تکنیک‌های شبیه‌سازی محاسباتی در نانو

شاهرخ رضایی

www.ketab.ir

سرشناسه : رضایی، شاهرخ، ۱۳۵۷ -
عنوان و پدیدآور : تکنیک های شبیه سازی محاسباتی در نانون / نویسنده شاهرخ رضایی.
مشخصات نشر : تهران: سبزان، ۱۳۸۶.
مشخصات ظاهری : ۱۷۶ ص. : نمودار.
شابک : 978-964-8249-84-2
وضعیت فهرست نویسی : فیپا
یادداشت : واژه نامه.
یادداشت : کتابنامه: ص. ۱۶۲ – ۱۷۶.
موضوع : نانوتکنولوژی.
موضوع : روش مونت کارلو.
رده‌بندی کنگره : ۸ ت ۶ ر / ۷ / T ۱۷۴
رده‌بندی دیویی : ۶۲۰/۵
شماره‌ی کتابشناسی ملی : ۱۰۹۸۷۳۷

www.ketab.ir

انتشارات سبزان
میدان فردوسی – خیابان فرصت – ساختمان ۹۸ تلفن: ۸۸۳۱۹۵۵۸-۸۸۴۷۰۴۴

تکنیک‌های شبیه‌سازی محاسباتی در نانو

- نویسنده: شاهرخ رضایی
- ناشر: سبزان
- حروف‌چینی، صفحه‌آرایی، طراحی و لیتوگرافی: مجتمع خدمات چاپ امید
  ۸۸۳۱۹۵۵۷-۸۸۳۰۳۵۷۲
- نوبت چاپ: اول – زمستان ۱۳۸۶
- تیراژ: ۱۰۰۰ نسخه
- قیمت: ۲۲۰۰۰ ریال
- چاپ و صحافی: سحاب

فروش اینترنتی و *online* از طریق سایت آی آی کتاب *www.iiketab.com*

شابک ۹ – ۸۴ – ۸۲۴۹ – ۹۶۴ ISBN 964 – 8249 – 84 – 9

شابک ۲ – ۸۴ – ۸۲۴۹ – ۹۶۴ – ۹۷۸ ISBN 978 - 964 - 8249 - 84 - 2

تقدیم و تشکر:

سپاسگزارم از:

- مجموعه خانوادهٔ محترم «انتشارات سبزان» که مهیاساز بستر نیکوی نشر بودند.
- «اریک دریکسلر» که آغازگر سمفونی نانو بود و تأثیری عمیق بر نگرشم به جهان نانو باقی گذاشت.
- «بهمن مهری» که در مفهوم‌سازی مفاهیم زیبای ریاضیات و محاسبات عددی تأثیری بسزا بر من گذاشت.
- «رضا احدی» ، «پیمان سیاهپوش» ، «خلیل جلیلی» ، «ابراهیم رزاقی» ، «محمودرضا شاهوردی» ، «علی عباسی» ، «داود کاظمی» ، «سیدمحسن موسوی» که مشوقانی نیک بودند.
- «مهران دیلمقانیان» که از راهنمائیهای حکیمانه‌اش خرسند شدم.
- پدرم «محمد رضائی» عمل‌گرائی خستگی‌ناپذیر که مفهوم «خواستن» را به من آموخت.
- مادرم «فاطمه زارعی» که لطافت ذهن شاعرانه‌اش، «زیباپسندی» و «زیبا دیدن» را به من آموخت.
- «پروردگار عزیز که معلم بزرگ نانوفناوری و رهبر بزرگ ارکستر نانو است.

