

Dynamické jevy

různé situace

❖ blízko rovnováhy

- relaxační jevy , $T \rightarrow T_c$ $t_{\text{relax}} \rightarrow \infty$
- např. fázové uspořádávání

❖ daleko od rovnováhy

- např. vývoj rozhraní

V obou případech existuje kritické chování.

Určující elementem je
existence a typ symetrie problému.

Fázové uspořádání

vývoj domén při ochlazení pod kritickou teplotu

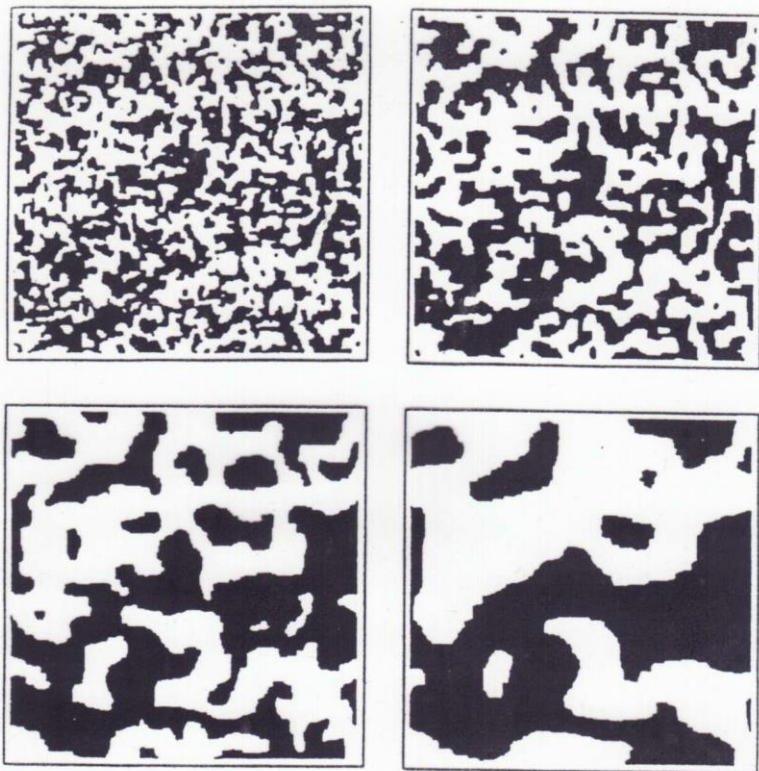


Figure 2. Monte Carlo simulation of domain growth in the $d = 2$ Ising model at $T = 0$ (taken from Kissner [8]). The system size is 256×256 , and the snapshots correspond to 5, 15, 60 and 200 Monte Carlo steps per spin after a quench from $T = \infty$.

Soutředíme se na
závislost velikosti
domény L na čase

$$L(t) = ?$$

Popis: Kinetický Isingův model

$$\sigma_i(t), i=1, \dots, N$$

korelační spin-spinová funkce

$$K_{ij} = \langle \sigma_i(t) \cdot \sigma_j(t) \rangle$$

- Výpočet velikosti domény pomocí nul korelační funkce.
- Následně určovat závislost velikosti domény L na čase.

různé situace pro celkovou magnetizaci M

- a) NEzachovává se
- b) zachovává se

dynamika

- a) Glauber
- b) Kawasaki

různá závislost velikosti domény L na čase:

- a) $L \sim t^{1/2}$
- b) $L \sim t^{1/3}$

jména zákonitostí

- a) Cahn – Allen
- b) Lifšic – Slyozov - Wagner

Růst rozhraní v čase

• $\frac{dR}{dt} = \frac{1}{2} \frac{dR}{d\ln R}$

• $\frac{dR}{dt} = \frac{1}{2} \frac{dR}{d\ln R}$

• $\frac{dR}{dt} = \frac{1}{2} \frac{dR}{d\ln R}$

• $\frac{dR}{dt} = \frac{1}{2} \frac{dR}{d\ln R}$

• $\frac{dR}{dt} = \frac{1}{2} \frac{dR}{d\ln R}$

• $\frac{dR}{dt} = \frac{1}{2} \frac{dR}{d\ln R}$

• $\frac{dR}{dt} = \frac{1}{2} \frac{dR}{d\ln R}$

• $\frac{dR}{dt} = \frac{1}{2} \frac{dR}{d\ln R}$

Popis hrubosti (roughness)

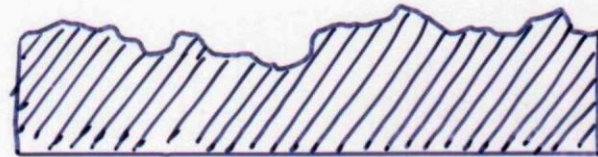
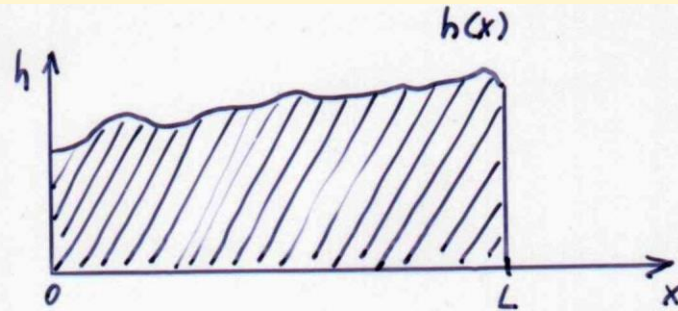
description of the surface

$$d = d' + 1$$

roughness

$$W = \sqrt{\frac{1}{L^{d'}} \sum_i (h_i - \bar{h})^2}$$

$$\bar{h} = \frac{1}{L^{d'}} \sum_i h_i$$



Vlastnosti rozhraní

Rozhraní je obecně hrubé:

Hrubost se popisuje závislostí velikosti fluktuace $W(L)$ na délce vzorku L .

různé situace:

❖ v termální rovnováze nebo blízko rovnováhy

- jev hrubnutí, $T \rightarrow T_R$, $W \rightarrow \infty$

❖ daleko od rovnováhy $W(L,t)$

-tzv. kinetické hrubnutí

-morgologie růstu

-etc.

závislost na velikosti a na čase - dynamické škálování

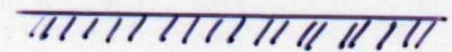
roughness (width) of the surface

$$w(t, L) = \langle \sqrt{h^2 - \bar{h}^2} \rangle$$

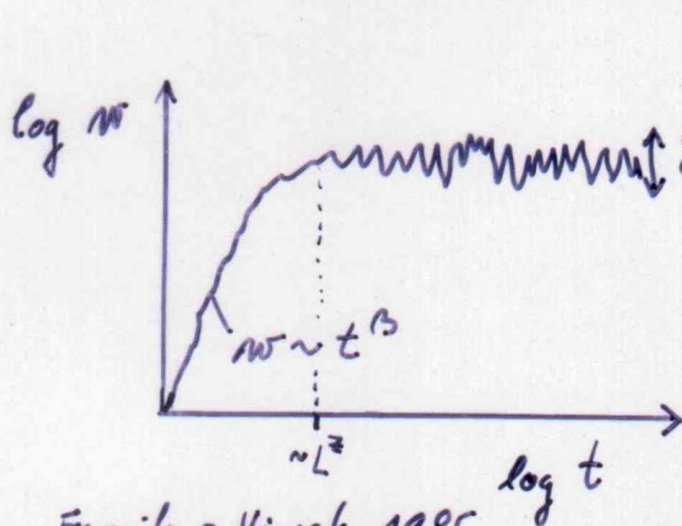
$$\bar{h} = 1/N \sum_i h_i, \quad N = L^{d'}$$

