رایانش با طعم آزادی در فیزیک

بررسی نقش رایانه و مشخصا نرم‌افزارهای بازمتن و آزاد متن در برخی از شاخه های فیزیک

گردآوری: مرصاد مستقیمی

دانشجوی کارشناسی ارشد رشته فیزیک ماده چگال دانشگاه صنعتی اصفهان

زمستان 92

شاخه های فیزیک و محاسبات رایانه ای

- فیزیک هسته ای:در فیزیک هسته ای به بررسی بر هم کنش ذرات در انرژیهای بالا و ماهیت انرژی هسته ای همینطور به ماهیت هسته اتم ها برای تبدیل آنها به هم میپردازیم.
- فیزیک ذرات بنیادی:به ساختار هستی و مواد در بنیادی ترین شکل ممکن میپردازد
- فیزیک اتمی ملکولی:به ماهیت ها و خواص اتم ها و ملکول ها و رفتارهای خاص آنها می‌پردازد

- فیزیک ماده چگال:بررسی خواص الکترونی و اسپینی مواد در حالات مختلف میپردازد
- فیزیک پلاسما:گازهای در دماهای بالا را بررسی میکند
- اختر فیزیک و کیهانشناسی:به چگونگی شکل گیری جهان هستی و ماهیت اجرام سماوی و برهمکنش و انواع آنها میپردازد
- اپتیک و لیزر:خواص انواع نور و امواج مغناطیس را بررسی میکند

نرم افزار های آزاد متن در فیزیک

در این بخش به معرفی تعدادی از نرم‌افزار های کاربردی در شاخه های مختلف فزیک می‌پردازیم

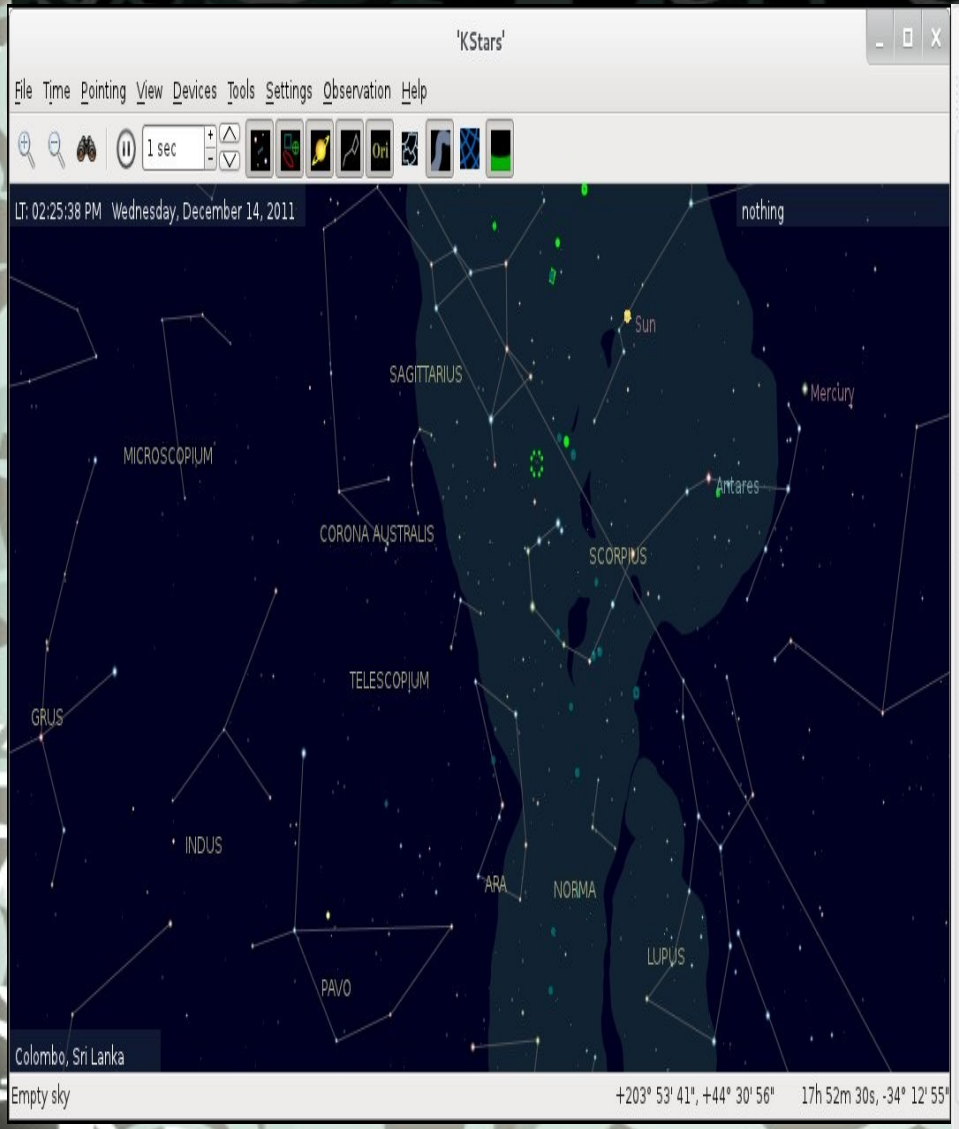
آموزش و محاسبات

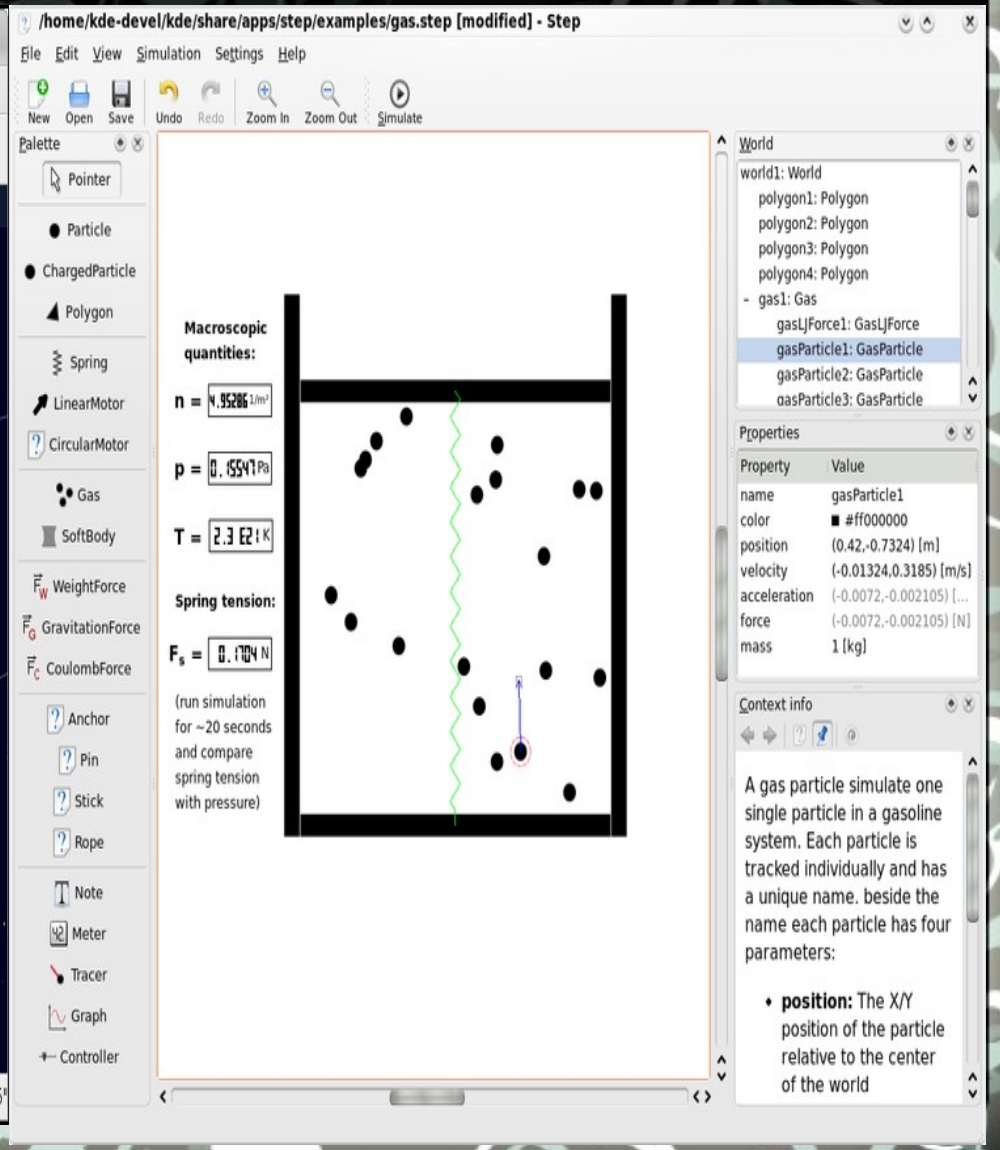
اگر کاربردهای نرم‌افزاری در دنیای فیزیک را به دو بخش تقسیم کنیم می توان آنها را بخش آموزش و بخش محاسبات دانست!