www.ketab.ir

فهرست

مقدمه — صفحه

مقدمه نویسنده ۱۱

فصل اول: معرفی

۱-۱ مکانیک کوانتوم ۱۹

۱-۲ محاسبات ساختار الکترونی ۱۹

۱-۳ رئوس مطالب ۲۰

فصل دوم: روشهای ساختار الکترونی

۲-۱ معرفی ۲۳

۲-۲ همیلتونی ۲۴

۲-۲-۱ تقریب Born-Oppenheimer ۲۴

۲-۳ تئوری «Hartree Fock» ۲۵

۲-۴ تکنیکهای «Hartree-Fock» پیشرفته ۲۸

۲-۴-۲۰ سایر روشها ۳۰

۲-۴-۳ محدودیت‌ها ۳۱

۲-۵ معادلات Kohn – Sham ۳۲

۲-۵-۱ تئوری Hohenberg – Kohn ۳۲

۲-۵-۲ معادلات Kohn – Sham ۳۴

۲-۵-۳ تقریب «چگالی موضعی» ۳۵

۲-۵-۴ محدودیت‌ها ۳۶

۲-۶ خلاصه ۳۸

فصل سوم: روشهای مونت کارلوکوانتومی

۳-۱ معرفی ۳۹

۳-۲ روشهای مونت کارلو ۳۹

۳-۲-۱ انتگرالگیری مونت کارلو ۳۹

۳-۲-۲ اهمیت نمونه‌گیری ۴۱

۳-۲-۳ الگوریتم متروپولیس ۴۲

۳-۳ مونت کارلو وردشی ۴۳

۳-۳-۱ اصل وردش ۴۳

۳-۳-۲ انتگرال‌گیری مونت کارلو ۴۴

۳-۳-۳ انرژی موضعی ۴۵

۳-۳-۴ تابع موجی آزمایشی ۴۵

www.ketab.ir

صفحه

مقدمه

۳-۳-۵ الگوریتم VMC ۴۷
۳-۴ روش مونت کارلوپخشی ۴۸
۳-۴-۱ پیش زمینهٔ طرح ۴۸
۳-۴-۲ نمونه‌گیری اعتبار ۵۱
۳-۴-۳ انتقال به فرم انتگرالی ۵۲
۳-۴-۴ تقریب Fixed – Node ۵۳
۳-۴-۵ بهبود انرژی Fixed – Node ۵۴
۳-۴-۶ الگوریتم DMC ۵۵
۳-۵ خلاصه ۵۷

فصل چهارم: کاربردها

۴-۱ معرفی ۵۹
۴-۲ تاریخچه و پیش زمینه ۶۰
۴-۳ توابع موجی ۶۱
۴-۳-۱ فرم تابع موجی آزمایشی ۶۱
۴-۳-۲ فرم فاکتور Jastrow ۶۵
۴-۴ الگوریتم‌ها و عملی‌ها ۶۸
۴-۴-۱ محاسبات و «به هنگام» کردن ضرایب Slater ۶۸
۴-۴-۲ ارزیابی انرژی موضعی ۷۰
۴-۴-۳ محاسبهٔ انرژی سنتیک ۷۰
۴-۴-۴ محاسبهٔ انرژی پتانسیل ۷۱
۴-۴-۵ موازی کردن VMC ۷۲
۴-۴-۶ موازی سازی روشهای DMC ۷۲
۴-۵ شبه پتانسیلها ۷۳
۴-۵-۱ شبه پتانسیلهای غیر موضعی ۷۴
۴-۵-۲ پتانسیلهای هسته قطبی ۷۶
۴-۶ محاسبات ابرسلولی ۷۸
۴-۶-۱ بر هم کنشهای برد بلند ۷۹
۴-۷ بهینه‌سازی تابع موجی ۸۲
۴-۷-۱ خطی بودن فاکتور Jastrow ۸۲
۴-۷-۲ انرژی غیر موضعی در حین بهینه‌سازی تابع موجی ۸۳
۴-۸ آمار ۸۴
۴-۸-۱ کاربردهای VMC ۸۵
۴-۸-۲ کاربردهای DMC ۸۶
۴-۸-۳ خطاهای اصولی ۸۸

www.ketab.ir

مقدمه صفحه

۴-۹ خلاصه ۸۸

فصل پنجم: بهینه‌سازی تابع موجی

۵-۱ معرفی ۸۹
۵-۲ اهمیت بهینه‌سازی تابع موجی ۹۰
۵-۳ توابع هدف ۹۱
۵-۴ ناپایداری عددی ۹۳
۵-۵ آنالیز توابع هدف ۹۴
۵-۶ دیگر اثرات نمونه‌گیری محدود ۹۶
۵-۷ آزمایش پروسه‌های کمینه‌سازی ۹۶
۵-۷-۱ سیستم مدل ۹۷
۵-۷-۲ تکثیر مجموعهٔ آزمایش ۹۸
۵-۷-۳ نتایج ۹۸
۵-۸ محدودیت‌های انرژی‌های پرت ۱۰۱
۵-۹ سایر توابع هدف ۱۰۴
۵-۱۰ نتیجه‌گیری ۱۰۶

