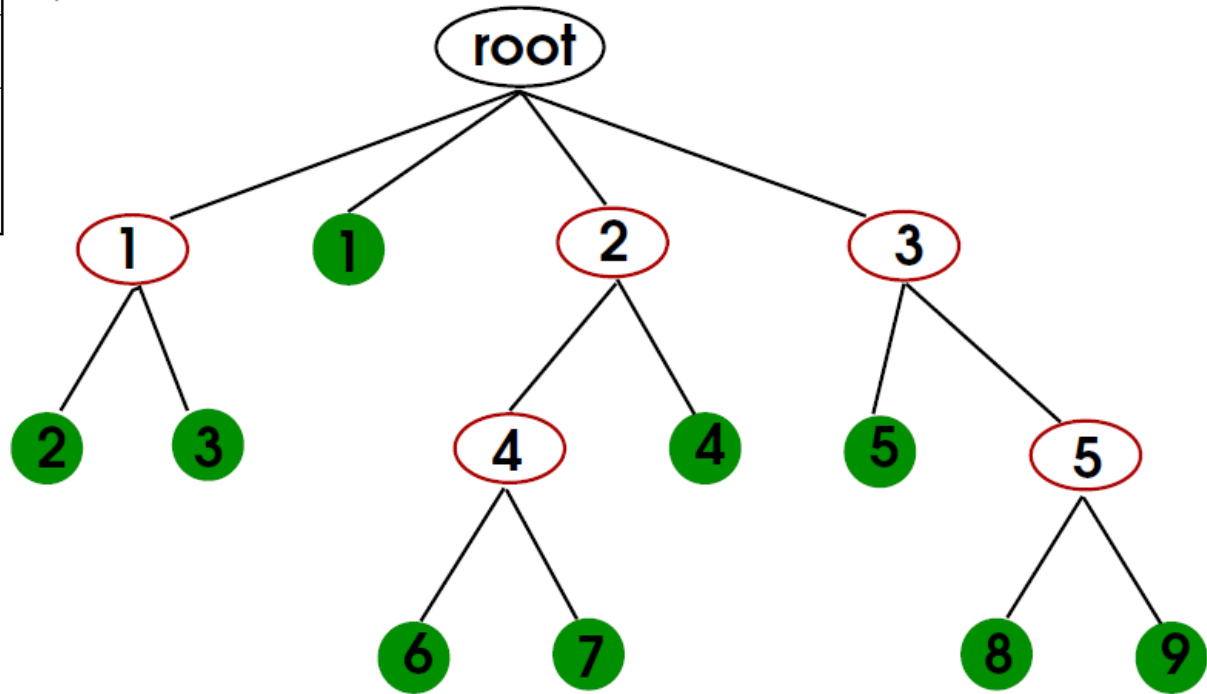
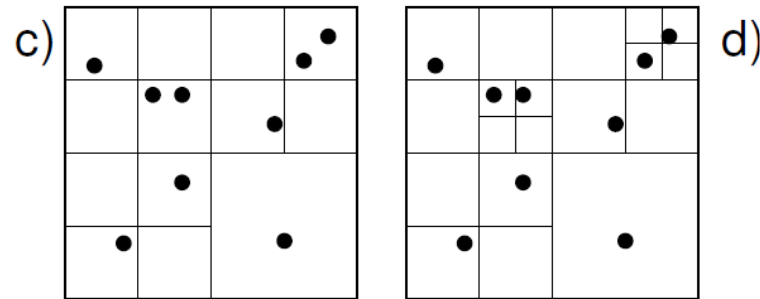
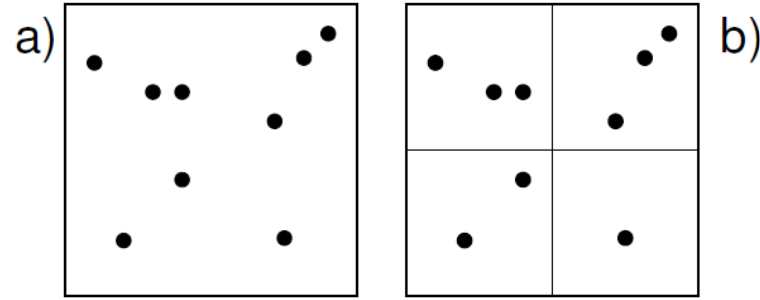
- اگر یک سلول خالی باشد آن سلول صرف نظر می شود.
- اگر یک ذره در یک سلول باشد آن سلول به عنوان **برگ** ذخیره می شود ولی اگر بیش از یک ذره داخل سلول باشد، سلول به عنوان **شاخه** یا **Node** ذخیره می شود و مجددا تقسیم می شود تا اینکه به برگ برسیم.
- بردار اشاره گر به والدین هر برگ و شاخه نیز بایستی در ساختار درخت ایجاد و نگهداری شوند.





