

SIMULACE VE FYZICE MNOHA ČÁSTIC

NTMF021 [12SFMC1 na FJFI], ZS 3/1 Z+Zk

Miroslav Kotrla

Oddělení teorie
kondenzovaných látek
FZÚ AV ČR, Praha 8
kotrla@fzu.cz
externě ÚTF MFF UK

Milan Předota

Ústav fyziky
PřF JU, Č. Budějovice
<http://ufy.prf.jcu.cz/predota>
predota@prf.jcu.cz
externě ÚTF MFF UK

http://kotrla.fzu.cz/?page_id=32

<https://elearning.jcu.cz/course/view.php?id=628>

přihlásit se jako host, hledat kurz obsahující 'NTMF' nebo 'simulace', heslo: simulant

Obsah a cíl

Kurs se věnuje studiu a modelování mnohočásticových systémů.

Cílem je vysvětlit a naučit **aktivně** aplikovat dvě základní metody počítačových simulací: metodu **Monte Carlo** (MC) a **metodu molekulární dynamiky** (MD).

Pro studenty zaměření Mnoho-částicové
systémy v rámci studijního oboru:
**Matematické a počítačové
modelování ve fyzice na MFF**

<http://www.mff.cuni.cz/studium/bcmgr/ok/f1b10.htm>

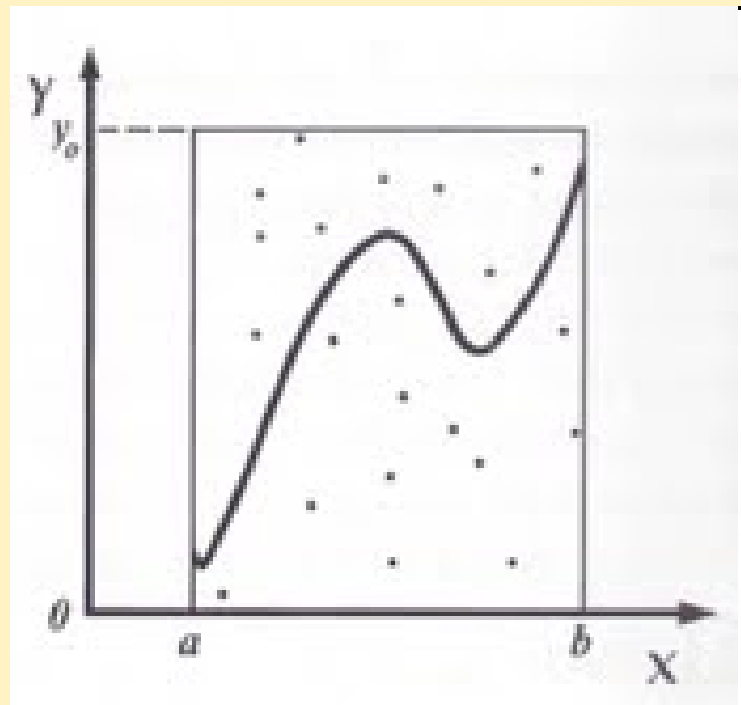
Též pro zájemce z jiných studijních
oborů a jiných škol včetně ČVUT,
FJFI, předmět **SFMC**.

Monte Carlo integrace

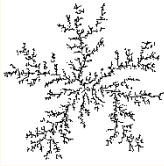
Zadán konečný určitý integrál $I = \int F(x)dx$, ale neznáme analytickou řešení a nelze použít standardní metody numerické integrace – singularita, složité hraniční podmínky.

Metodou MC nespočteme integrál přesně, ale získáme odhad výsledku.