L linear system size

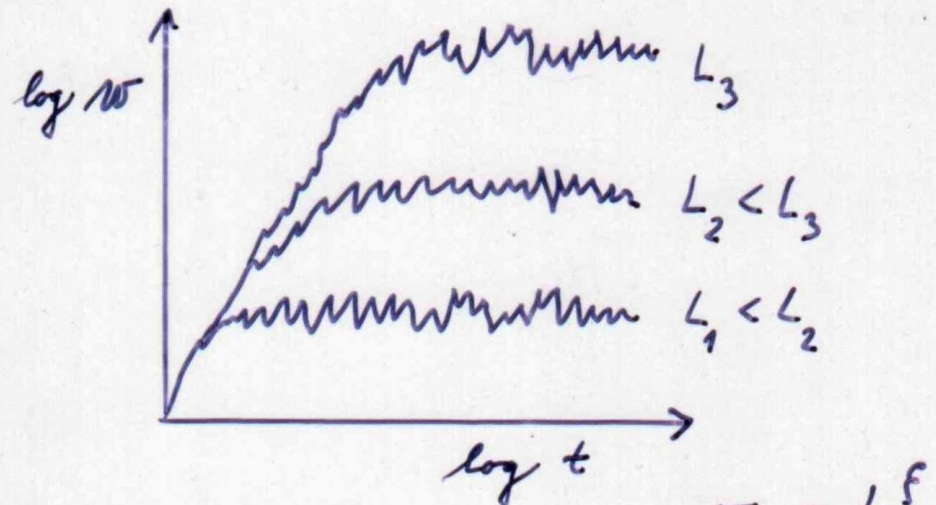
d' surface dimension



$$f \sim t^{1/2}$$



Family & Vicsek 1985



$$w(t, L) = L^\zeta f(t/L^z)$$

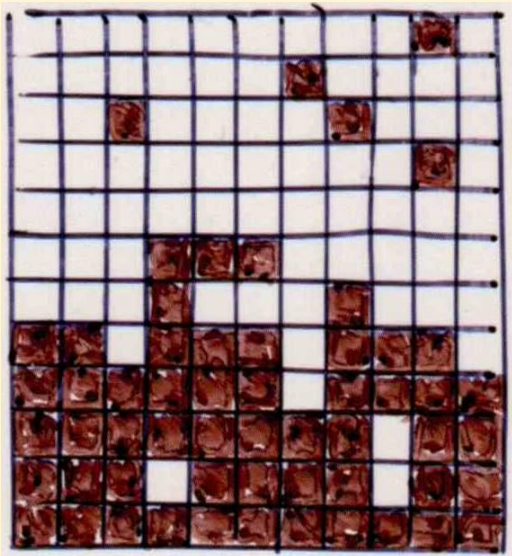
$$f(x) \rightarrow \text{const.}, x \rightarrow \infty \quad f(x) \propto x^\beta, \beta = \zeta/z \text{ as } x \rightarrow 0.$$

ζ – exponent hrubosti

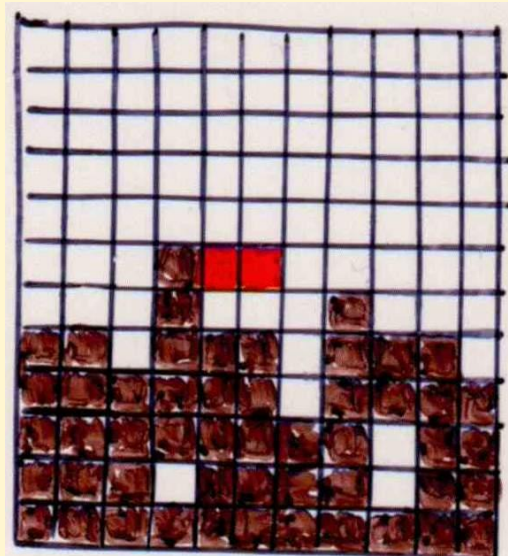
β – růstový exponent

z – dynamický exponent

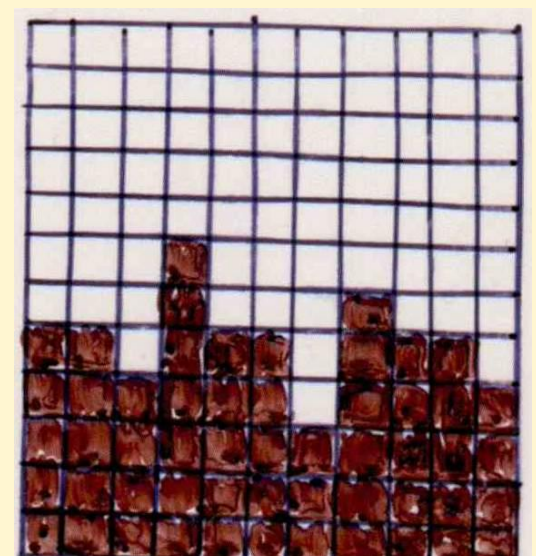
Modelování rozhraní



Mřížový plyn

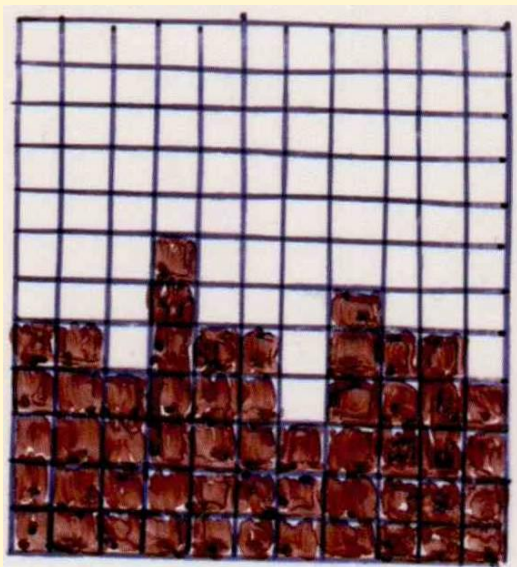


převis



Solid on solid

Výpočet energie v solid-on-solid modelu



Solid on solid

Celulární automaty pro růst povrchu

CA určen zadáním možných stavů a dynamických pravidel

Stav:

pravidelné uspořádání **konečného počtu buněk**,
každá buňka může být v některém z **konečného počtu stavů**

- pole buněk indexované indexem i , obvykle mříž Λ v d dimenzích
- stav buňky je popsán hodnotou **diskrétní** proměnné s_i z konečné množiny stavů **S zde výšky h_i**

Pravidlo:

- lokální pravidlo evoluce v **diskrétním čase** $t \rightarrow t + 1$
 - pro každé i definuj určité okolí $O(i)$ – množina buněk v okolí buňky i

pro každé $i \in \Lambda$ nová hodnota **$s_i(t+1) = F(\{s\}_{O(i)}(t))$**

zde:

urči uzel i a zvyš výšku: $h_i \rightarrow h_i + 1$

Náhodná depozice

Souřadnice:

$$h_1, h_2, \dots, h_L$$

Pravidlo evoluce s diskrétním časem $t \rightarrow t + 1$:

Vyber náhodně uzel i a zvýš výšku: $h_i \rightarrow h_i + 1$.

from random positions above the surface and are deposited on the top of the column under them. In contrast to BD, in RD the height of the interface at a given point does not depend on the height of the neighboring columns.