# ساختار اطلاعات درخت

• درخت



- بعد از ایجاد درخت، برای شاخه های نشان داده شده (بوسیله ی ۵ بیضی صفحه ی قبل)، می توانیم اطلاعات مربوط به محتوای فیزیکی آنها نظیر مرکز بار و ممان های چند قطبی به صورت زیر محاسبه و ذخیره نماییم:

$$r_{coc} = \frac{\sum_i |q_i| \mathbf{r}_i}{\sum_i |q_i|}$$

$$M = \sum_i q_i \quad \alpha, \beta = x, y, z$$

$$D_\alpha = \sum_i q_i r_{i\alpha}$$

$$Q_{\alpha\beta} = \sum_i q_i (3r_{i\alpha} r_{i\beta} - r_i^2 \delta_{\alpha\beta})$$

- این اطلاعات می توانند بعدا جهت محاسبه ی نیرو وقتی که شاخه ها به صورت یک بار فشرده لحاظ می گردند استفاده شوند.
- این اطلاعات می توانند به صورت سطح به سطح با شروع از برگها و عبور از شاخه ها به ریشه درخت برسند.

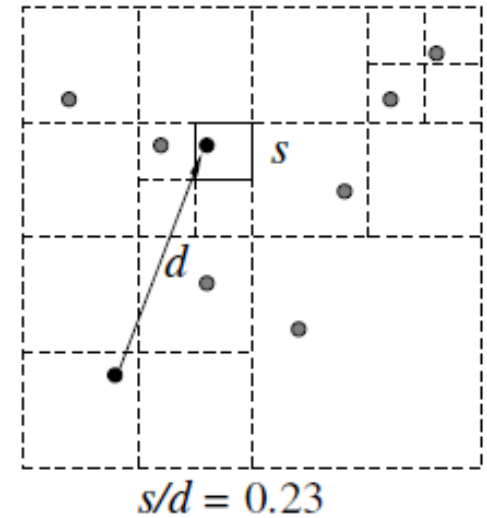
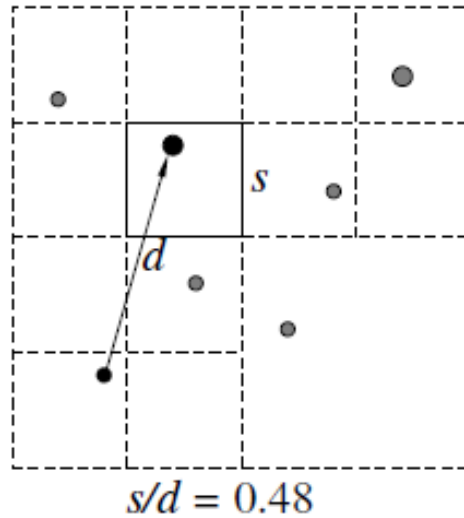
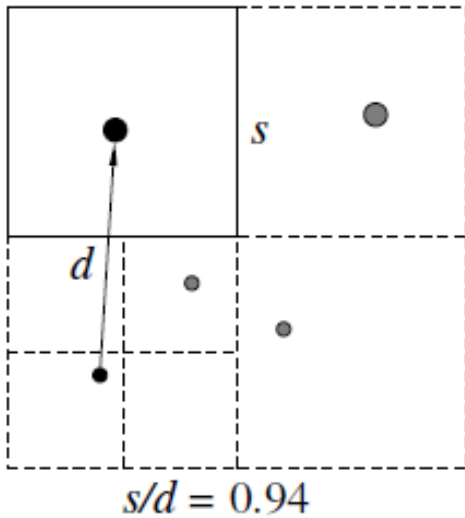