فصل ششم: خطاهای اندازه - محدود در محاسبات ابرسلولی

۶-۱ معرفی ۱۰۹
۶-۲ خطاهای اندازه محدود در محاسبات بس ذره‌ای ۱۱۰
۶-۳ همیلتونی هائی با شرایط مرزی تناوبی ۱۱۱
۶-۴ اصلاحات اندازه محدود و فرمولهای برون یابی ۱۱۲
۴-۱-۳ کارهای قبلی ۱۱۴
۶-۵ روش عمومی ۱۱۴
۶-۶ اثر ذرات ابعاد محدود مستقل ۱۱۶
۶-۷ اثرات اندازه محدود کلمب ۱۱۷
۶-۷-۱ سیستم‌های الکترونی و هسته‌ای ۱۱۹
۶-۸ آزمایشهای بر هم کنش MPC ۱۲۰
۶-۸-۱ کاربرد با تئوری HF ۱۲۰
۶-۸-۲ کاربردهائی از VMC ۱۲۲
۶-۸-۳ کاربردهائی از DMC ۱۲۴
۶-۹ انرژیهای برانگیخته ۱۲۶
۶-۹-۱ تئوری HF ۱۲۷
۶-۹-۲ تئوری QMC انرژیهای برانگیخته ۱۳۱

www.ketab.ir

مقدمه صفحه

۳-۹-۶ بر هم کنش اصلاح یافته جهت انرژیهای برانگیخته ۱۳۴
۱۰-۶ نتیجه گیری ۱۳۵

فصل هفتم: ماتریس چگالی تک ذره‌ای و انرژیهای برانگیختگی سیلیکون

۱-۷ معرفی ۱۳۷
۱-۱-۷ بهینه سازی اوربیتالی ۱۳۸
۲-۱-۷ حالتهای برانگیخته ۱۳۹
۲-۷ سیلیکون ۱۴۰
۱-۲-۷ ابرسلول ۱۴۰
۲-۲-۷ تابع موجی آزمایشی ۱۴۱
۳-۲-۷ محاسبات VMC و DMC ۱۴۱
۳-۷ ماتریس چگالی و اوربیتالهای طبیعی ۱۴۱
۱-۳-۷ تقارن و ملاحظات بازدهی ۱۴۳
۲-۳-۷ نتایج ماتریس چگالی ۱۴۴
۳-۳-۷ نتایج اوربیتال طبیعی ۱۴۶
۴-۳-۷ رابطه با پروفایلهای Compton ۱۴۶
۴-۷ آزمایشهای اوربیتالها ۱۴۸
۱-۴-۷ LDA و اوربیتالهای طبیعی مقایسه شده ۱۴۸
۲-۴-۷ اوربیتالهای LDA و HF مقایسه شده ۱۴۸
۵-۷ تئوری Koopmans بسط یافته ۱۵۰
۱-۵-۷ انرژیهای لایهٔ والانس ۱۵۱
۲-۵-۷ انرژیهای پیوندی Couduction ۱۵۱
۳-۵-۷ فرمولاسیون VMC، روش EKT ۱۵۲
۴-۵-۷ نتایج ۱۵۳
۵-۵-۷ تقریب‌هائی در EKT ۱۵۶
۶-۷ نتیجه گیری ۱۵۷

فصل هشتم: نتیجه گیری

۱-۸ خلاصه ۱۴۹
۲-۸ توسعه‌های آتی ۱۵۰

www.ketab.ir

مقدمه نویسنده

در این کتاب می‌کوشیم تا مرزهای نانو محاسبات را از رهگذر بررسی قابلیت‌ها و محدودیت‌های روش‌های عمده محاسباتی نشان دهیم:

مدلسازی چند مقیاسی، زمینهٔ جدید در مدلسازی مواد نیست، در سالهای اخیر فیزیکدانان به دنبال روشهای ریاضی جهت کاهش درجات آزادی مدل‌های فیزیکی هستند. در حقیقت این روش در سازگاری کامل با این حقیقت است که چگونه می‌بایستی درجات آزادی قابل مشاهدهٔ سیستم را به منظور نیل به بهترین جواب و حداقل هزینه سوق داد.

اعجاز مکانیک آماری، به عنوان مثال، نشانگر این موضوع است که رفتار مجموعه‌ای از اتمها با بی‌نهایت درجهٔ آزادی با قوانین ساده‌ای بیان می‌شود. این روش ریشه در این حقیقت دارد که «کار میانگین» تقریب خوبی دارد، زمانی که اغلب اطلاعات در معادلات بنیادی رفتار هزاران هزار اتم را نشان دهند. به هر صورت، زمانی که ساختار ماده و نظم حاکم بر آن را در مقیاس میکرو و نانو توضیح می‌دهیم، بسیاری از این اساس‌ها چالش‌های واقعی را پدید می‌آورد. همچنین قوانین فیزیک آماری بدون داشتن نمونه‌های کافی اعتبار روشن نخواهند داشت. به همین ترتیب چالشهایی نظیر انتقال فاز، هسته‌بندی، پلاستیسیته و مکانیک شکست، پدیده‌هائی اساسی در درک رفتار شناسی ماده خواهند بود که روش‌های مبتنی بر تکنیک‌های میانگین به اطلاعات درست منتهی نخواهند شد.