- بخش آموزش :یادگیری مفاهیم فیزیک یک چالش در تمامی مراکز آموزشی برای دانش‌پژوهان بوده است.از رایانه و نرمافزارها هم برای ساختن مجازی این مفاهیم و آموزش آنها استفاده شده است تا هزینه های برخی آزمایشات که در

دنیای واقع بالا است را کاهش دهند.قابلیت بالای تکرار و انتقالمطالب باعث شده تا نرم‌افزار های زیادی در این زمینه نوشته شود که از سطح تخصصی تامقدماتی امتداد دارد.نرم افزارهایی مانند:Kstar,Stellarium,Celestia,Step

Kstar/step


'KStars'
File Time Pointing View Devices Tools Settings Observation Help
1 sec
LT: 02:25:38 PM Wednesday, December 14, 2011
nothing
Sun
SAGITTARIUS
Mercury
MICROSCOPIUM
Antares
CORONA AUSTRALIS
SCORPIUS
TELESCOPIUM
GRUS
INDUS
ARA
NORMA
LUPUS
PAVO
Colombo, Sri Lanka
Empty sky
+203° 53' 41", +44° 30' 56"
17h 52m 30s, -34° 12' 55"


/home/kde-devel/kde/share/apps/step/examples/gas.step [modified] - Step
File Edit View Simulation Settings Help
New Open Save Undo Redo Zoom In Zoom Out Simulate
Palette
Pointer
Particle
ChargedParticle
Polygon
Spring
LinearMotor
CircularMotor
Gas
SoftBody
WeightForce
GravitationForce
CoulombForce
Anchor
Pin
Stick
Rope
Note
Meter
Tracer
Graph
Controller
Macroscopic quantities:
n =
p =
T =
Spring tension:
Fs =
(run simulation for ~20 seconds and compare spring tension with pressure)
World
world1: World
polygon1: Polygon
polygon2: Polygon
polygon3: Polygon
polygon4: Polygon
gas1: Gas
gasLJForce1: GasLJForce
gasParticle1: GasParticle
gasParticle2: GasParticle
gasParticle3: GasParticle
Properties
Property Value
name gasParticle1
color #ff000000
position (0.42,-0.7324) [m]
velocity (-0.01324,0.3185) [m/s]
acceleration (-0.0072,-0.002105) [...
force (-0.0072,-0.002105) [N]
mass 1 [kg]
Context info
A gas particle simulate one single particle in a gasoline system. Each particle is tracked individually and has a unique name. beside the name each particle has four parameters:
position: The X/Y position of the particle relative to the center of the world

- نرم افزارهای محاسباتی: بررسی های آماری بزرگ و یا محاسبات ریاضیاتی پیشرفته و سخت و یا تحلیلی در تمامی رشته های علمی وجود دارد ولی شاید هیچ رشته ای مانند فیزیک در تحمیل محاسبات پیچیده به ابررایانه ها و شبیه‌سازها پیشگام نباشد!شبیه‌سازی رویدادهای فیزیکی اصلی‌ترین کار فیزیکدانان محاسباتی است که با مشابه‌سازی آزمایشات و یا خواص مواد یا رفتارهای طبیعی و فیزیکی به تحلیل و تجزیه پدیده‌ها در دنیای مجازی می‌پردازند! نیاز به سرعت و قدرت و تخصیص منابع سیستمی به محاسبات

گنو لینوکس را در جامعه علمی فیزیک محبوب ساخت است به شکلی که اکنون گرانترین دستگاه ساخته دست بشر در هستی یعنی شتابدهنده سرن توسط ابررایانه هایی کنترل می‌شود که با قلب تپنده گنولینوکس کار می کنند! اما آنچه برای خود فیزیکدانها اهمیت داشت این است که با فرهنگ نرم افراز آزاد توانسته اند شبیه سازهایی قدرتمند تر طراحی کنند در ادامه به معرفی تعدادی از این نرم‌افزار ها و نقش آنها خواهیم پرداخت!