- ساختار درخت، ابزار لازم برای تشخیص ذرات نزدیک و دور را فراهم می آورد بدون آنکه لازم باشد فاصله ی دقیق بین ذرات محاسبه شود.
- نیروی بین همسایه های نزدیک مستقیماً محاسبه می شود ولی ذرات دورتر با هم گروه می شوند تا شبه ذرات تشکیل شوند.
- یک لیست تبادلی برای هر ذره ایجاد می شود به این صورت که از نودهای مختلف درخت شروع شده و تصمیم گیری می شود که آیا نیاز به تقسیم بیشتری است یا خیر.
- یک معیار برای پذیرش قبولی نزدیک بودن استفاده می شود که توسط Barnes and Hut معرفی شده و به صورت  $\frac{s}{d}$  است که  $s$  اندازه سلول و  $d$  فاصله ی مرکز بار سلول از ذره مورد نظر است.
- روند کار بدین صورت است که با شروع از ریشه ی درخت، اندازه ی نود فعلی (یا همان شاخه) که  $s$  است تقسیم بر فاصله مرکز نود تا ذره مورد نظر یعنی  $d$  می شود. اگر  $\frac{s}{d}$  کوچکتر از یک مقدار از قبل معین  $\theta$  باشد آنگاه ساختار داخلی شبه ذرات صرف نظر شده و آن را به لیست تبادلات آن ذره اضافه می نمایند. وگرنه این نود به نودهای دختر تقسیم شده و برای هر یک از نودهای دختر نسبت  $s/d$  چک می شود.



- پس از مرتب کردن ذرات و قرار دادن آنها در شاخه های درخت، برای محاسبه ی نیروی روی ذره  $i$  ام از بالاترین مرتبه ی درخت شروع نموده و نسبت زیر را چک می نماییم:

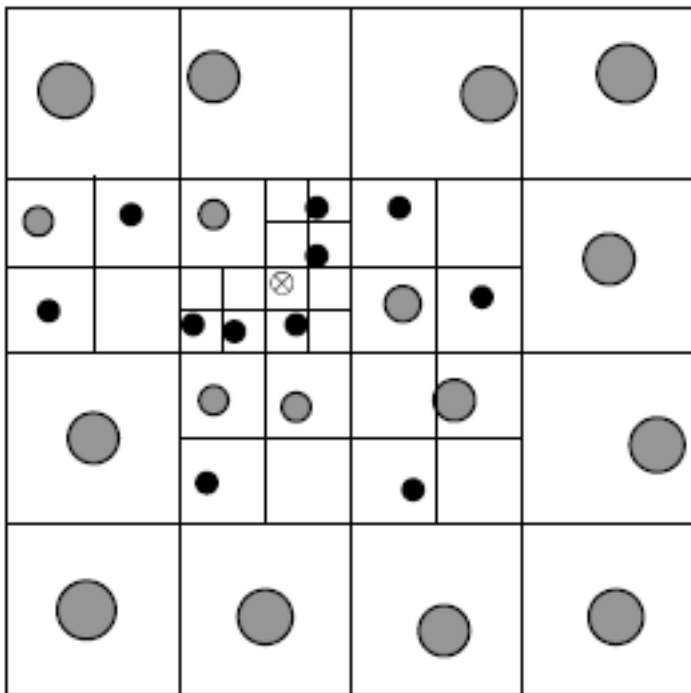
$$\frac{s}{d} \quad \theta = 0.4$$



- در صورتی که نسبت  $s/d$  برای سلول خاصی کمتر از مقدار معینی مثلا  $\theta = 0.4$  باشد، آن سلول و ذرات داخل آن همگی به صورت یک ذره واحد که موقعیت آن در مرکز بار آن سلول قرار دارد و باری برابر با بار کل آن سلول دارد در نظر گرفته می شود.



ولی اگر نسبت  $s/d$  از حد معین  $\theta$  مذکور بیشتر باشد، یک مرتبه پایین تر رفته و نسبت مذکور برای سلول های پایین تر محاسبه می شوند. این کار تا زمانی ادامه می یابد که  $\theta$  برای سلول مورد نظر کمتر از حد معین مورد نظر باشد و یا در سلول تنها یک ذره قرار داشته باشد (یعنی به برگ درخت رسیده ایم).



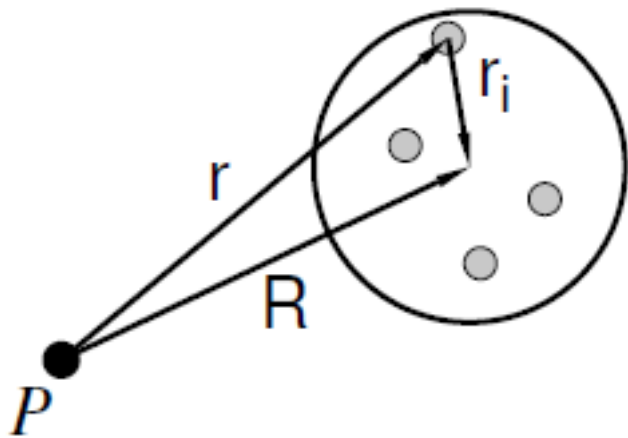
- پس از بررسی یکی از شاخه های اصلی درخت، نوبت به باقی شاخه ها می رسد.
- نتیجه این فرآیند یک لیست تبادل است که طول آن هم به  $N$  و هم به  $\theta$  بستگی دارد.
- شکل روبرو لیست تبادل تولید شده برای ذره  $\otimes$  است که بر اساس  $\theta=1$  محاسبه شده است. ذرات مشکی بارهای تکی هستند و ذرات خاکستری نودها هستند.

- حالت  $\theta=0$  معادل با محاسبه ی تبادل بین تمام ذرات با هم است که از همان مرتبه  $O(N^2)$  حجم محاسباتی دارد و در واقع علاوه بر محاسبه ی نیروی بین ذرات ما مجبور بوده ایم درخت و اطلاعات آن را حساب نماییم یعنی اتلاف زمان زیاد، که با توجه به محاسبه ی نیروها بین تمام ذرات تشکیل درخت معنی ندارد و بی فایده بوده و صرفا اتلاف وقت است.

- بعد از تشکیل لیست تبدالی برای هر ذره، آنچه باقی می ماند محاسبه ی نیروها و پتانسیل ها است.

- برای لحاظ کردن تبادل بین یک ذره و یک نود بایستی که از ویژگی بسط چند قطبی نود یا شاخه مربوطه استفاده نماییم.

- **پتانسیل در محل ذره P به علت تبادل با نود node** یا شبه ذره (نشان داده شده در دایره) در شکل زیر برابر خواهد بود با:



$$\Phi(\mathbf{R}) = \sum_i \Phi_i(\mathbf{R} - \mathbf{r}_i),$$

- بردار  $\mathbf{r}_i$  بردار از ذره نشان داده شده تا مرکز بار شبه ذره است.