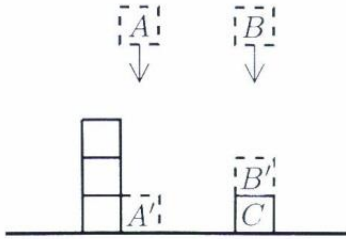
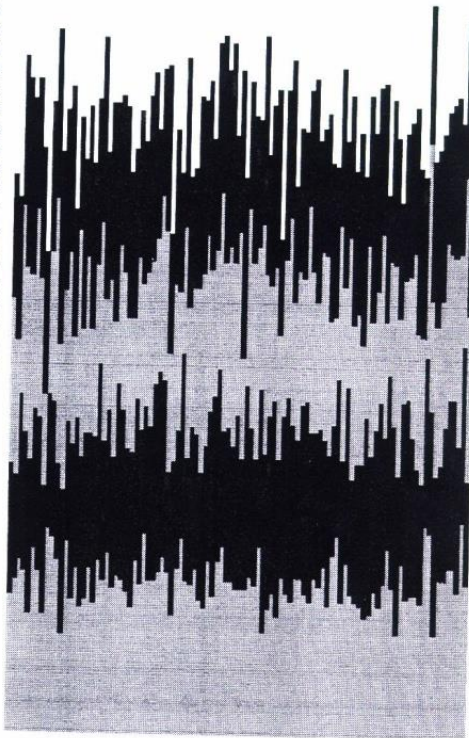


Figure 4.2 A typical interface generated by the RD model after depositing 16 000 particles on a substrate of size $L = 100$. The shading code reflects the arrival time of the particles: after the deposition of each set of 4000 particles, the shading changes. Note the rapid increase in the roughness and the uncorrelated nature of the surface, in contrast to the case of BD (Fig. 2.2).



Náhodná depozice

Určujeme hrubost

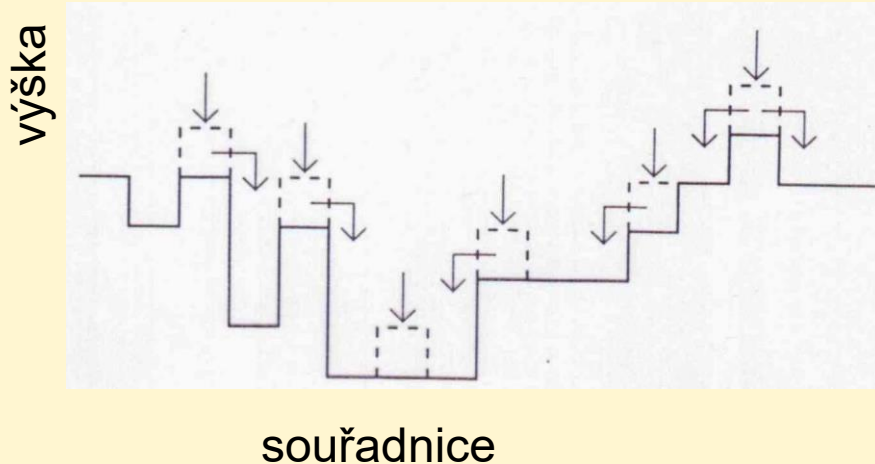
$$W(t) = \frac{1}{L} \left\langle \sqrt{\sum_{k=1}^L \left(\bar{h}^2 - h^2 \right)} \right\rangle$$

analyticky řešitelné

$$W(t) \sim t^{1/2}$$

růst v gravitačním poli

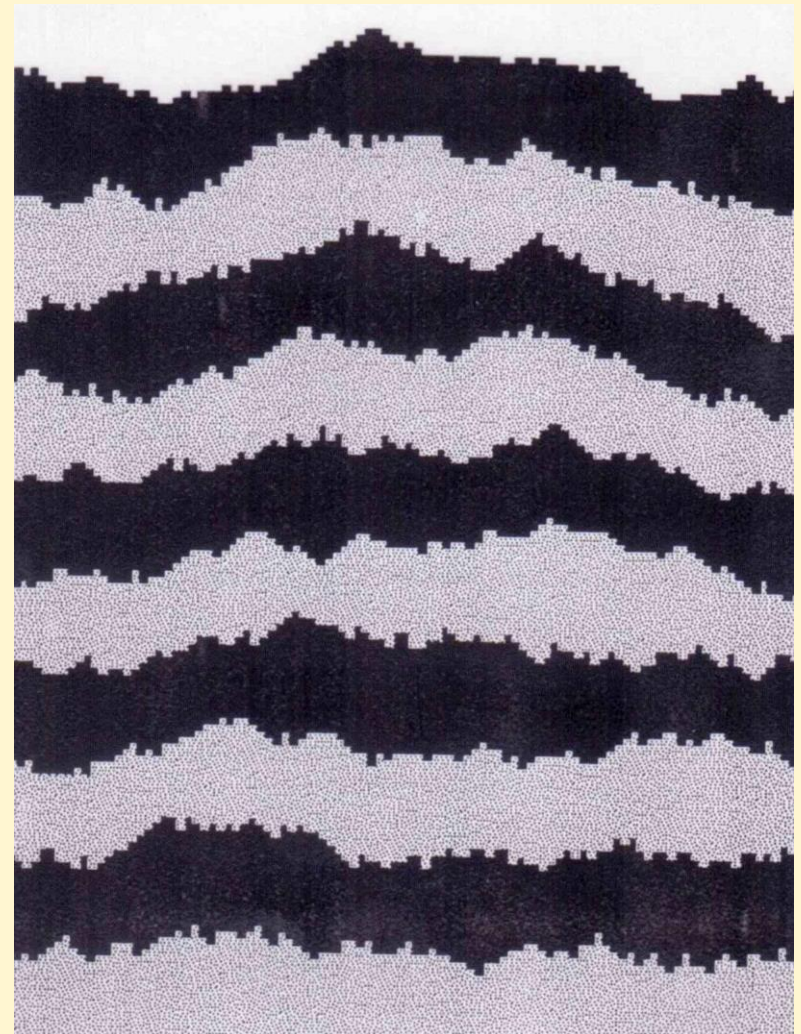
model sedimentace Edwards–Wilkinson (1982)