با این حال، ظهور محاسبات بزرگ مقیاس، انگیزشی برای دانشمندان در جهت شناسایی رفتار ماده در جهت‌هایی جدید است که امیدوار کننده است. در عوض کاهش درجهٔ پیچیدگیهای مسأله به منظور کاهش درجات آزادی آن و در نهایت حل عددی مسأله که به نام روش دو جهته آزمایش – محاسبه نامیده می‌شود هنوز نتایج آن به عنوان یک برتری پذیرفته نشده است. آنچه که به عنوان نتایج شبیه‌سازی است می‌بایستی با نتایج آزمایشگاهی تطبیق داده شود.

این مسأله به مدت یک دهه میان دانشمندان محل بحث بوده است، زیرا برخی معتقدند شبیه‌سازیهای عددی دارای تقریبات زیادی است زیرا فلسفهٔ محاسبات عددی می‌بایستی برای هر مسأله‌ای تحلیل شود. البته اخیراً این بحث‌ها روبه سوی همگرایی آورده است. شبیه‌سازیهای رایانه‌ای مبتنی برالگوریتمهای

www.ketab.ir

پیچیده‌تر که ریشه در فیزیک کوانتوم دارند، منجر به جوابهای مقبول‌تری شده است. این پیشرفته‌ها که با پیشرفتهای سخت‌افزاری نیز همراه گشته است، برخی از شک‌گرایان شبیه‌سازی را آرام کرده است. هر چند که هنوز هم توابع پتانسیل بین اتمی دقت بالاتری را در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بوجود می‌آورد.

همچنین اندازه سیستم تحت شبیه‌سازی، بصورت نمایی رشد یافته است. ارتباط میان مدلسازی به روش دینامیک مولکولی و "ab intio" فضای بهتری را خلق کرده است. در مقیاس «مزو»، ارتباط میان دنیای اتمی وماکروسکوپی، تلاشهای کمی، منجر به ایجاد توانایی کشف راه‌حلهائی برای مدلسازی رژیمهای ممنوعه مدلسازی شده است. در طی یک دههٔ گذشته فقط شبیه‌سازی رایانه‌ای ۲ بعدی رفتارشناسی مجموعهٔ نابجائیها مقدور بود. اطمینان به واقعیت این روشهای شبیه‌سازی هنوز زیاد بالا نیست زیرا هنوز رفتار نابجائیهای برد کوتاه را نمی‌توان به درستی مدلسازی کرد. با این وجود، این حقیقت که چندین مدل رفتار شناسی نابجائیها بوسیلهٔ شبیه‌سازی توجیه شده است، امیدواریهائی را پدید آورده است.

اخیراً پژوهش بر روی مدلهای پلاستیسیته در مقیاس «مزو» جهت توجیه تغییر شکل پلاستیک صورت گرفته است. این کوششها، روشهای مدلسازی ۳ بعدی را جهت توجیه رفتار دینامیک نابجائها، به همان خوبی روشهای فیزیک آماری، پدیدآورده است.

چالش اصلی در راه توسعهٔ مدلسازی چند مقیاسی یکپارچه، مسأله «مقیاس اندازه»، «مقیاس زمان» و «دقت» است. دقت محاسبات عددی و خودسازگاری مدلهای چندمقیاسی را در زیر بررسی می‌کنیم:

الف- مقیاس اندازه:

تعداد درجات آزادی اتمی در یک سیستم ماده‌ای نوعی، بسیار زیاد است و اگر کسی بخواهد یک میکرون مکعبی را مدل کند، معادلات حرکت چند بیلیون اتم رامی‌بایستی بصورت عددی حل کند.

در فضای «زیر پیوسته» سیستم ماده‌ای بقدر کافی کوچک است که قابلیتهای محاسباتی می‌تواند آن را بصورت واقعی مدل کند، از این گذشته، چندین مدل چند مقیاسی وجود دارد که می‌تواند مدلهای اتمی و مدلهای پیوسته را در قالب یک ساختاریکپارچه شبیه‌سازی، مدلسازی کند.