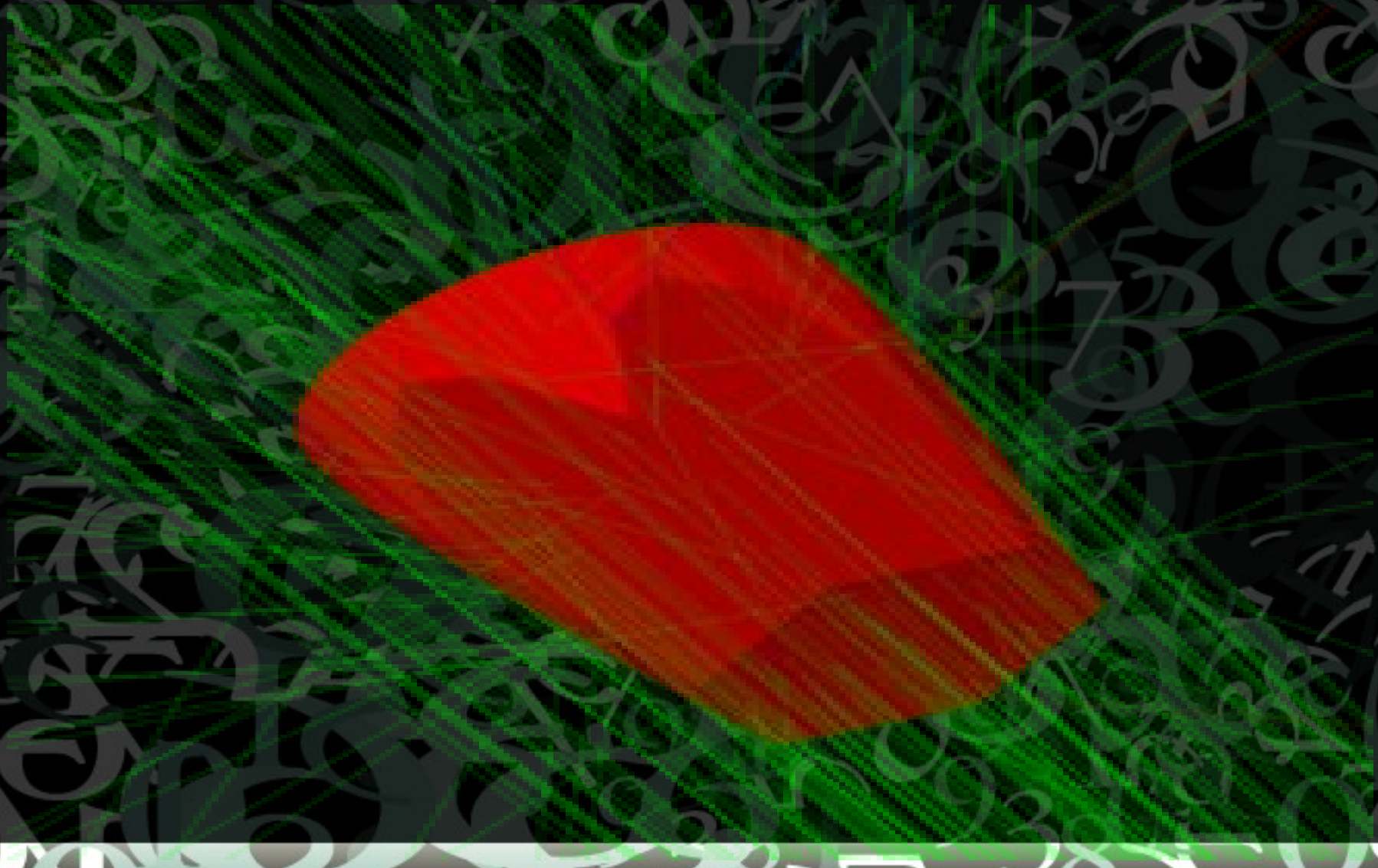
معرفی و نقش چند نرم افزار اصلی در فیزیک هسته ای و حالت جامد

Geant

- این نرم‌افزار در رشته فیزیک هسته ای و فیزیک ذرات به نوعی قویترین نرم‌افزار به شمار می‌آید!در شبیه سازی های برخورد ذرات در شتابدهنده های هسته ای و یا ساخت رادیو دارو ها می‌توان از این نرم‌افزار بهره برد!این نرم‌افزار را مرکز سرن توسعه میدهد !آن را با زبان c نوشته‌اند اما رابط پایتون نیز برای آن وجود دارد!

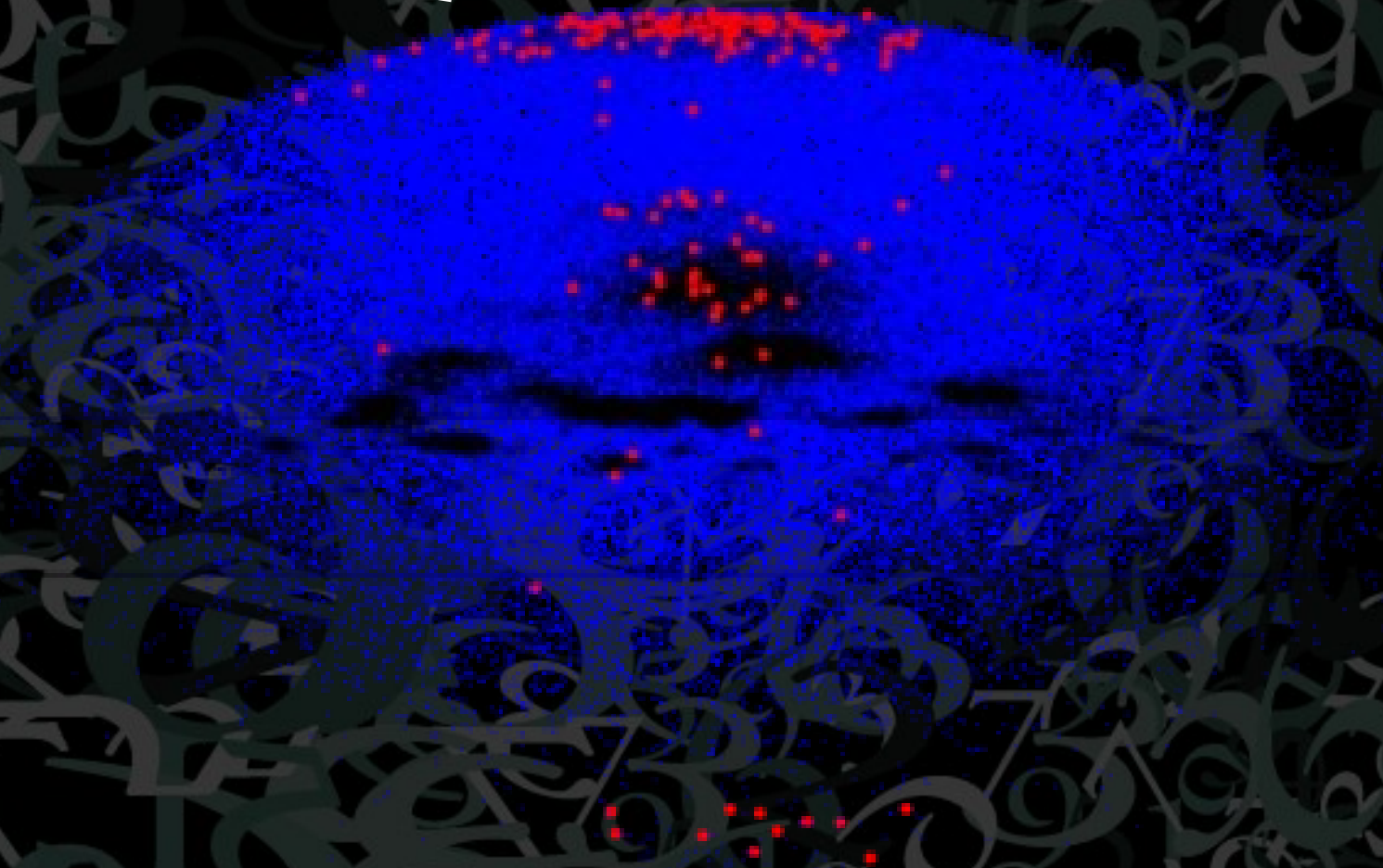
شتابدهنده هسته ای سرن گرانترین دستگاه ساخته دست بشر که با قلب گنولینوکس کنترل می‌شود محاسبه می کند و نتایج محاسبات خود را تحلیل می کند

- یک آشکار ساز و عبور پرتو از آن



یک بهمن الکترونی که گمان می‌رود در در

گردبادها یا در آذرخش رخ می دهد



Geant

- high energy physics
- nuclear experiments
- Medical
- Accelerator
- space physics