výsledek modelování
konfigurace v různých
časech



výška

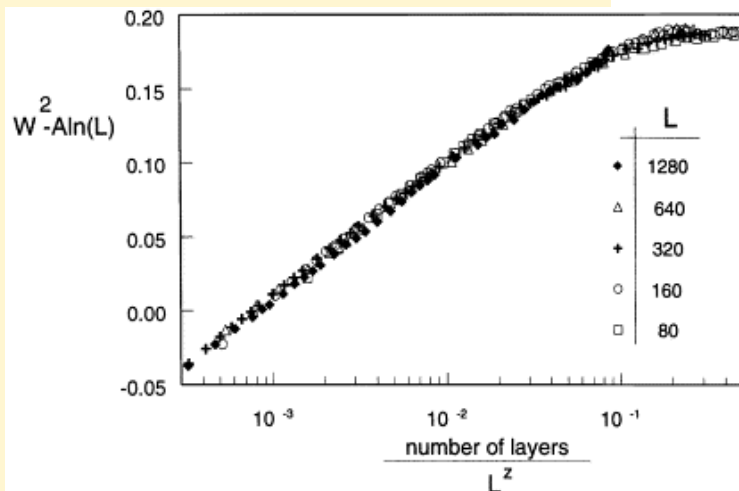
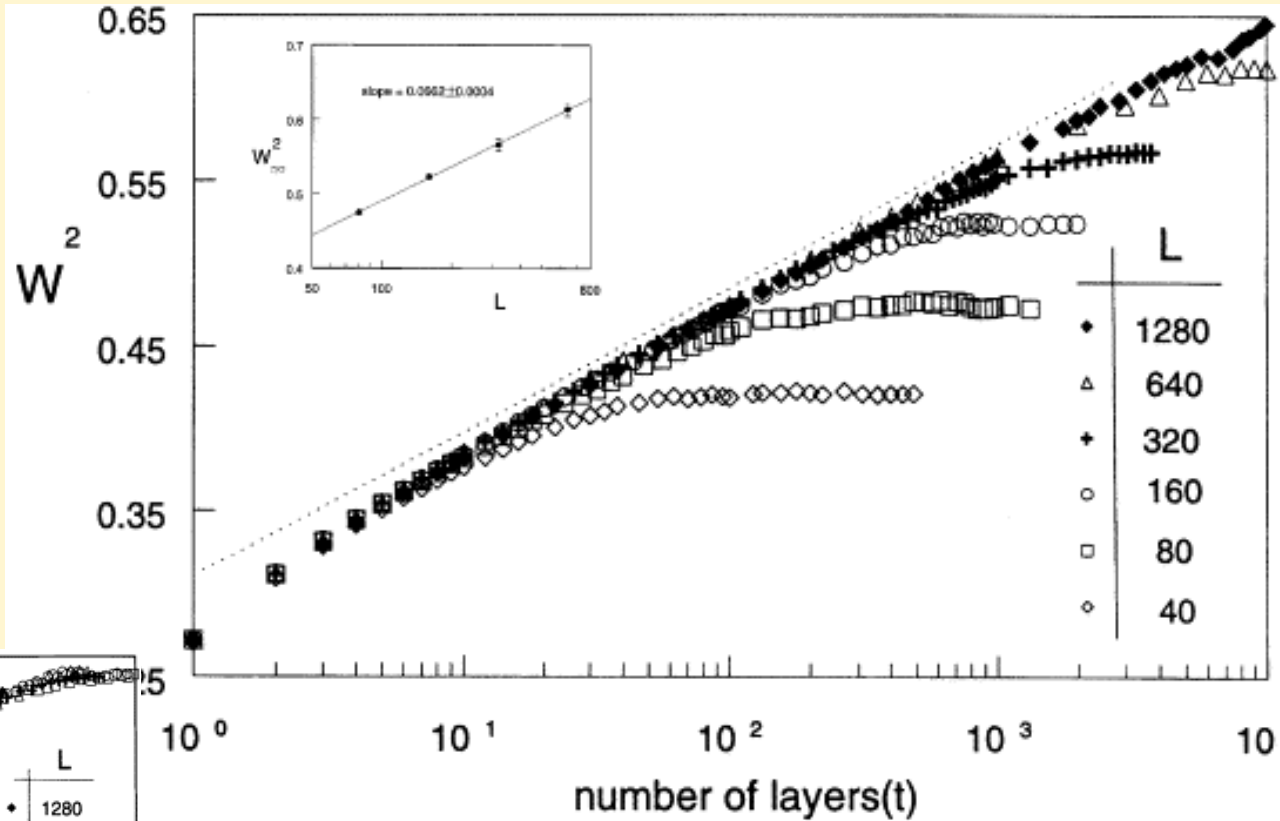


souřadnice

simulace EW modelu

v 2+1 dimenzích:

S Pal, D.P Landau Physica A:267 ,3-4 (1999), 406–413



Úloha: modelování růstu v 1+1 D

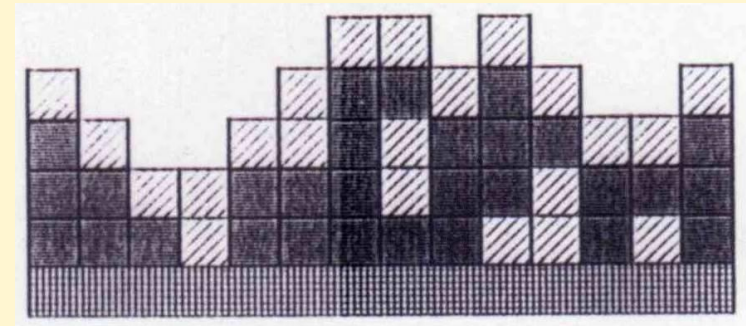
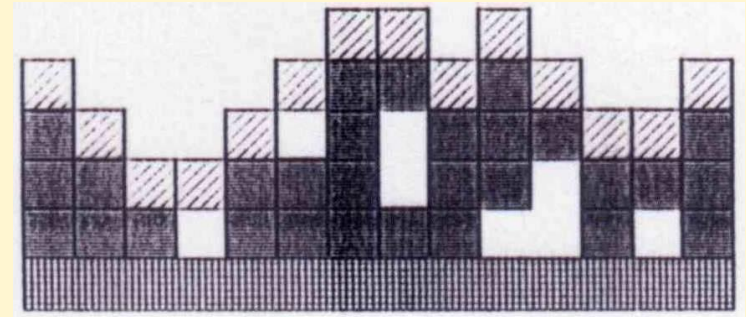
Simulujte růst sedimentu v 1+1 dimenzi na rozhraní o délce L pomocí mřížkového modelu s relaxací do nejbližších sousedů.

Měřte vývoj hrubosti rozhraní v závislosti na čase. Ukažte, že pro konečný vzorek dochází k saturaci hrubosti, srovnejte to s náhodnou depozicí.

Další růstové modely

jednoduché modely:

- **balistická depozice**
- **Eden model**



Úlohy simulace 1+1D modelů

EW model:

Simulujte růst sedimentu na rozhraní pomocí mřížkového modelu s relaxací do nejbližších sousedů. Měřte vývoj hrubosti rozhraní v závislosti na čase, odhadnete růstový exponent případně další škálovací exponenty.

balistická depozice:

Simulujte vývoj balistické depozice na rozhraní pomocí balistického modelu. Měřte vývoj hrubosti rozhraní v závislosti na čase, odhadnete růstový exponent případně další škálovací exponenty.