این روشهای اتمی و چند مقیاسی، به گونه موفقیت‌آمیزی در حوزهٔ بررسی خرابی شبکه‌ای سازهٔ ماده در قالبتهای استاتیک و شبه استاتیک بکار گرفته شده است. اما اگر کسی بخواهد یک سیستم را با در نظر گرفتن تمام اتمهایش مدلسازی کند، مسائل جدیدی مطرح می‌شود:

با افزایش تعداد اتمهای محاسباتی در یک سیستم شکل‌های انرژی حداقل به سرعت رشد می‌یابد. آنالیز N خوشه اتمی نشان می‌دهد که تعداد حالات انرژی حداقل، از e^N سریعتر رشد می‌کند، بدون اینکه مقدار تمام حالات مقدور این مقادیر حداقل را بدانیم. بسیار مشکل است تا شکل اتمی اولیه‌ای را آماده کنیم که به فیزیک واقعی سیستم نزدیک باشد. مسأله شکل به سایر مشکلات حوزهٔ زمان و دقت تعمیم می‌یابد. اگر کسی بخواهد شبیه سازی را بصورت کامل اجراءنماید، پیچیدگی اتمی به انضمام حساسیت

www.ketab.ir

سیستم به موقعیت اولیه اتمها چالش‌های اساسی پدید می‌آورد، از سوی دیگر عدم دقت تابع پتانسیل بین اتمی خطاهائی را درمحاسبه اشکال کمینهٔ تابع انرژی بوجود می‌آورد. هر دو این مسائل، به نحو کاملاً جدی و خطیری قابلیت اعتماد به شبیه‌سازی اتمی را تحت تأثیر قرار داده‌اند. اگر چه پیشرفتهای قابل توجه اخیر در حوزهٔ شبیه‌سازی «مزوئی» تعدادی از چالشها را باقی گذارده است اما به هر حال طبیعت برد بلند میدان تنش نابجائیها، پیچیدگی توپولوژیک خطوط نابجائی‌ها، طرز رفتار شرایط مرزی تناوبی، که متضمن سازگاری آماری نتایج است، درجهٔ دقت در حل تعاملات میان نابجائیها و سطوح و آخالهای ناهمسانگرد الاستیک و اثرات تعامل داخلی در دینامیک نابجائیها هنوز چالشهای عمده‌ای هستند که در آینده‌ای نزدیک دانشمندان را به چالش خواهند کشید. مسائل مرتبط با پلاستیسیتهٔ پلی کریستالها میان‌برهای اضافی را می‌طلبد. سؤال اساسی در این مرحله این است، که چگونه شاخص‌های اندازه از فرم نابجائی گسسته بسوی توصیف فضای پیوسته میل خواهد کرد؟ تئوریهای متنوعی از گرادیان کرنش در سالهای اخیر مطرح شده است، اما اغلب آنها در قالب پدیدار شناسی بوده‌اند. و شاخص «اندازه» را در مسأله لحاظ نکرده‌اند. به عبارت دیگر ما در این مسأله با طیفی از اندازه‌ها مواجهیم و نه با یک اندازهٔ ساده. از این رو، پژوهشهای بیشتری لازم است تا دنیای «مزو» را به دنیای «پیوسته» ارتباط دهند.

ب) مقیاس زمان:

محدودیت‌های شدید بر زمان کامل شبیه‌سازی در مدلسازی اتمی نتیجه‌ای از دینامیک اتمی ذاتی در مقیاس زمان است، به گونه‌ای که نوعاً در مرتبهٔ فمتوثانیه است.در شبیه‌سازی عددی با استفاده از اجزاءمحدود، اندازهٔ گام می‌بایستی به قدری کوچک باشد تا پایداری محاسبات تضمین شود. ارزیابی ریزساختارها، یک پروسهٔ تعادلی نیست و در خلال پروسه‌های سنتیکی، تغییرات ساختاری پیچیده‌ای رخ می‌دهد، بنابراین الزامی است که بصورت دینامیک یک سیستم در طول مقیاس زمانی آزمایش واقعی به منظور حصول دقت در ارزیابی ریزساختارها، بررسی شود.

مقیاس زمانی آزمایشی بسیار طولانی است (در حد میکروثانیه یا بزرگتر)، بنابراین در مقایسه با مقیاس زمانی اتمی بیش از بیلیونها بار محاسبه لازم است تا شبیه‌سازی اتفاق بیفتد. تکنیک‌های متعددی جهت حل این مشکل بکار گرفته شده است. این تکنیکها بر این حقیقت استوار است که مقیاس زمانی اتمی بوسیلهٔ تکانهٔ حرارتی اتمها حول یک کمیتهٔ انرژی موضعی رخ می‌دهد. جنبش شناسی ارزیابی ریزساختارها بوسیلهٔ انتقال آرام در همسایگی کمیتهٔ موضعی تعیین می‌شود. روش سنتیک «مونت کارلو» موسوم به KMC یک روش عمومی به منظور چیره شدن بر این مشکل بوده است این روش بر اساس ارزیابی سیستم از یک آرایش به آرایش دیگر بدون تکانهٔ حرارتی اتمها، استوار است. روش مونت کارلو نیازمند فهرست کاملی از حالات مقدور به منظور شبیه‌سازی زمان ارزیابی سیستم است. دقت روش مونت کارلو تابعی است از دقت در بیان حالات مقدور برای سیستم، اگر یک پروسهٔ بحرانی را از دست بدهیم

www.ketab.ir

شبیه‌سازی به سوی جواب مناسب همگرا نخواهد شد. به همین ترتیب دقت در محاسبهٔ انتقال فاز، بخصوص در فضای فرکتالی بحرانی، بسیار تعیین کننده است.