- برای پتانسیل الکترواستاتیکی داریم:

$$\Phi_i(\mathbf{R} - \mathbf{r}_i) = \frac{q_i}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_i|}$$

- بسط این پتانسیل با فرض کوچک بودن  $\mathbf{r}$  تا مرتبه چهارقطبی برابر است با:

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{R}) &= \sum_i q_i \left[ 1 - \mathbf{r}_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \frac{1}{2} \mathbf{r} \mathbf{r} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \dots \right] \frac{1}{R} \\ &= \sum_i q_i \left[ 1 - x_i \frac{\partial}{\partial x} - y_i \frac{\partial}{\partial y} - z_i \frac{\partial}{\partial z} \right. \\ &\quad + \frac{1}{2} x_i^2 \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{2} y_i^2 \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{1}{2} z_i^2 \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial}{\partial z} \\ &\quad + \frac{1}{2} x_i y_i \left( \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} y_i z_i \left( \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} x_i z_i \left( \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] \frac{1}{R} \\ &= \sum_i q_i \left[ \frac{1}{R} + x_i \frac{x}{R^3} + y_i \frac{y}{R^3} + z_i \frac{z}{R^3} \right. \\ &\quad + \frac{1}{2} x_i^2 \left( -\frac{1}{R^3} + \frac{3x^2}{R^5} \right) + \frac{1}{2} y_i^2 \left( -\frac{1}{R^3} + \frac{3y^2}{R^5} \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} z_i^2 \left( -\frac{1}{R^3} + \frac{3z^2}{R^5} \right) \\ &\quad \left. + x_i y_i \left( \frac{3xy}{R^5} \right) + y_i z_i \left( \frac{3yz}{R^5} \right) + x_i z_i \left( \frac{3xz}{R^5} \right) \right] \end{aligned}$$

• با مرتب سازی داریم:

$$\Phi(R) = \frac{M}{R} + \sum_{\alpha} \frac{r_{\alpha} D_{\alpha}}{R^3} + \sum_{\alpha\beta} \frac{1}{2} Q_{\alpha\beta} \frac{r_{\alpha} r_{\beta}}{R^5},$$

• در اینجا  $M, D_{\alpha}, Q_{\alpha\beta}$  به ترتیب بار (تک قطبی)، دو قطبی و چهارقطبی شبه ذرات هستند که به صورت زیر

تعریف می شوند:

$$M = \sum_i q_i$$

$$D_{\alpha} = \sum_i q_i r_{i\alpha}$$

$$Q_{\alpha\beta} = \sum_i q_i (3r_{i\alpha} r_{i\beta} - r_i^2 \delta_{\alpha\beta})$$

• اندیس های  $\alpha$  و  $\beta$  به مولفه های مختصات  $X; Y; Z$  ارتباط دارند و داریم

$$r_{i\alpha} = (x_i, y_i, z_i)$$

• میدان الکتریکی را می توان با مشتق گرفتن از پتانسیل نسبت به مکان یافت:

$$\mathbf{E}(\mathbf{R}) = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \Phi(R),$$



- با بسط ممان های چند قطبی ما می توانیم به یک فرم مناسب جهت پیاده سازی در کد برسیم. برای یک مولفه  $\gamma$  داریم:

$$E_\gamma = \frac{r_\gamma}{R^3} M + \sum_\alpha \left( \frac{3r_\alpha r_\gamma}{R^5} - \frac{r_\alpha \delta_{\alpha\gamma}}{R^3} \right) D_\alpha + \sum_{\alpha\beta} \frac{5r_\alpha r_\beta r_\gamma}{R^7} \cdot \frac{1}{2} Q_{\alpha\beta} - \sum_\alpha \frac{r_\alpha}{R^5} Q_{\alpha\gamma}.$$