Problém adsorpce - desorpce

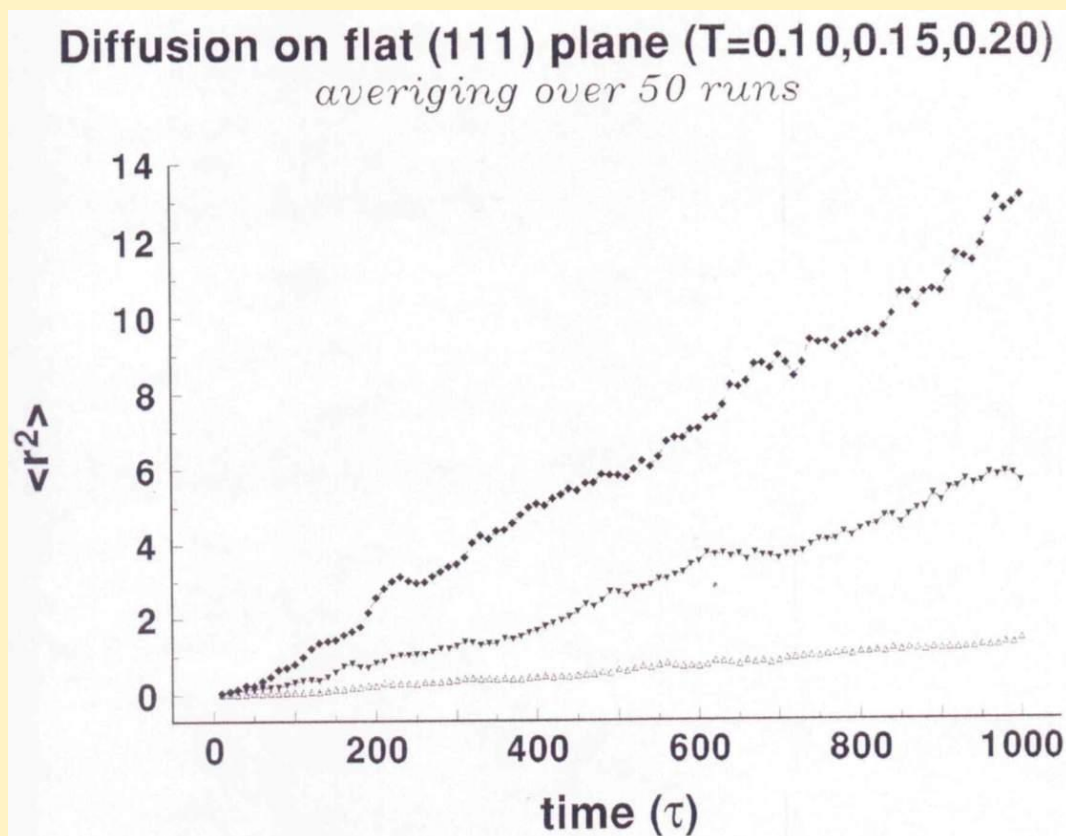
- blízko rovnováhy: dynamika kondenzace / vypařování
- **parametry: vazbová energie, teplota**
- **řešení lineárních bilančních rovnic**
- **MC simulace souhlasí s analytickým řešením**

Difúze – pohyb ve stochastickém potenciálu

Simulovat např. pomocí Einsteinovy relace.

$$2tD = 1 / 3 \left(\left| r_i(t) - r_i(0) \right|^2 \right)$$

Např. pomocí MD počítáme kvadrát odchylky jako fci. času



Difúze ...

$$D = 1 / 2dt \left\langle \left| r_i(t) - r_i(0) \right|^2 \right\rangle$$


Difúzní koeficient se získá pomocí středování přes mnoho trajektorií.

Odečte se sklon časové závislosti.

Lze použít jak pro objemovou, tak pro povrchovou difúzi.

Přirozeně pomocí MD, ale lze i pomocí MC.

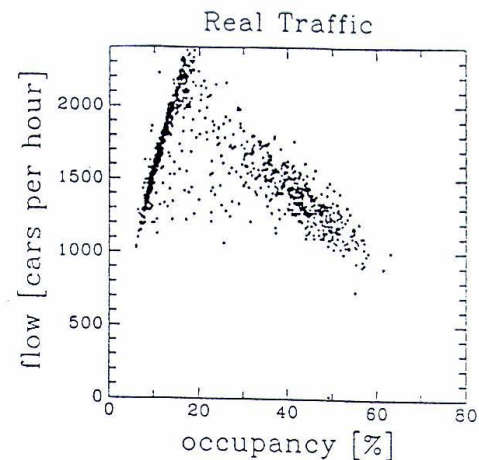
Výsledek závisí na systému (potenciálu), v případě MC i na dynamice – anomální difúze.

Různé přechové matice = různé sekvence stavů, tj. odpovídají různé dynamice

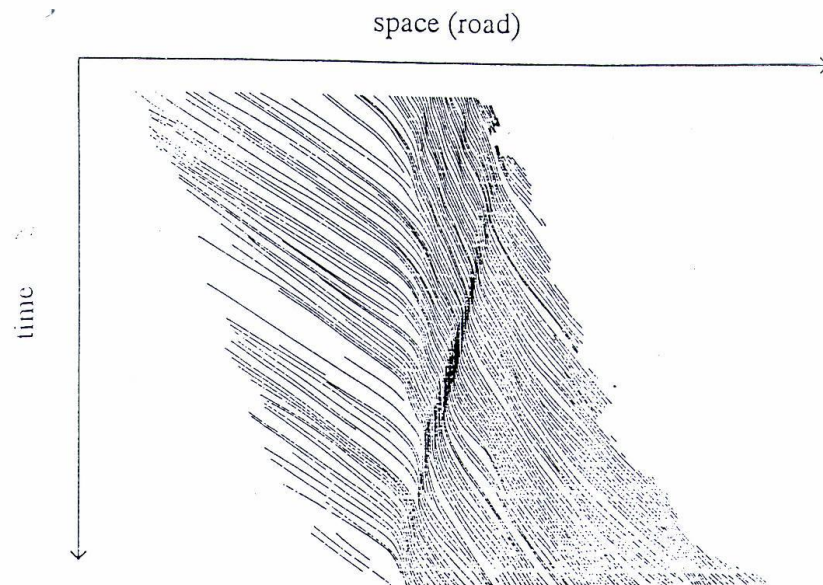
Exponent závislosti na čase se změní!

Data o skutečné dopravě

Cíl je maximální průjezdnost.
Ale vznikají zácpy.



Traffic flow q (in cars per hour) vs. occupancy (in cars per hour) from measu. reality. Occupancy is the percentage of the road which is covered by vehicles (after [17]).



Space-time-lines (trajectories) for cars from Aerial Photography (after [16]). Each line represents the movement of one vehicle in the space-time-domain.

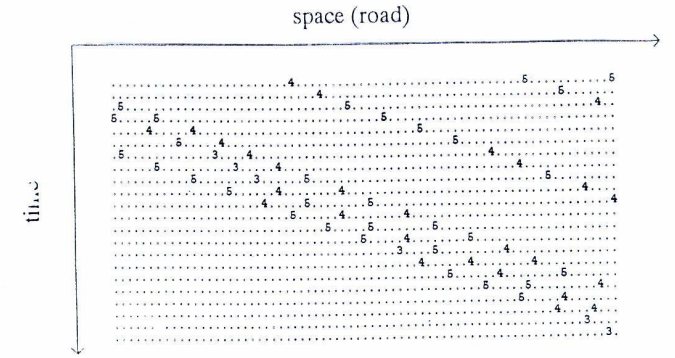
Transportní problémy

❖ Různě komplikované modely ve více dimenzích

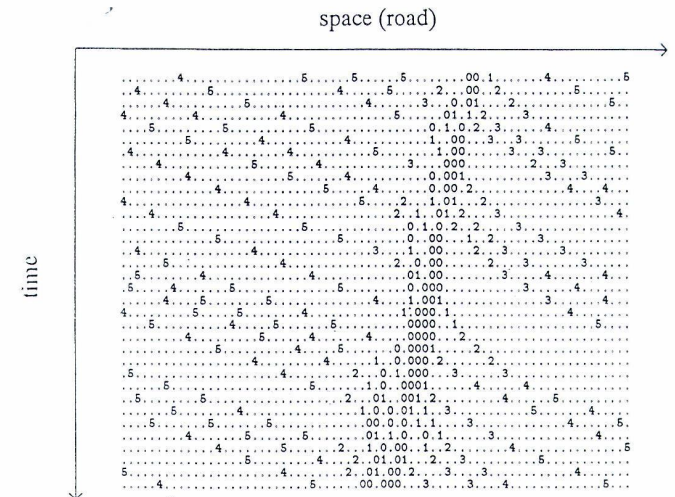
❖ Zjednodušení lineární problém

nař. Nagel-Schreckenbergův model

ale různé rychlosti



— Simulated traffic at a (low) density of 0.03 cars per site. Each new line shows the traffic lane after one further complete velocity-update and just before the car motion. Empty sites are represented by a dot, sites which are occupied by a car are represented by the integer number of its velocity. At low densities, we see undisturbed motion.