روش دیگر برای اندازه‌گیری حد زمانی در شبیه‌سازی اتمی، اصلاح روشهای دینامیک مولکولی است به گونه‌ای که دورهٔ تکانهٔ حرارتی به کوتاهترین حد خود برسد و یا اینکه روشهائی را بیابیم که به جستجو برای یافتن مقادیر کمینهٔ شتاب بخشد (نظیر الگوریتم جستجو به کمک سری فیبوناچی) چندین روش امیدبخش (نظیر روشهای هیدرودینامیک)، اخیراً بوجود آمده است، اما بکارگیری این روشها برای پروسه‌های سیستمهای پیچیده هنوز در مرحلهٔ پژوهشی است. روشهای دیگری نظیر NEB، از جملهٔ روشهایی است که می‌کوشد حالتهای انتقال فاز را بصورت جداگانه از حالتهای اولیه و نهایی پیشگویی کند. این روشهای سیستماتیک ارزیابی پروسه‌های شبیه‌سازی، کتابخانهٔ مورد نیازرا برای شبیه‌سازی مونت کارلو فراهم می‌آورد.

زمان ارزیابی میکروساختار نابجایی، چنین مشکلاتی باز هم نمود پیدا می‌کند، زمانی که دو نابجائی در یک محیط بسته، برهم کنش می‌کنند بصورت دوقطبی و یا اتصالی، دینامیک خیلی سریع است، به گونه‌ای که زمان در حد پیکوثانیه است. از سوی دیگر ارزیابی دیواره‌های سلولی نابجائیها و سرش آرام بندها در زمانی معادل هزاران ثانیه اتفاق می‌افتد. شاخص‌های خستگی و خزش نیز خود چالشهای دیگری را فراهم می‌آورند. حرکت در چنین محدوده‌ای، از پیکو ثانیه تا کیلو ثانیه، خود، چالش آفرین است.

ج) دقت

دقت توابع پتانسیل بین اتمی در حوزهٔ شبیه‌سازی اتمی کلاسیک (نظری دینامیک مولکولی، مونت کارلو، سنتیک مونت کارلو) یک مسأله مهم است زیرا پتانسیلهای بین اتمی زمانی قابل اعتمادند که فقط در محدودهٔ "fit" کردن پارامترها باشند.

بنابراین سؤال اثر دقت توابع پتانسیل بین اتمی تجربی، بر پیش‌گویی شبیه‌سازیهای اتمی بزرگ مقیاس و نیز اعتبار بخشی به محاسبات یک چالش اساسی است.

مسأله دقت بوسیلهٔ شبیه‌سازی کوانتومی حل می‌شود اما هزینهٔ محاسبات را افزایش خواهد داد، ولی به هر حال حوزهٔ اعتبار هر روش را می‌بایستی تعیین کرد. بنابراین چالش اساسی در حوزهٔ دقت، شناسایی «کجا» و «چگونه» جهت اعمال کردن سطوح متعدد تقریبات در حوزهٔ شبیه‌سازی است.

د) «خود – سازگاری» مدلهای چند مقیاسی:

آنچه در زمان حاضر اهمیت یافته است، ایجاد یک روش عمومی ریاضیات محاسباتی به منظور ارائه یک روش یکپارچه شبیه‌سازی رایانه‌ای است، از آنجائیکه روشهای محاسباتی در حوزهٔ ویژه‌ای از فضا و زمان معتبرند، از این رو گذر از یک روش محاسباتی فضا – زمانی به روش دیگر متضمن خطا خواهد بود

www.ketab.ir

(پازلی را در نظر بگیرید که قطعات آن را در کنار هم چیده‌اید، اگر قطعات مجزای پازل نمایشگر شکل واقعی آن باشند، مسأله «سازگاری» برقرار است) زیرا گذر از یک حوزه به حوزهٔ بالاتر متضمن خلاصه سازی مجموعه‌ای از پارامترهای در مجوعه‌ای محدود است، این پروسه زمانی پذیرفته خواهد بود که پارامترهای حوزهٔ ریزتر و ارتباط آنها با پارامترهای حوزهٔ بالاتر به درستی تعریف شود، اما به هر حال، هنوز ارتباط میان روشهای محاسباتی در حوزه‌های مختلف دقیقاً معین نشده است و حلقه‌های حل نشده‌ای هنوز وجود دارد. اگر بتوان اساس درجات آزادی سیستم در حوزهٔ فضا – زمان (نظیر هندسه مسأله) را به شاخص‌های آماری (نظیر قابلیت هدایت، تحرک و...) ارتباط داد، مسألهٔ انتقال فاز از یک مقیاس به مقیاس دیگر قابل حل است.