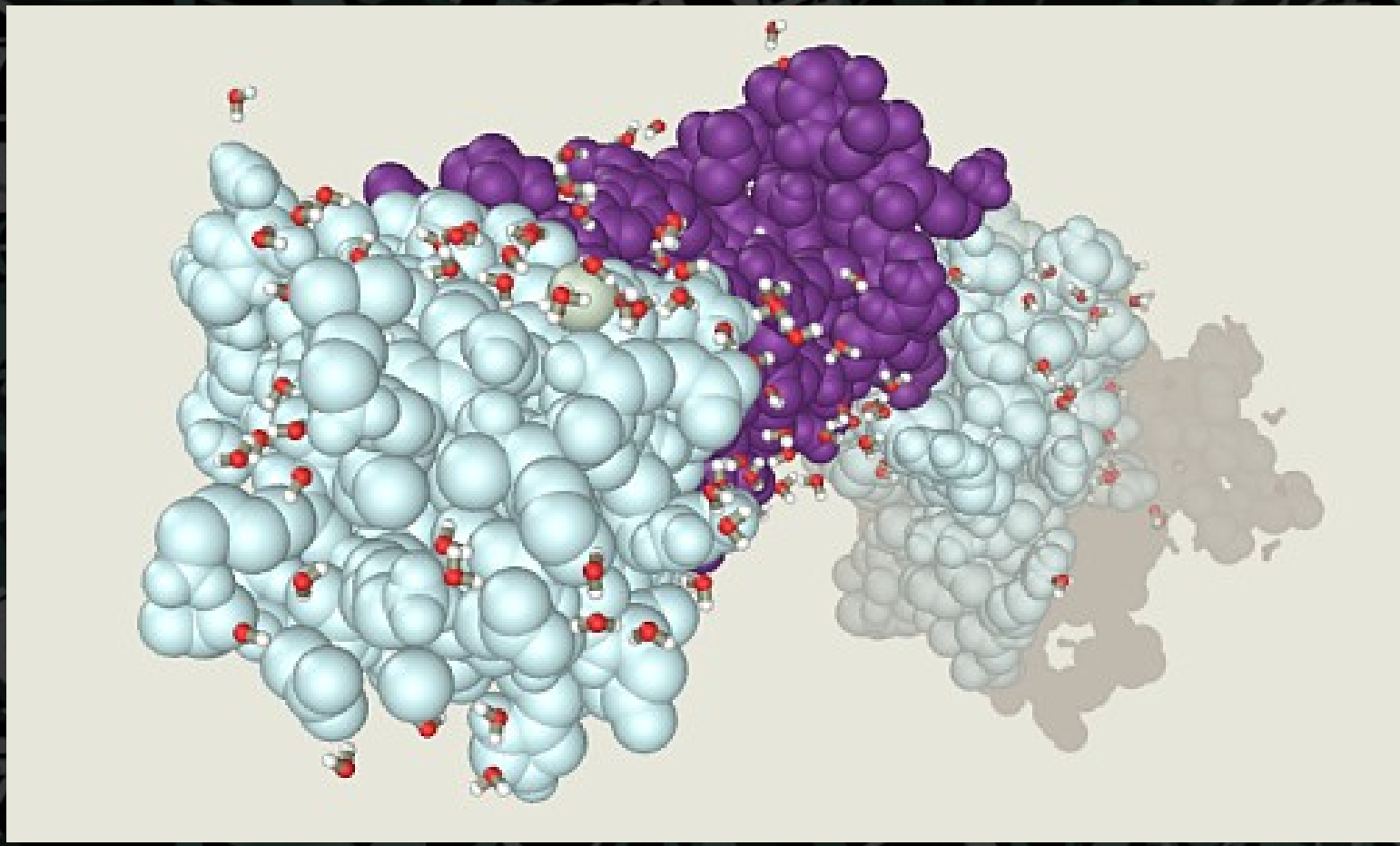
geant

- BaBar and GLAST at SLAC
- ATLAS, CMS and LHCb at LHC, CERN
- Borexino at Gran Sasso Laboratory
- MINOS at Fermilab
- Enriched Xenon Observatory (EXO)
- T2K

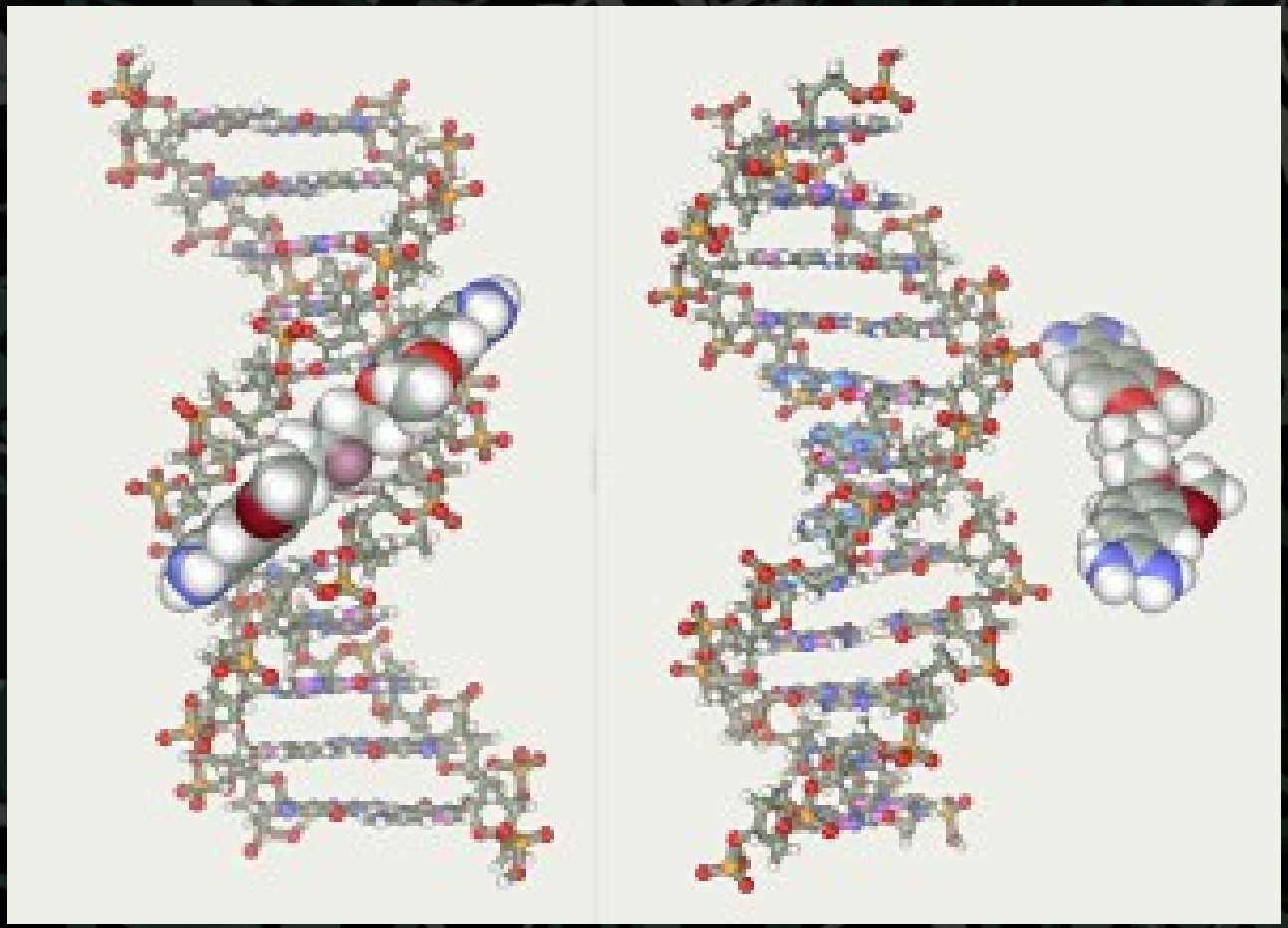
Cp2k

این نرم‌افزار در شیمی کوانتومی و فیزیک ماده چگال به پژوهشگران کمک می‌کند!با فورترن نوشته شده و تحت گواهینامه GPLقراردارد!از معروفترین و پرکاربرد ترین تئوری در حال حاضر در فیزیک حالت جامد یعنی (density function theory) یاDFTبهره می‌برد!از برنامه آزادAscalaph Designerنیز که تحت GPLقرار دارد و برای مدلسازی ملکولی استفاده می‌شود برای طراحی ملکولها بهره می‌برد!