— Same picture as figure 1, but at a higher density of 0.1 cars per site. Note the backward motion of the traffic jam.

Nagel-Schreckenbergův model

http://en.wikipedia.org/wiki/Nagel-Schreckenberg_model

Stav buňky: i) prázdná=žádné auto ii) auto s rychlostí V ; $V = 0, 1, \dots, V_{max}$.

Dynamika: obsazené buňky se pohybují jedním směrem $i \rightarrow i+1$;

auto na uzlu i vidí auto vpředu do vzdálenosti L

Paralelní automat – update se provádí paralelně.

V každém kroku se aplikují 4 akce v uvedeném pořadí na všechna auta.

1. ZRYCHLENÍ: když auto jede menší než maximální rychlostí, pak jeho rychlost je zvýšena o jednotku, tj. $V \rightarrow V+1$, pokud $V < V_{max}$.
2. BRZDĚNÍ: každé auto se kontroluje, aby jeho vzdálenost k předchozímu autu byla menší než jeho rychlost, tj. když $L \leq V$, pak $V \rightarrow V-1$.
3. NÁHODNÉ ZPOMALENÍ: rychlost každého auta, které má rychlost větší než 0, je s pravděpodobností p snížena o jednotku.
4. POHYB: všechna auta jsou posunuta dopředu o počet jednotek rovný jejich rychlosti.

Bod 3. je podstatný: lidský faktor, stav vozovky etc.,
bez něj přechod do stacionárního stavu s neměnnými rychlostmi!

Simulace Nagel- Schreckenbergova modelu

Vznikají zácpy, když
pohybu auta brání
předchozí vozidlo.

Zácpy se pohybují
proti směru jedoucích
vozidel.

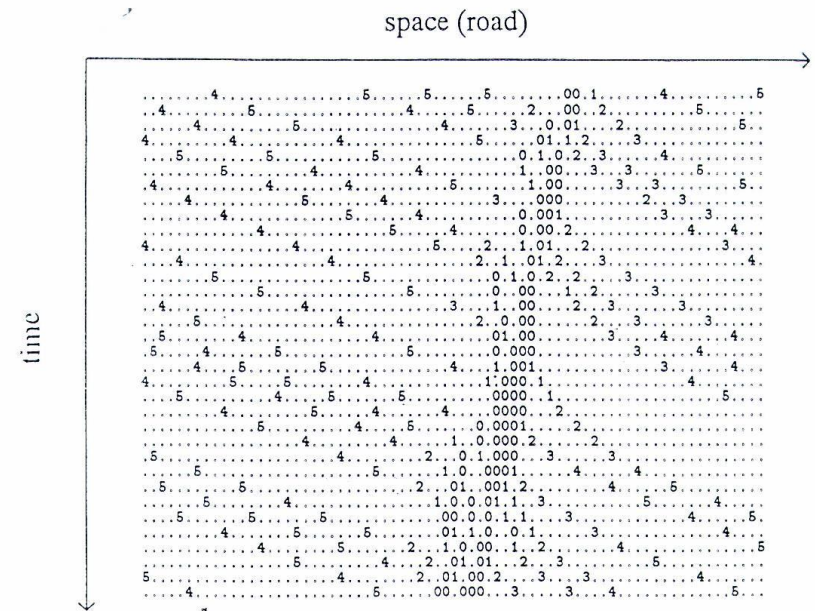
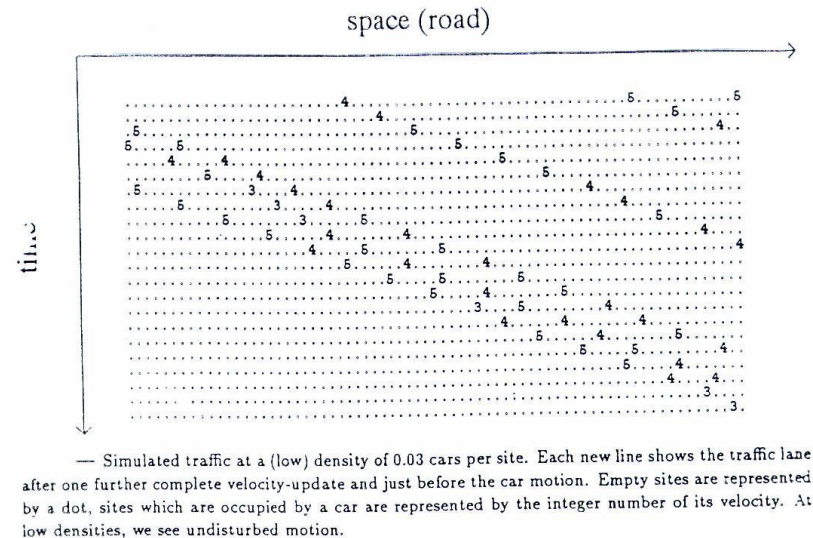
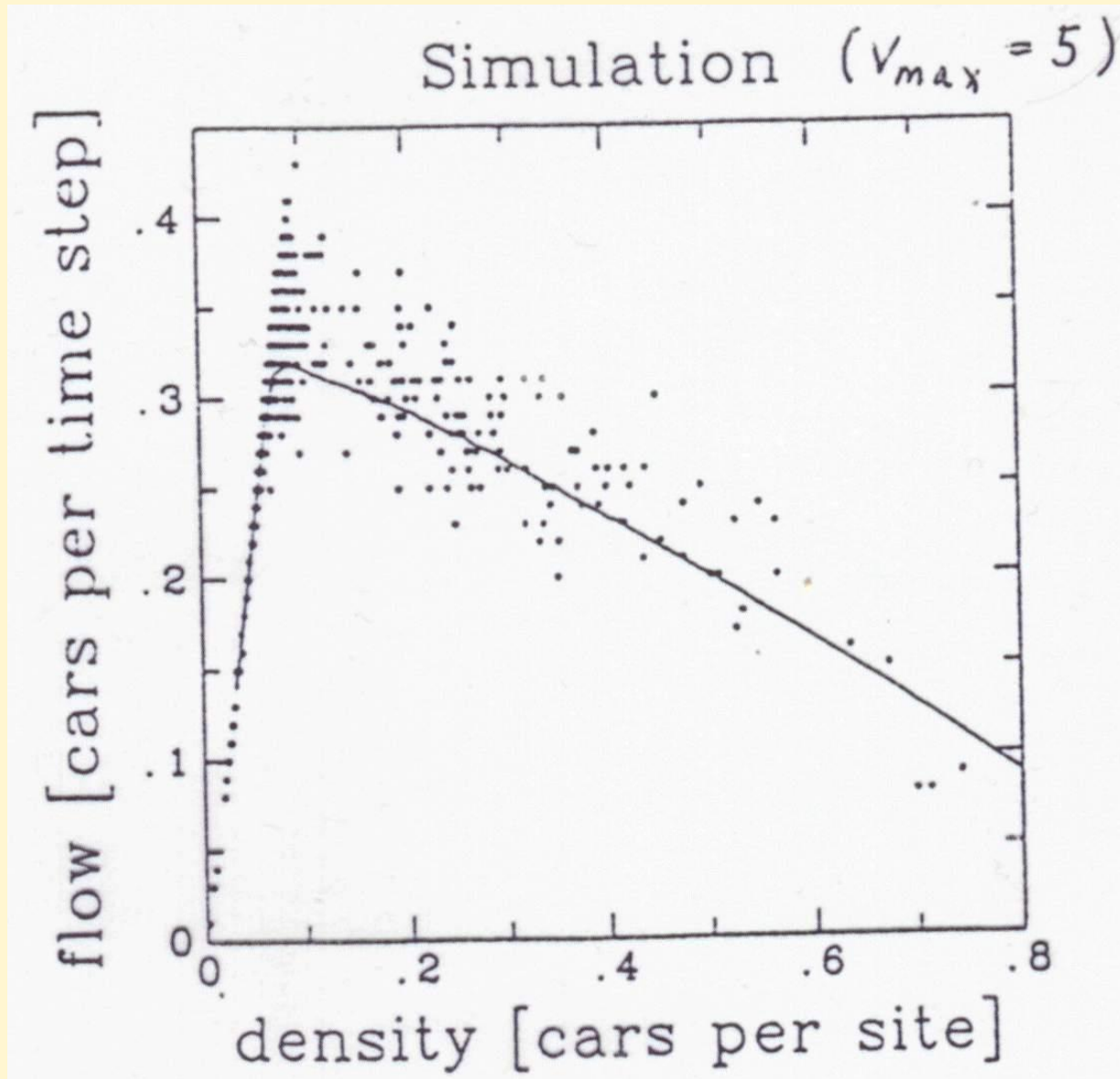