هـ) افقهای نو در مدلسازی چندمقیاسی:

مسأله مدلسازی چند مقیاسی زمینه‌ای غنی از حوزه فیزیک، ریاضیات عددی و محاسباتی و چالشهای ریاضی و محاسبات است. این مسأله در آینده‌ای نزدیک نقشی کلیدی در توسعهٔ روشهای آنالیز و طراحی فناوری نانو بازی خواهد کرد. اما بطور خلاصه مرزهای نانومحاسبات در زمینه‌های زیر خواهند بود:

۱) شناخت محدودیت‌های مسألهٔ مقیاس زمان در شبیه‌سازی اتمی
۲) محدودیتهای اندازه در شبیه‌سازی مولکولی
۳) اثر دقت بر شبیه‌سازی مولکولی
۴) توسعهٔ روشهای «خودسازگار» در حوزهٔ مدلسازی چند مقیاسی

زیرساختهای پایه برای مدلسازی مولکولی:

در مقالهٔ قبلی نقش فناوری‌انفوماتیک را در فناوری‌نانو از دیدگاه اهمیت آن در مدل‌سازی مولکولی بررسی کردیم. اکنون می‌خواهیم حداقل مؤلفه‌های لازم در جهت موفقیت در مدلسازی مولکولی را بررسی کنیم. به عبارت دیگر زیرساختهای بحرانی جهت توسعهٔ دانش مدلسازی مولکولی کدامند؟

۱) الگوریتم‌ها

بهبود الگوریتم‌های محاسباتی مورد نیاز است تا از عهدهٔ محاسبه مجموعه‌ای از مولکولهای بزرگ یا مجموعه‌ای از اتمها برآیند. زیرا برهم کنش میان اتمها در کنه موضوع مدل سازی مولکولی نهفته است. زمان محاسبه و قدرت ذخیره‌سازی اطلاعات هر اتم و افزایش دقت با افزایش تعداد اتمها، تابع مستقیمی از افزایش قدرت الگوریتم‌ها است.

۲) بکارگیری محاسبات موازی

با تقسیم مسئله بین چند پردازنده جداگانه، محاسبات موازی، قابلیت رسیدن به راه‌حلهای مناسب و با

www.ketab.ir

سرعتهای بالا، را فراهم می‌آورند. به‌هرحال رسیدن به این هدف نیازمند مسائلی (یا بخشی از مسائل) است که می‌تواند معادلاً تقسیم شود مثلاً الگوریتم‌هائی به منظور گرفتن مزیت‌های ساختارهای موازی و راههائی به منظور نوشتن و رفع خطا کردن مؤثر از کدهای موازی.

بسیاری از کدهای شیمی کوانتوم بصورت ضعیفی موازی می‌شوند که نسبتاً وابسته به روشهای بکار گرفته شده هستند. یک مثال نوعی نظیر مدل کوانتومی مونت‌کارلو یا روش"Laster" و همکارانش است.

۳) انتخاب خودکار به همان خوبی روشها

یک نقش مدل ساز، انتخاب بهترین روش برای یک مسألهٔ مشخص با دقت مورد نیاز مشخص است. چنین تصمیم‌گیریهایی می‌بایستی بصورت خودکار به منظور انتفاع بیشتر و کم‌ترکردن اثر مهارت شاغل باشد. مقایسهٔ دقیق روشهای متفاوت، آرایشهای محاسباتی متفاوت و هدفهای متفاوت کاملاً الزامی است.

۴) سخت افزارهای محاسباتی و سیستم عامل‌ها

سخت افزارهای محاسباتی و سیستم عامل‌ها روشهای متفاوت دیگری به منظور مدلسازی مولکولی هستند مدلسازی مولکولی نیازمندیهای متفاوتی از سخت افزار وسیستم عامل را پدید آورده است. همانطوریکه تغییر دادنها نیازمند استفاده کننده است. ترکیب ابررایانه‌ها رایانه‌های شخصی/ ایستگاههای محاسباتی و توزیع محاسب‌ها، پیامد دیگری از یکپارچگی زیرساختهای محاسباتی، نمایشگرها و Interface استفاده کننده است. همچنین زیرساختهای واسطه وابزارهای قابل برنامه‌نویسی تصویر ساز از دیگر نیازمندیها است.