- به عنوان نمونه برای مولفه X داریم:

$$\begin{aligned} E_x = & \frac{x}{R^3} \sum_i q_i \cdot \\ & - \left( \frac{1}{R^3} - \frac{3x^2}{R^5} \right) \cdot \sum_i q_i x_i + \frac{3xy}{R^5} \cdot \sum_i q_i y_i + \frac{3xz}{R^5} \cdot \sum_i q_i z_i \cdot \\ & + \left( \frac{15x^3}{R^7} - \frac{9x}{R^5} \right) \cdot \frac{1}{2} \sum_i q_i x_i^2 + \left( \frac{15xy^2}{R^7} - \frac{3x}{R^5} \right) \cdot \frac{1}{2} \sum_i q_i y_i^2 \\ & + \left( \frac{15xz^2}{R^7} - \frac{3x}{R^5} \right) \cdot \frac{1}{2} \sum_i q_i z_i^2 + \left( \frac{15x^2y}{R^7} - \frac{3y}{R^5} \right) \cdot \sum_i q_i x_i y_i \\ & + \left( \frac{15x^2z}{R^7} - \frac{3z}{R^5} \right) \cdot \sum_i q_i x_i z_i + \left( \frac{15xyz}{R^7} \right) \cdot \sum_i q_i y_i z_i. \end{aligned}$$

- دو مولفه  $Y$  و  $Z$  را می توان با چرخش سیکلیک بدست آورد.