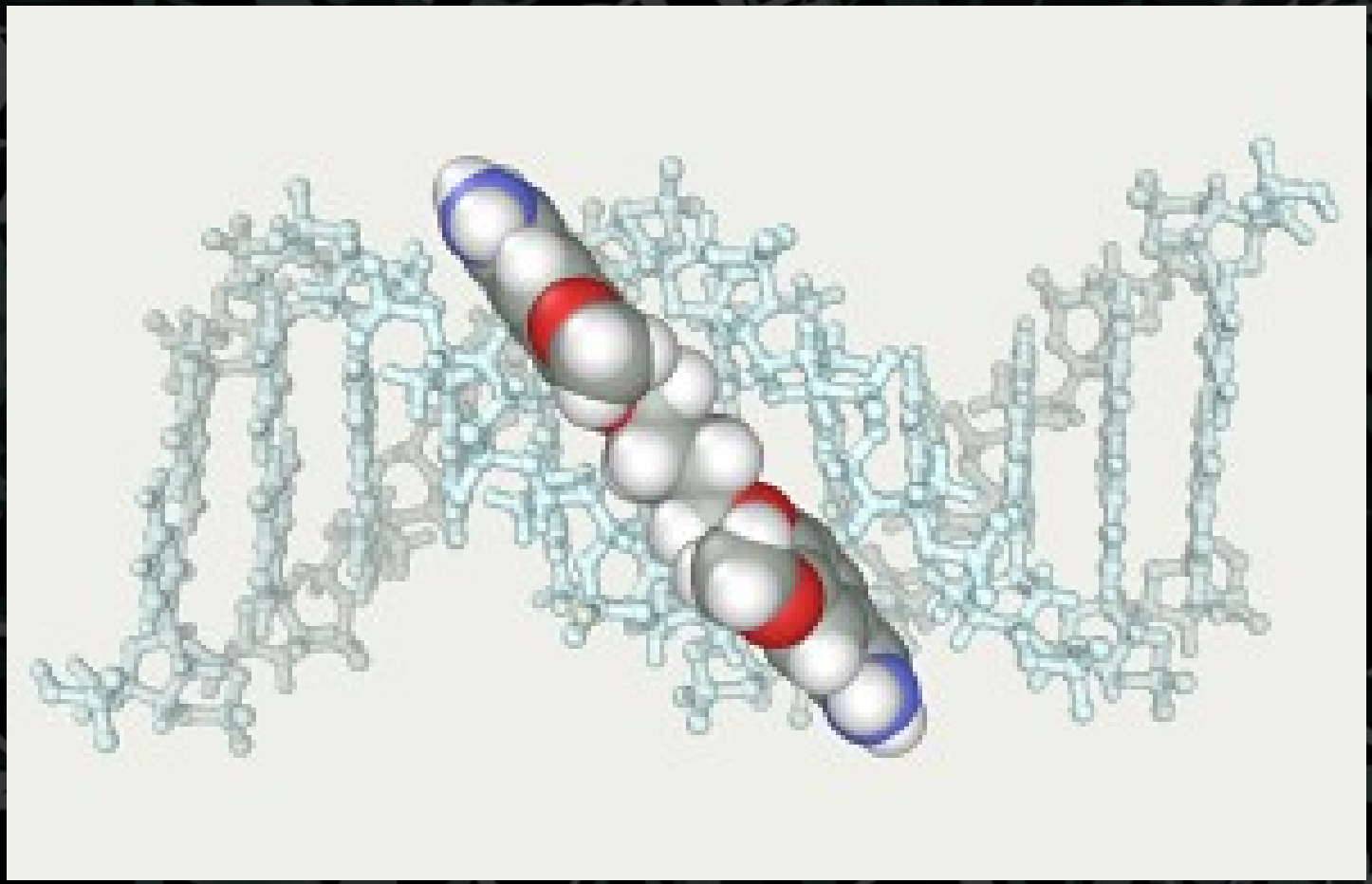
Cp2k and Ascalaph Designer



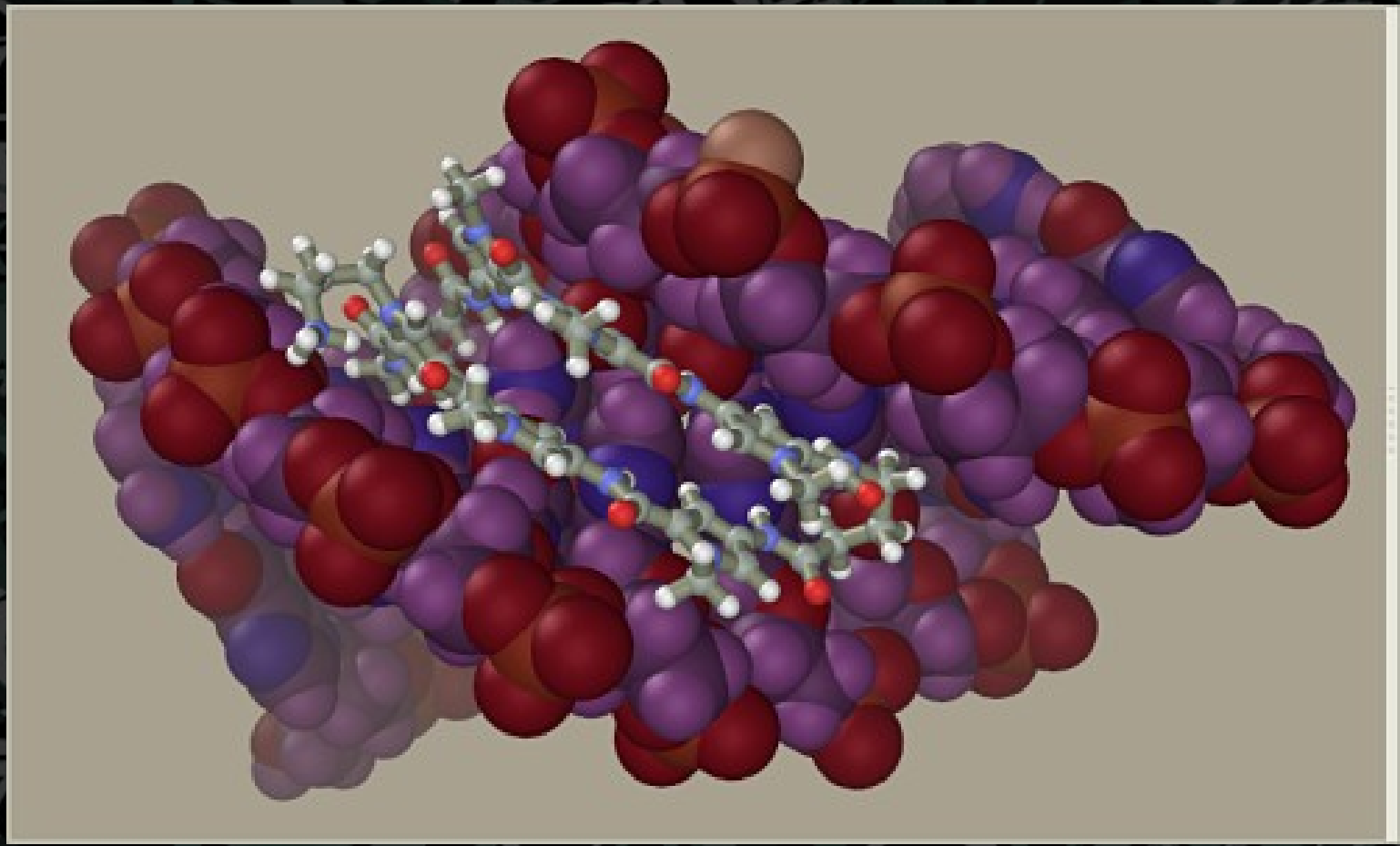
Cp2k and Ascalaph Designer



Cp2k and Ascalaph Designer



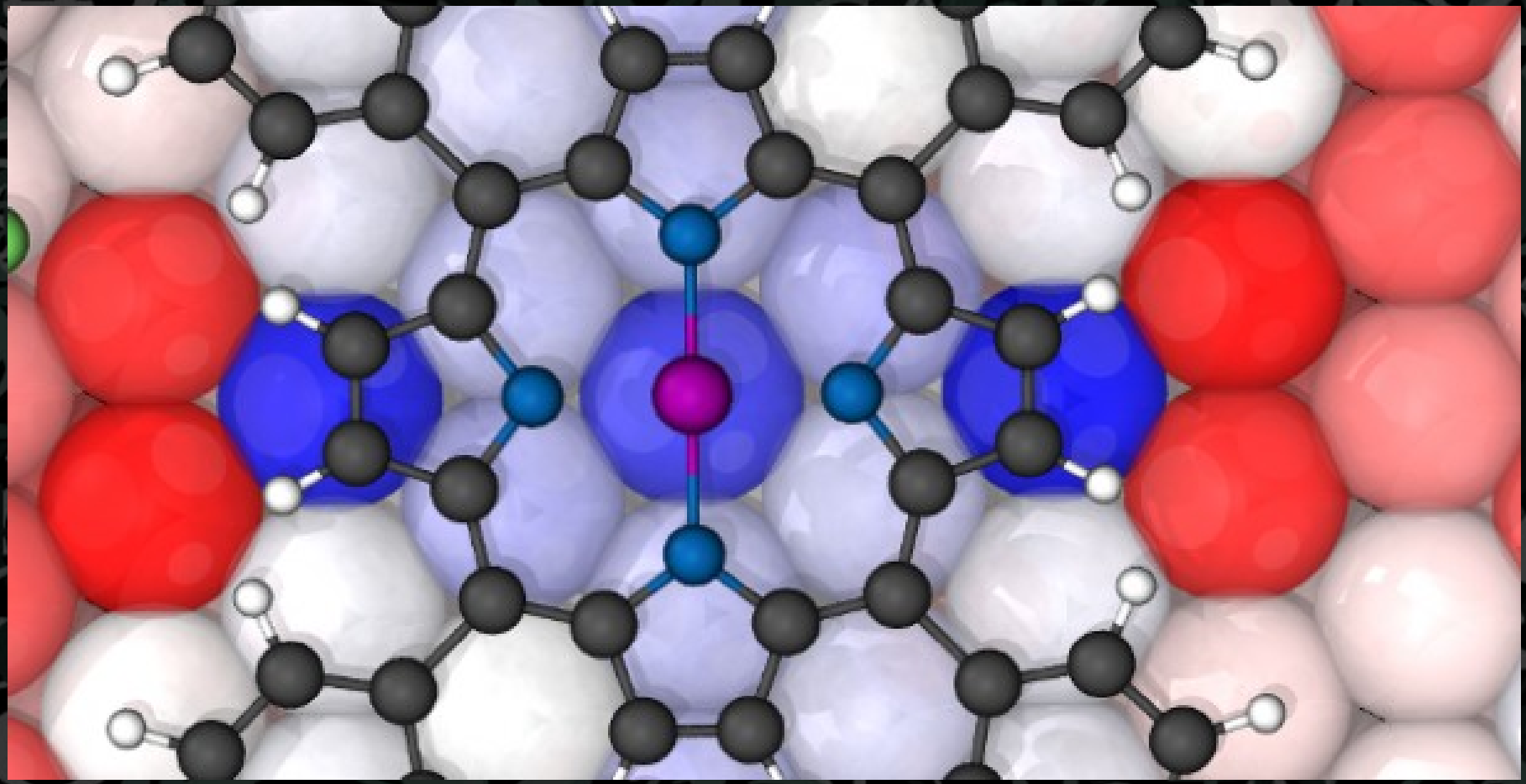
Cp2k and Ascalaph Designer



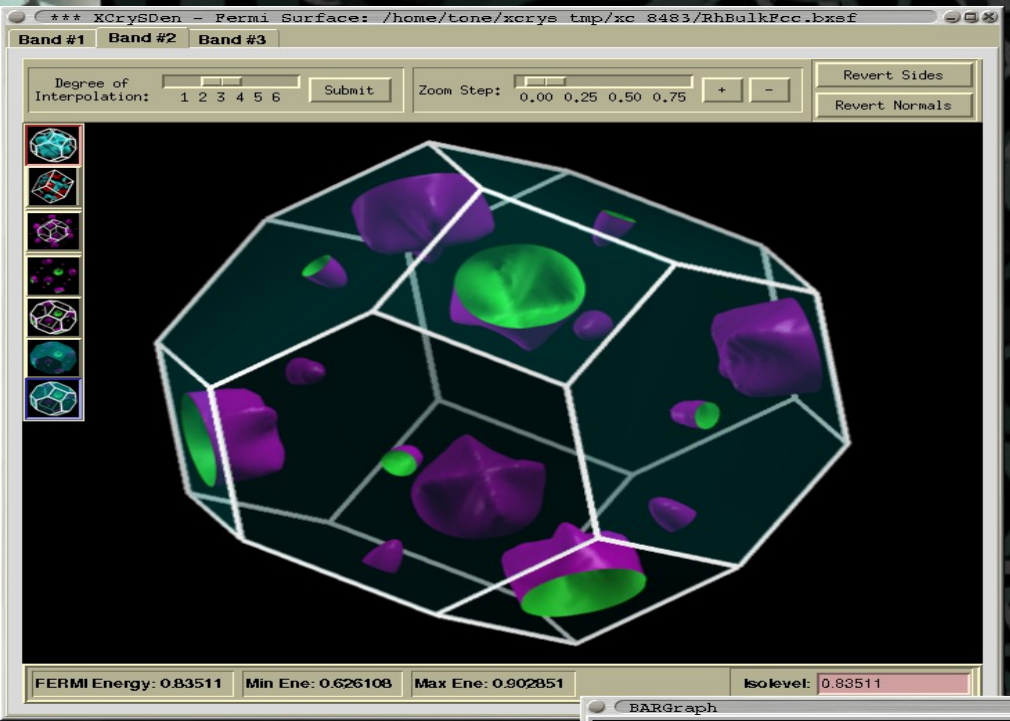
Quantum ESPRESSO

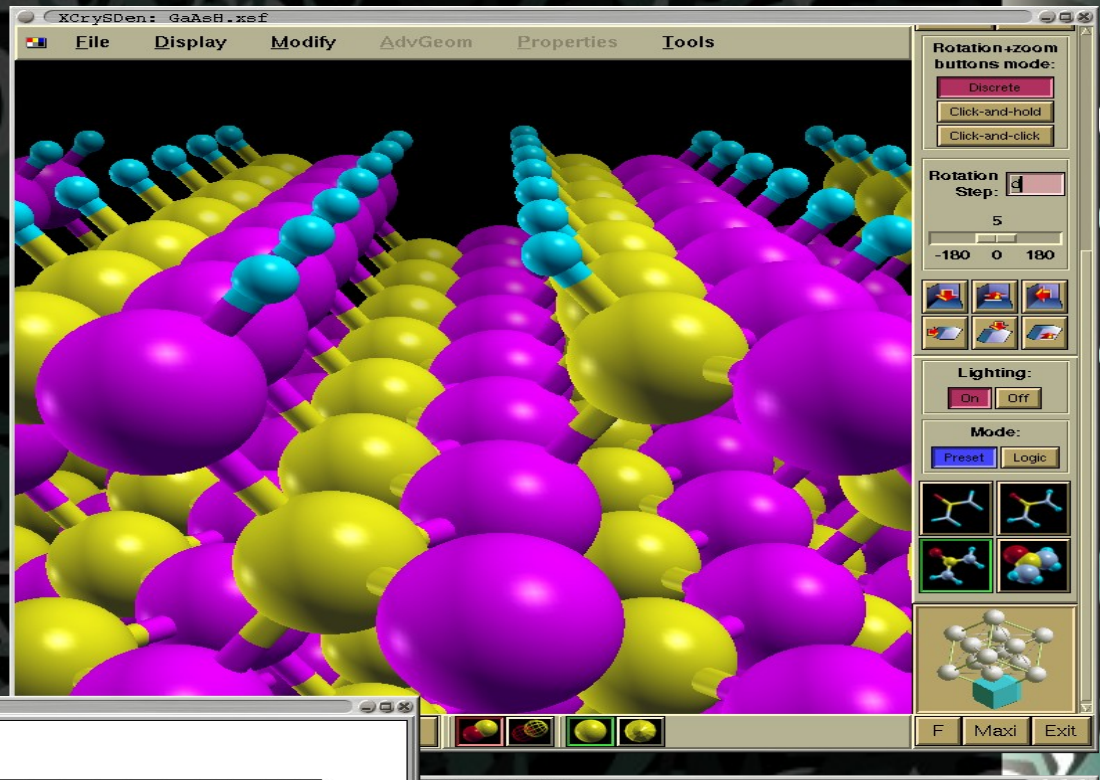
- از مدل Ab initioاستفاده می‌کند و تحت GPLانتشار می‌یابد و یکی از مشهورترین هاست! با همان DFTطرح ریزی شده و با فرترن نوشته شده و رابط پایتونی هم دارد!