۵) مدیریت اطلاعات

نه فقط نیازهای محاسباتی، می‌طلبد که همچنین حجم نتایج به طرز باورنکردنی با اندازهٔ مسأله رشد می‌کند. این چالش نیازمند مدیریت پیچیده و بهره‌برداری از نتایج آزمایشگاهی و داده‌های محاسباتی بصورت توأم است. به منظور مؤثر بودن، حجم عظیم اطلاعات جدید می‌بایستی مدیریت شود به گونه‌ای که با نتایج آزمایشگاهی و روابط مبتنی بر تئوری، سازگاری حاصل نماید.

۶) واسطه مدلسازی آزمایشگاهی

روابطی نظیر QSPR و QSAR، وابستگی به خواص آزمایشگاهی قابل مشاهده‌ای دارند که جهت تعیین خواص مولکولی مورد استفاده قرار می‌گیرد.

QSPR: Quantitative Structure – Property

QSAR: Structure – Activity Relations

این روابط و وابستگیهایشان ممکن است مطلقاً تجربی باشند، اما آنها موفقیت‌آمیز خواهند بود بویژه زمانیکه خواص محاسباتی درست انتخاب شده باشد. همچنین خواص اندازه‌گیری شده می‌بایستی انتخاب

www.ketab.ir

شوند به گونه‌ای که رفتار ماده را نشان دهند و اصول فیزیکی و شیمیایی را نقض نکند. پیشگویی خواص قابل اندازه‌گیری بسیار سخت است، اما از خواص قابل پیشگویی اندازه‌گیری می‌شود شیمی ترکیبات مثال خوبی در این زمینه است، جائیکه، بزرگترین موفقیت‌ها، از درون ساخت کتابخانه‌هایی از مواد انتخابی، بوجود آمده است.

۷) آنالیز مسأله

موفقیت در کاربردهای صنعتی، متکی به شناخت قاطعانه پیامدها یا سؤالات مطرح شده است.

۸) زیر ساختهای انسانی

یک پیامد انسانی کلیدی، داشتن افراد فنی به گونه‌ای که شخصاً یا تحت عنوان دانشگاه هم دارای دانش مدلسازی و هم دارای دانش کاربردهای صنعتی باشند. دقیقاً مهم است که بر محدودهٔ کاربری هر مدل و قابلیتها و توانائیهای آن مدیریت داشته باشیم. ساخت چنین زیرساخت مهمی نیازمند آزمایش و آموزش است.

۹) اعتبار بخشی

اعتبار بخشی معمولاً به آزمایش مدلها در برابر داده‌های موجود به منظور تعیین اعتبار آنها یا حدود اعتبار آنها بر می‌گردد. این عمل ممکن است درک شود یا نادیده گرفته شود اما این بخش اکیداً یک نیاز است.

۱۰) معتبر بودن

معتبر بودن دارای دو وجه است:

بنیانگذاری آن و پیشگیری از نقایص آن. اعتبار باید صادقانه بوسیله موفقیت ساخته شود. ناتوانی مدلها بدرستی فهمیده شود. شیء گراهای رایانه‌ای یک کلید اساسی در درک ارتباطات نتایج است. اما از سوی دیگر برای مدلسازها ممکن است مخرب باشد. زیرا یک تصویر جذاب می‌تواند گمراه کننده باشد. نتایج اجتناب‌ناپذیر شک‌گرایی را تقویت می‌کند. شخص می‌بایستی روی مسائل مناسب با ابزارهای درست کار کند.

با توجه به موارد فوق، بنای یک سناریوی محاسباتی بر مبنای «منظور» هر نوع از شبیه‌سازی که بتواند اهداف فوق را پوشش دهد یک نیاز اساسی است. این کتاب می‌کوشد تا تکنیکهای محاسباتی را از رهگذر بررسی قابلیتها و محدودیت‌های آن معرفی نماید تا بر اهمیت موارد فوق تأکید کند و هر تکنیک محاسباتی را با ارزشهای فوق ارزش‌دهی نماید و در نهایت «محاسب» را در تدوین یک سناریوی محاسباتی یاری دهد. شاخصهای ارزش‌دهی این تکنیک‌ها بر حسب وسع و دقت، براساس ارزش کتب و مقالات بین المللی معتبر، صورت گرفته است.

شاهرخ رضائی
بهار ۱۳۸۶

www.ketab.ir