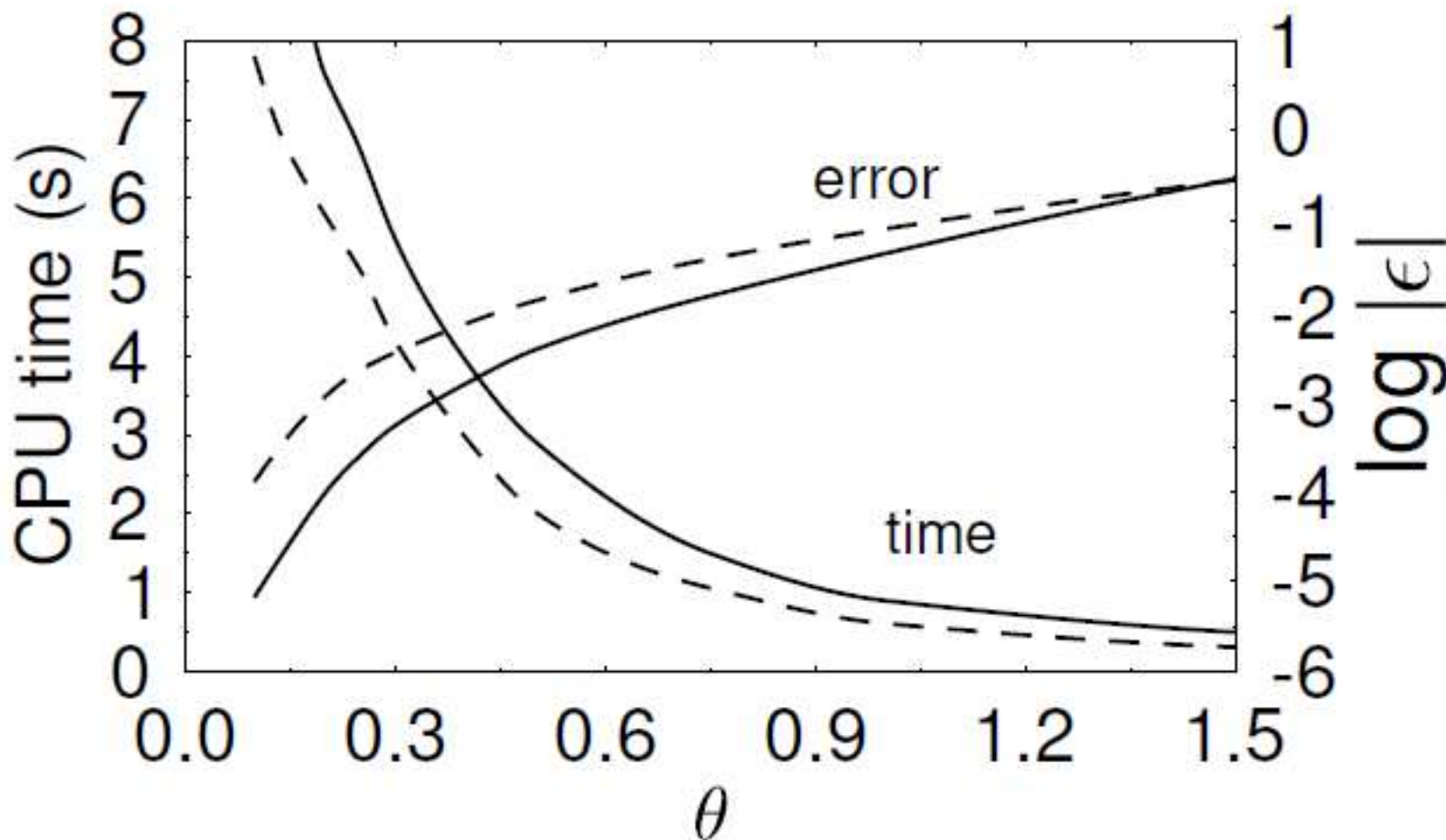
## بار محاسباتی روش درخت

- اینکه چند تقسیم بایستی صورت پذیرد تا به ذرات برسیم از روی اندازه متوسط یک سلول حاوی یک ذره بدست می آید.
- **حدود  $\log N$  تقسیم لازم است تا از ریشه به یک برگ برسیم.**
- درخت دارای  $N$  برگ است لذا زمان لازم برای تشکیل درخت متناسب با  $O(N \log N)$  است.
- **در عمل تولید درخت حدود ۳ الی ۵ درصد کل زمان محاسبه نیروها را شامل می شود و هر گام زمانی این تولید درخت صورت می پذیرد.**
- انتخاب مناسب برای  $\theta$  معمولاً بین 0.3 تا 1 است.
- **تعداد متوسط تبادلات برای یک ذره (با فرض توزیع یکنواخت و همگن در یک کره در اطراف ذره مورد نظر) با فرض غیر صفر بودن  $\theta$  برابر است با:**

$$n_{int} \sim \log N / \theta^2,$$
- بنابراین زمان لازم برای محاسبه ی نیرو روی یک ذره داده شده از مرتبه ی  $O(\log N)$  است و برای کل ذرات با توجه به داشتن  $N$  ذره، زمان مورد نیاز از مرتبه ی  $O(N \log N)$  خواهد بود.



# مصالحة ای بین زمان پردازش به ازای هر گام انتگرال گیری و خطای متوسط نیرو به عنوان تابعی از $\theta$



monopole terms only (dashed lines) and quadrupole terms (solid lines).



## روش سلولهای چند قطبی Cell Multipole Method

- در این روش ابتدا فضای شبیه سازی به تعدادی سلول یکسان تقسیم می شوند.
- ممان های چند قطبی هر سلول (منظور بار، دو قطبی، چهار قطبی و ... است) با در نظر گرفتن تمام بارهای موجود در آن سلول بدست می آیند.
- برای محاسبه ی تبادلات بین ذراتی که با هم یک سلول فاصله دارند از فرمول کلاسیک تبادلات الکترواستاتیکی استفاده می شود ولی برای ذراتی که در سلولهای دورتر هستند لازم نیست تبادل با سلول مورد نظر از طریق جمع تبادلات بین بارهای تک تک ذرات با هم بدست آید. بلکه کافی است تبادلات بین ذره باردار در سلول مورد نظر تنها با بسط تیلور یا ممان چندقطبی معادل سلول های دور گرفته شود.
- اتمی را در یک سلول  $C0$  در نظر بگیرید. تبادلات با اتمها در سلولهای نزدیک با استفاده از فرمول جفتی معمولی بدست می آید. یعنی برای ۲۷ سلول مجاور (شامل خود سلول  $C0$ ) بایستی رابطه دقیق حساب شود.
- اگر در کل  $M$  سلول وجود داشته باشد  $M-27$  سلول دورتر خواهیم داشت. برای تبادل بین اتم سلول  $C0$  با اتمهای سلولهای دیگر از طریق بسط چندقطبی محاسبه شده صورت می پذیرد.