Diagram dopravy



Základní model transportu v 1D

ASYMMETRIC SIMPLE EXCLUSION PROCESS -ASEP

Diskrétní model na 1D mřížce s N uzly

Skok s pravděpodobností p vpravo a s pravdep. q vlevo
pokud je koncový uzel neobsazený.

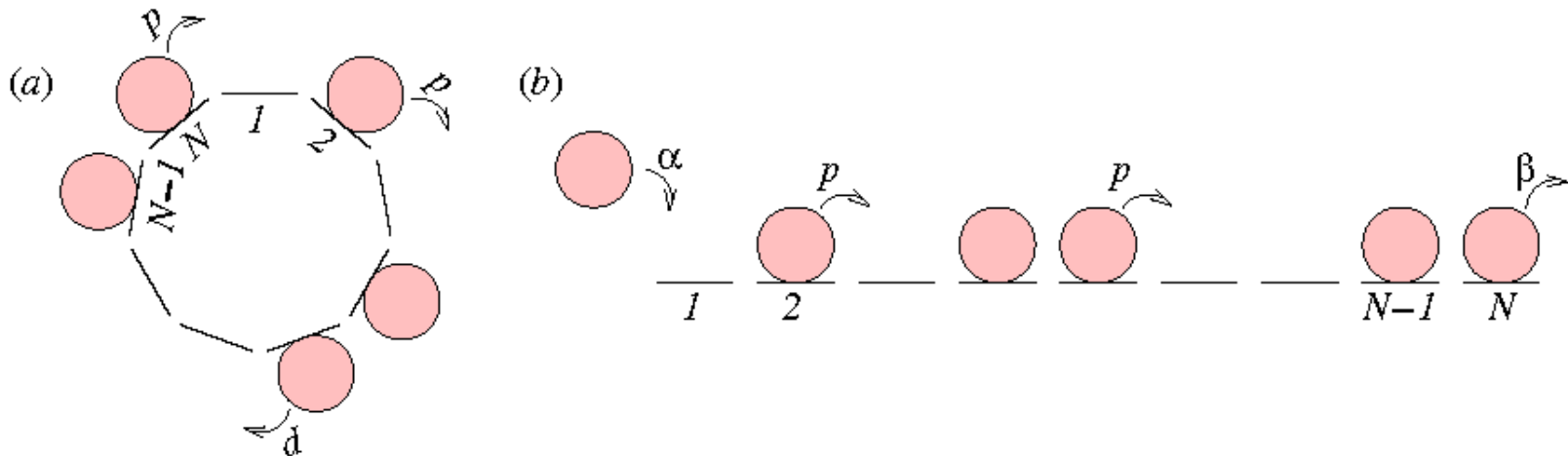
Základní model transportu v 1D

ASYMMETRIC SIMPLE EXCLUSION PROCESS -ASEP

Diskrétní model na 1D mřížce s N uzly

Skok částice s pravděpodobností p vpravo a s pravdep. q vlevo pokud je koncový uzel neobsazený.

Užívány různé hraniční podmínky:

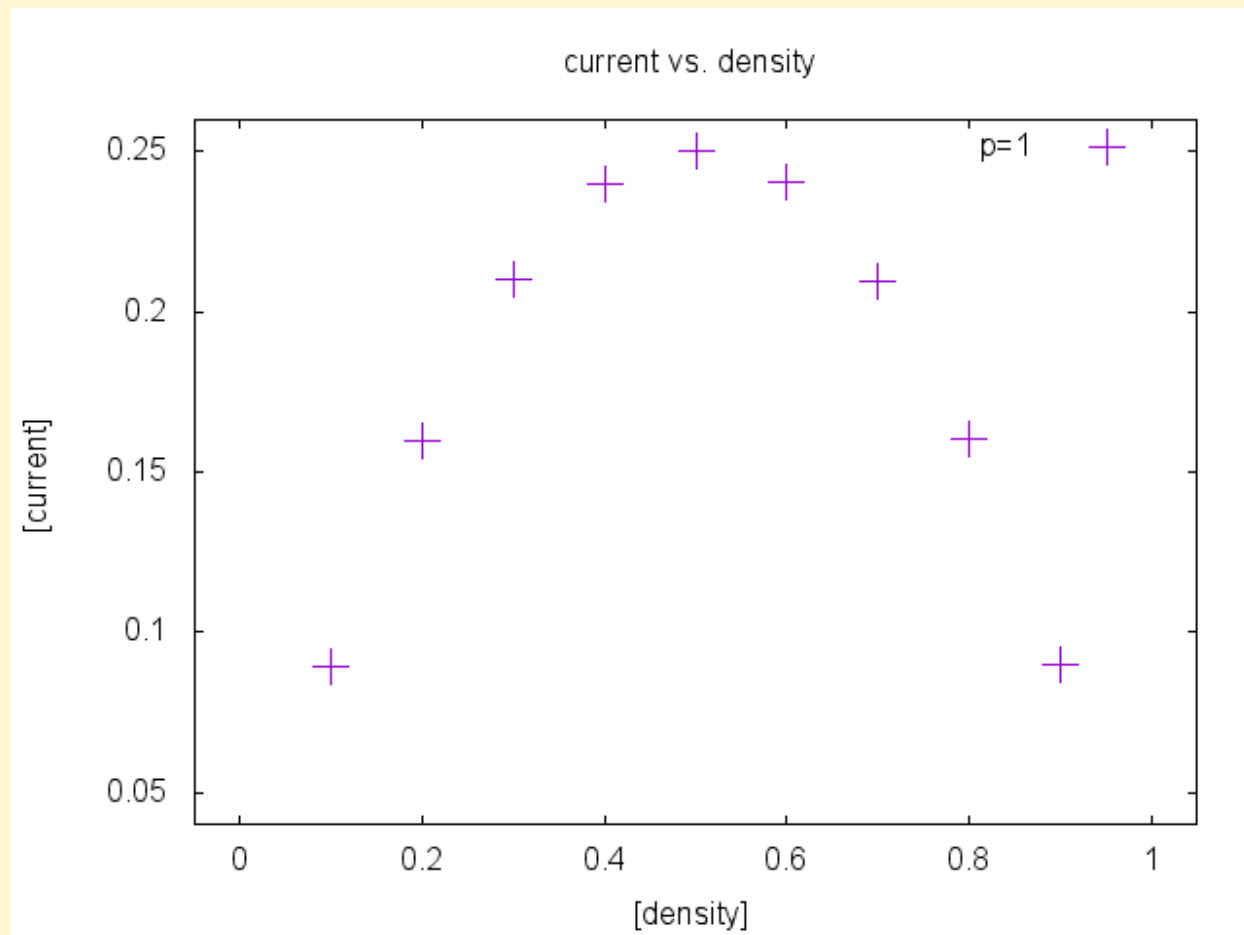


Total Asymmetric exclusion process with (a) periodic and (b) open-boundary conditions. The labels indicate the rates at which the various particle moves can occur.

Totální asymetrický prostý exklusivní proces $q=0$ - TASEP

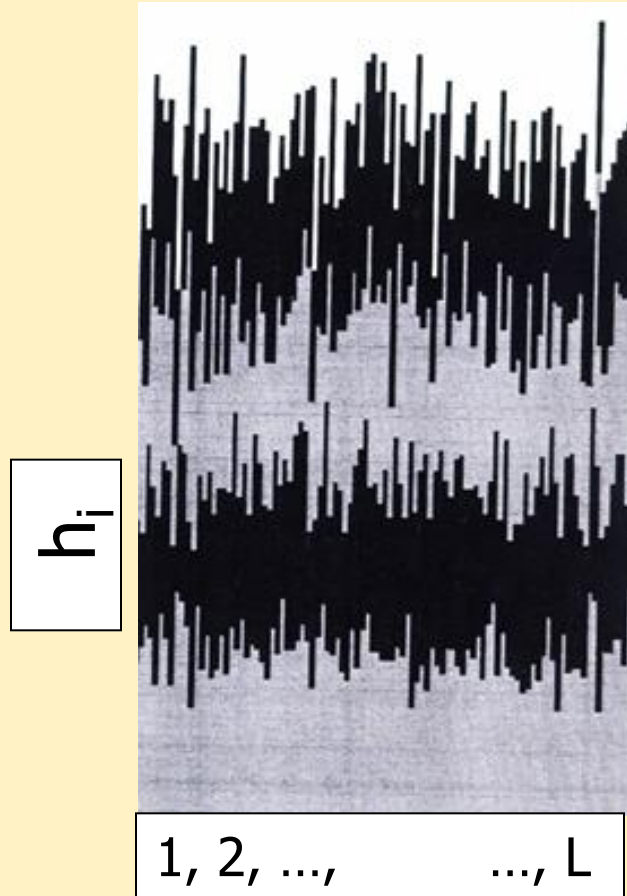
Numerická simulace

Při numerických
simulacích se užívá
náhodný sekvenční
updating.



Cvičení

Začněte náhodnou depozicí



Souřadnice: $h_1, h_2, \dots, h_L$

Celulární automat s pravidlem
evoluce mezi časy t a $t+1$:

Vyber náhodně uzel i a zvýš
jeho výšku: $h_i \rightarrow h_i + 1$.

Počítejte časový vývoj
hrubosti povrchu.

$$W(t) = \left\langle \sqrt{\left(\bar{h}^2 - \overline{h^2} \right)} \right\rangle, \quad \bar{h}^2 = \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L h_k^2, \quad \bar{h} = \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L h_k$$

Náhodná depozice - pokračování

Měřte hrubost pro malou velikost L (např. 100), do času $t=1000$ a střeďte přes více běhů, data vynášejte v log-log měřítku.

Srovnejte středovaná data pro dvě různé velikosti L .

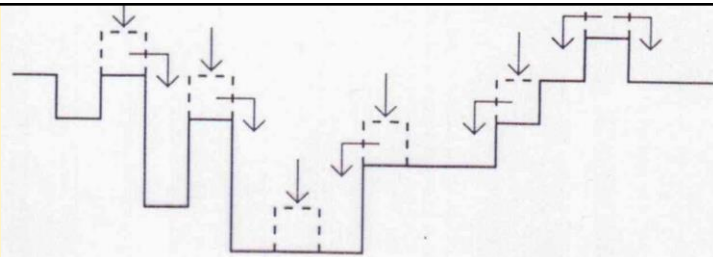
Pro posouzení vynesete i očekávanou závislost $W(t) \sim t^{1/2}$.

Saturace hrubosti

Ukažte, že pro konečný vzorek a růstový model s interakcí dochází k saturaci hrubosti, srovnejte to s náhodou depozicí, viz např. dále.

Saturace hrubosti EW modelu

Počítejte časový vývoj hrubosti povrchu $W(L,t)$ v 1+1 dimenzionálním EW modelu, tj. v modelu, kdy částice po depozici v bodě i relaxuje tak, že je vybrána nejnižší hodnota výšky částice z možností, že částice je v místě i nebo v jeho nejbližších sousedech $(i-1)$, resp. $(i+1)$.



Simulujte pro danou velikost systému L a sledujte, že pro jistém čase t_{sat} , rostoucím s L , se hrubost $W(L,t)$ saturuje ve statistickém smyslu na určité hodnotě W_{sat} .

Saturace pokračování

Ukažte, že dochází k saturaci hrubosti, srovnejte středovaná data s náhodou depozicí.

Poznámky: užívejte periodické hraniční podmínky. Simulujte do času $t = 1000$ nebo více.

Užijte malý systém třeba $L=60$ a střeďte přes dostatečný počet běhů.

Počet potřebných běhů, aby byla saturace jasně vidět, se mění s velikostí L . Pro malý systém je třeba více běhů.

Uvidíte, že počáteční závislost $W(t) \sim \tau^\alpha$ má exponent α menší než $1/2$, ale hodnota není předmětem této úlohy.

Celulární automat .XOR.

$$s_i(t+1) = s_{i-1}(t).XOR.s_{i+1}(t)$$

Sledujte vývoj CA s pravidlem interakce nejbližších sousedu pomocí operace XOR v systému s periodickými podmínkami, měřte počet obsazených buněk jako funkci času. Uvažujte dvě možné počáteční podmínky: i) jedna buňka má hodnotu 1, ostatní mají hodnotu 0, ii) polovina náhodně vybraných buněk bude mít hodnotu 1, ostatní budou mít hodnotu 0. Jaká bude perioda v obou případech?

Tok pro totální asymetrický exklusivní proces (TASEP)

Naprogramujte transportní model s pravidlem TASEP.

Měřte ustálený tok částic v 1D jako funkci jejich hustoty. Střeďte přes dostatečný počet věhů a vykreslete základní diagram.

Návod: Generujte náhodnou polohu a testujete možnost pohybu. Měřte poměr počtu posunutí vs. počet pokusů o posun.