از این نرم‌افزار به دلیل توسعه به روز و قوی آن در حال حاضر در شاخه نانوفیزیک نیز استفاده می‌شود و مؤسسه عبدالسلام ایتالیا از آن پشتیبانی و به نوعی جهتگیری آن را در دست دارد.

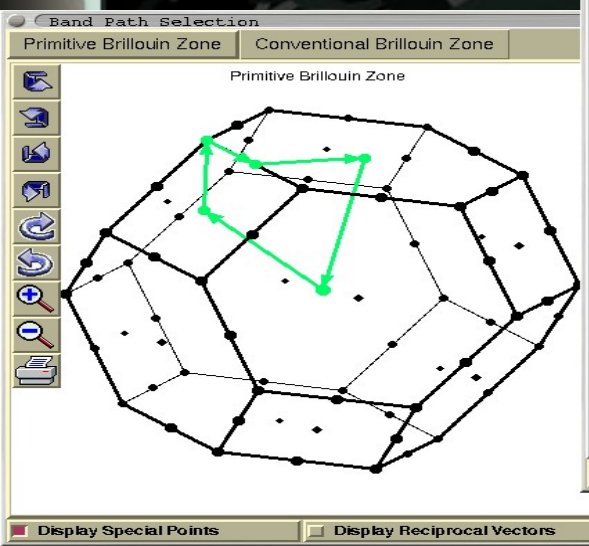
Spatially Extended Kondo State in Magnetic Molecules Induced by Interfacial Charge Transfer.

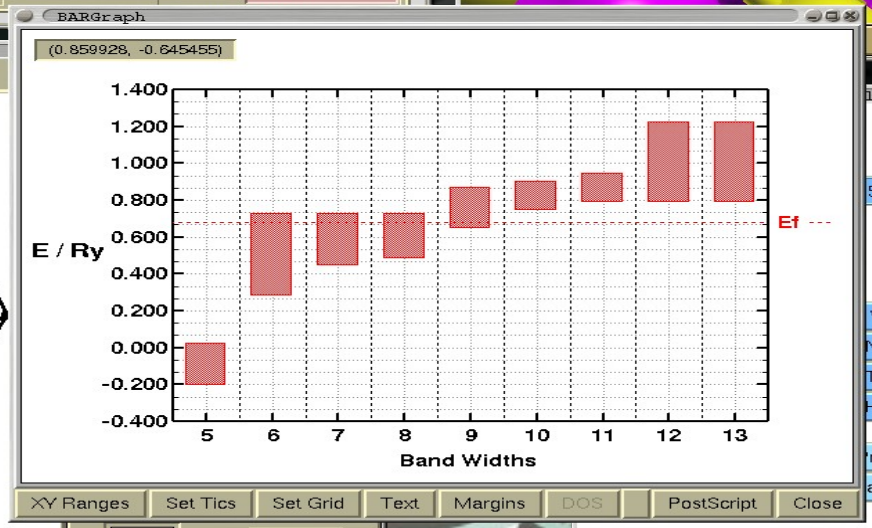


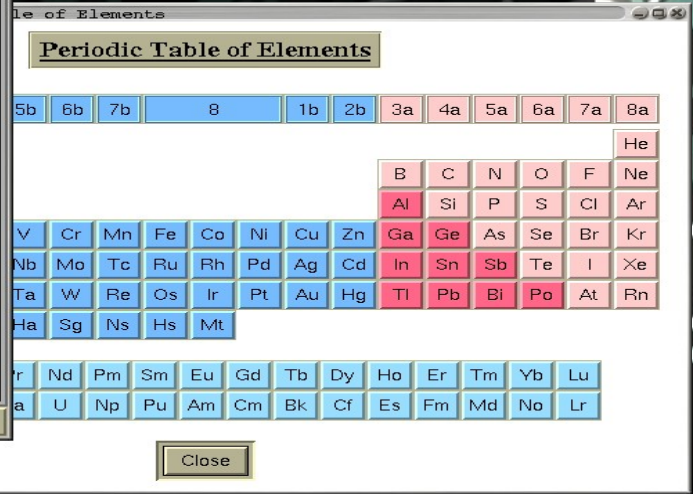
XcrySDen


*** XCrySDen - Fermi Surface: /home/tone/xcrys tmp/xc 8483/RhBulkFcc.bxsf
Band #1
Band #2
Band #3
Degree of Interpolation:
1 2 3 4 5 6
Submit
Zoom Step:
0.00 0.25 0.50 0.75
Revert Sides
Revert Normals
FERMI Energy: 0.83511
Min Ene: 0.626108
Max Ene: 0.902851
Isolevel:
0.83511


XCrySDen: GaAsH.xsf
File
Display
Modify
AdvGeom
Properties
Tools
Rotation+zoom buttons mode:
Discrete
Click-and-hold
Click-and-click
Rotation Step:
5
-180 0 180
Lighting:
On
Off
Mode:
Preset
Logic
F
Maxi
Exit