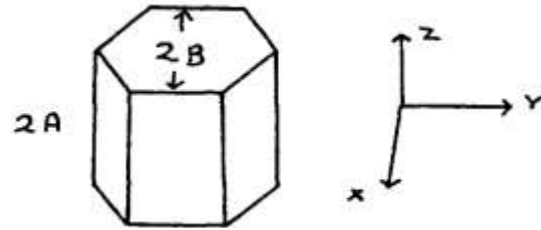
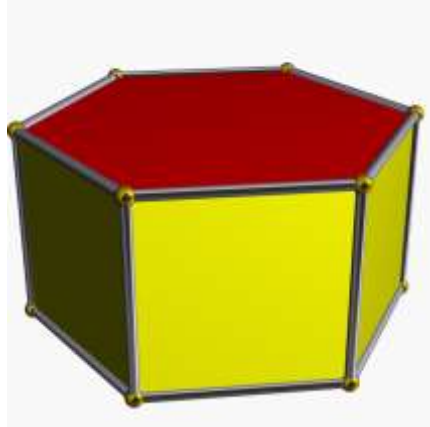


- یک راه سریعتر این است که اندازه سلولهای دورتر از سلول C0 را بزرگتر لحاظ نماییم.
- دقت محاسبات تقریباً ثابت است اگر نسبت اندازه سلول به فاصله ثابت بماند.

A	A	A	A	A	A	A		
A	A	B	B	B	B	B	A	
		B	B	B	B	B		B
A	A	B	B	N	N	N	B	A
		B	B	N		N	B	
A	A	B	B	N	N	N	B	A
		B	B	B	B	B	B	
A	A	A	A	A	A	A		
A	A	A	A	A	A	A		

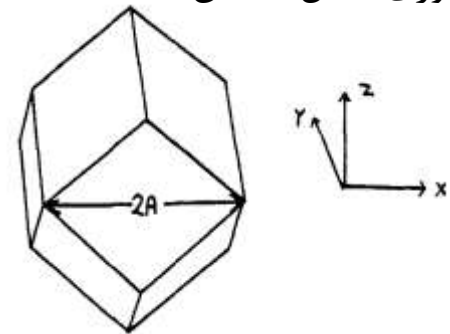
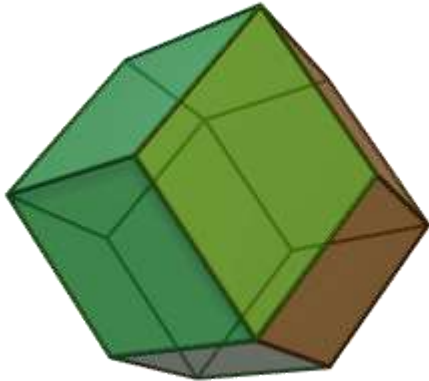
- در این روش جعبه شبیه سازی به جعبه هایی با اندازه  $d/2^r$  ( $r = 0, 1, 2, \dots$ ) تقسیم بندی می شوند که در سه بعد ما در نهایت  $8^r$  سلول با اندازه برابر داریم و در دو بعد  $4^r$  سلول برابر خواهیم داشت.

# شکل های هندسی دیگر برای شرایط مرزی تناوبی



Hexagonal Prism: منشور شش ضلعی

لوزی دوازده وجهی Rhombic Dodecahedron: این شکل یک چند ضلعی با ۱۲ وجه لوزی شکل یکسان است.



Truncated Octahedron: این شکل دارای ۱۴ وجه است ۸ تا شش ضلعی و ۶ تا مربع.