Band Path Selection
Primitive Brillouin Zone
Conventional Brillouin Zone
Primitive Brillouin Zone
Display Special Points
Display Reciprocal Vectors
OK
Cancel


BARGraph
(0.859928, -0.645455)
E / Ry
Ef
Band Widths
XY Ranges
Set Tics
Set Grid
Text
Margins
DOS
PostScript
Close


Periodic Table of Elements
Close

octopus

- octopus is a software package for performing Kohn–Sham density functional theory (DFT) and time-dependent density functional theory (TDDFT) calculations
- The code is written predominantly in Fortran, with some C and Perl. It is released under the GPL
- For optimal execution perfomance Octopus is parallelized using MPI and OpenMP and can scale to tens of thousands of processors. It

octopus

also has support for graphical processing units (GPUs) through OpenCL

Target problems

- Linear optical (i.e. electronic) response of molecules or clusters, also second-order nonlinear response.
- Non-linear response to classical high-intensity electromagnetic fields, taking into account both the ionic and electronic degrees of freedom.
- Ground-state and excited state electronic properties of systems with lower dimensionality, such as quantum dots.

Target problems

- Photo-induced reactions of molecules (e.g., photo-dissociation, photo-isomerization, etc.).
- In the immediate future, extension of these procedures to systems that are infinite and periodic in one or more dimensions (polymers, slabs, nanotubes, solids), and to electronic transport.

Goptical project

Goptical is a C++ optical design and simulation library. Goptical is free software and is part of the GNU project.

It provides model classes for optical components, surfaces and materials. It enables building optical systems by creating and placing various optical components in a 3d space and simulates light propagation through the system. Classical optical design analysis tools can be used on optical systems.

Goptical project

It takes advantages of the C++ object model to allow building complex optical systems with a few classes instanciations as optical components are represented by language objects.

FLUKA

- Monte Carlo simulation package for the interaction and transport of particles and nuclei in matter
- FLUKA has many applications in particle physics, high energy experimental physics and engineering, shielding, detector and telescope design, cosmic ray studies, dosimetry, medical physics, radiobiology. A recent line of development concerns hadron therapy.

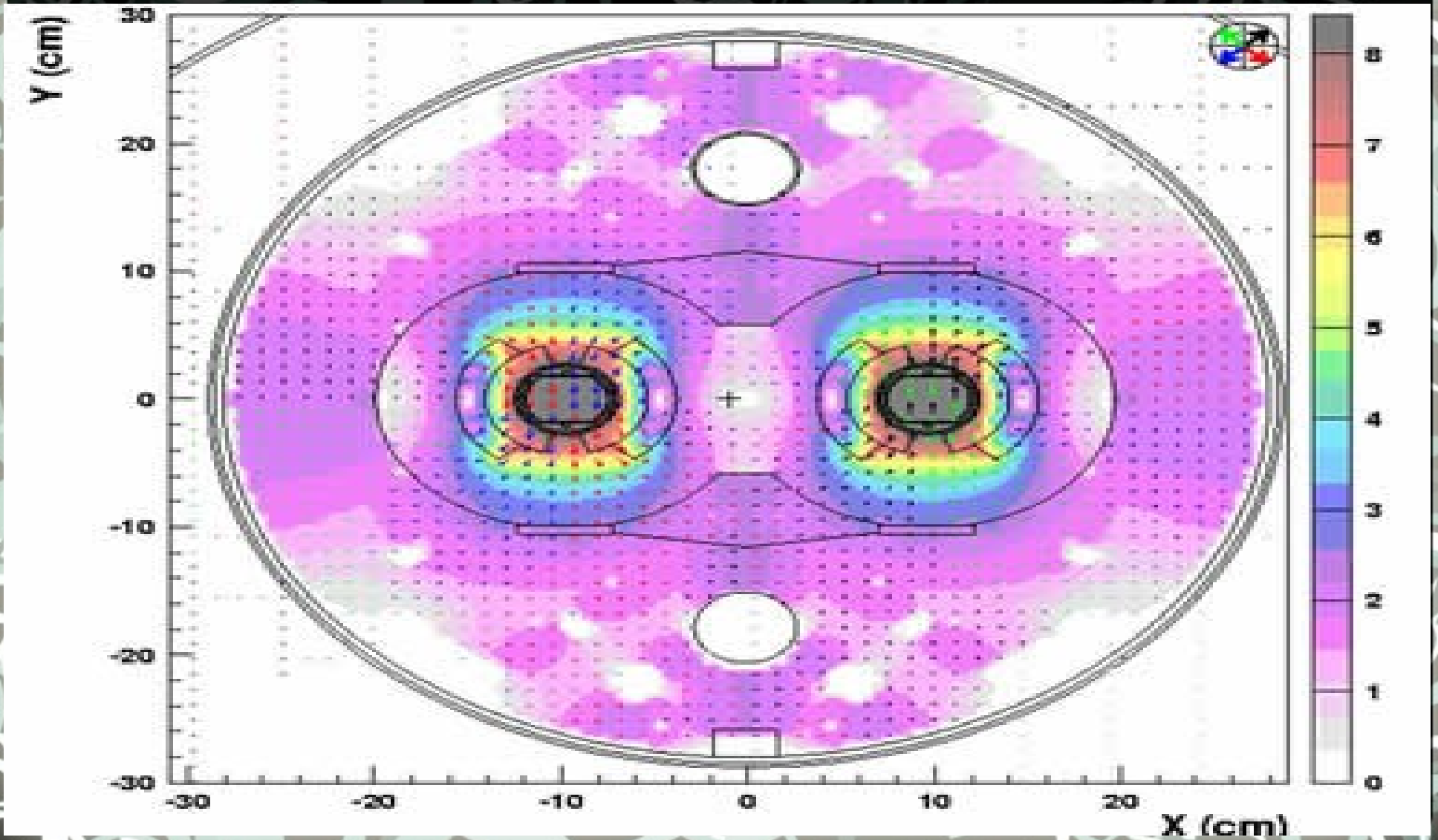
FLUKA

- FLUKA is available in form of a pre-compiled object library for a number of computer platforms. Source code is also available subject to the conditions specified in the FLUKA license
- FLUKA is developed using the FORTRAN language. Under Linux the g77 compiler is at present necessary to build and run user programs. Since 2011 also a 64 bit version compiled in gfortran is available (for version >4.5)

FLUKA

- A graphical user interface to run FLUKA named Flair has been developed using Python (programming language) and is available at the project's web-site.
- The software is sponsored and copyrighted by INFN and CERN.
- FLUKA software code is used by Epcard, which is a software program for simulating radiation exposure on airline flights.

FLUKA



منابع

- http://en.wikipedia.org/
- http://www.quantum-espresso.org/
- http://www.xcrysden.org/
- http://www.tddft.org/trac/octopus
- http://www.tddft.org/programs/octopus/wiki/index.php/Main_Page
- http://www.opensourcephysics.org/

contact

- mersadkhan@gmail.com
- Www.facebook.com/mersadkhan
- Yahoo ID : mersadkhan
- Twitter : mersadkhan

منابع

- http://en.wikipedia.org/
- http://www.quantum-espresso.org/
- http://www.xcrysden.org/
- http://www.tddft.org/trac/octopus
- http://www.tddft.org/programs/octopus/wiki/index.php/Main_Page
- http://www.opensourcephysics.org/
- http://home.web.cern.ch/