$$I_n = Y(b-a) M_n / n$$



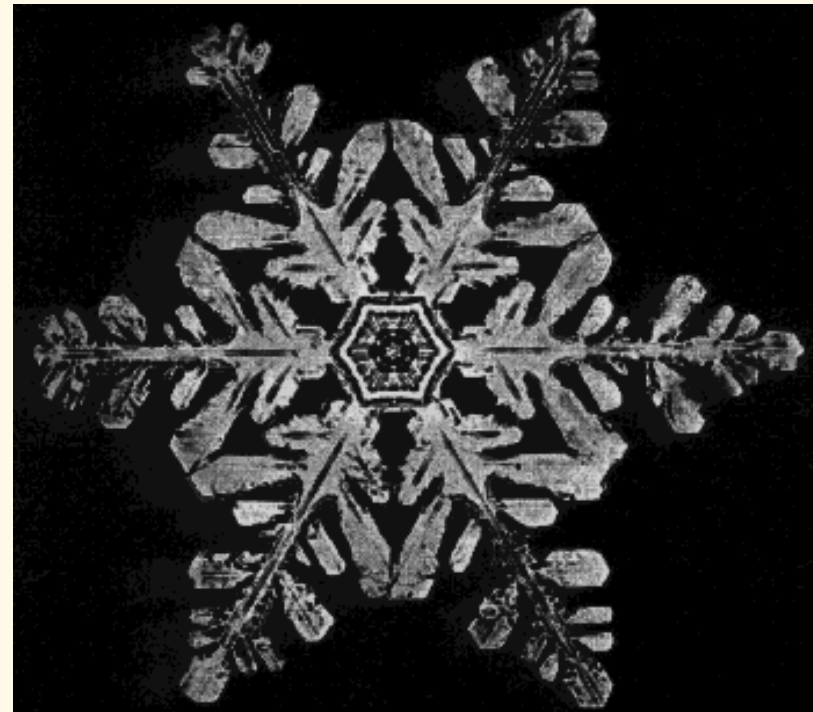
Diffusion limited aggregation (difúzí omezená agregace)



A DLA klastř vzniklý při elektroděpozici
z roztoku sulfátu mědi



jedna z forem sněhové vločky

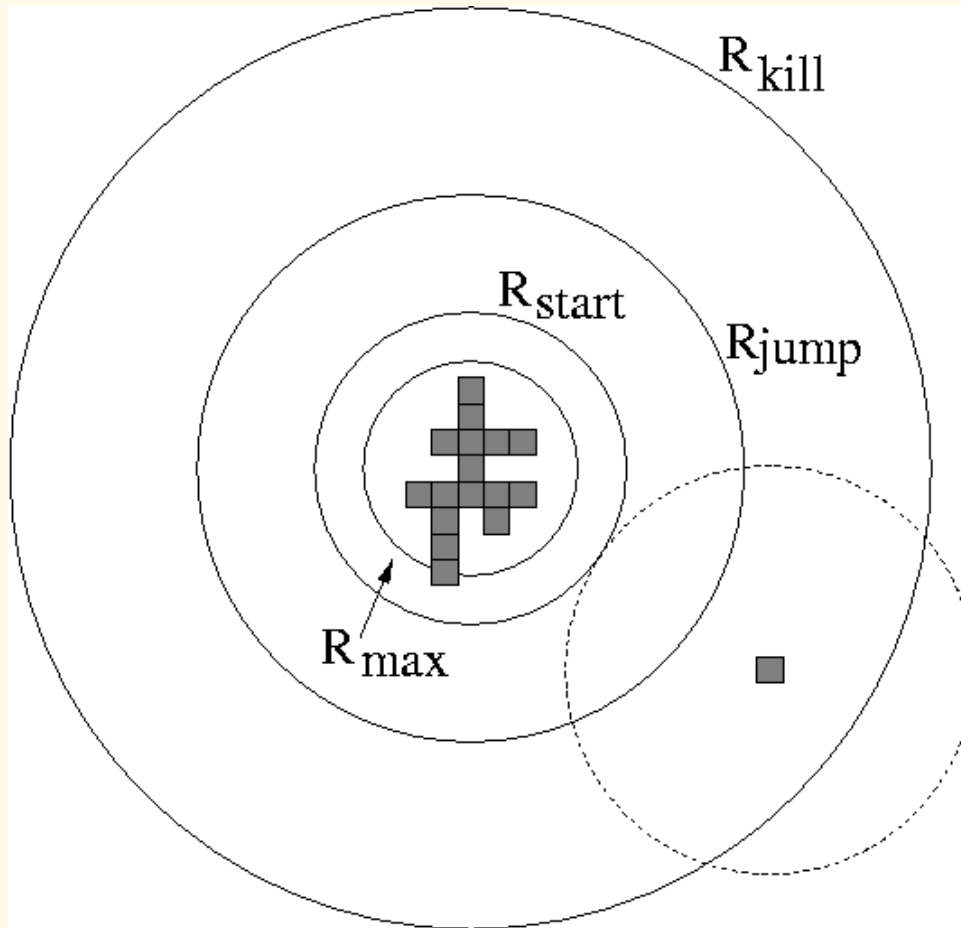
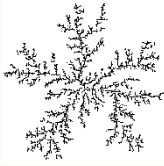


http://en.wikipedia.org/wiki/Diffusion-limited_aggregation

<http://classes.yale.edu/fractals/panorama/physics/dla/DLA.html>

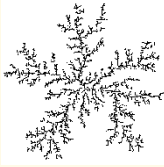
Algoritmus pro DLA)

(difúzí omezená agregace)

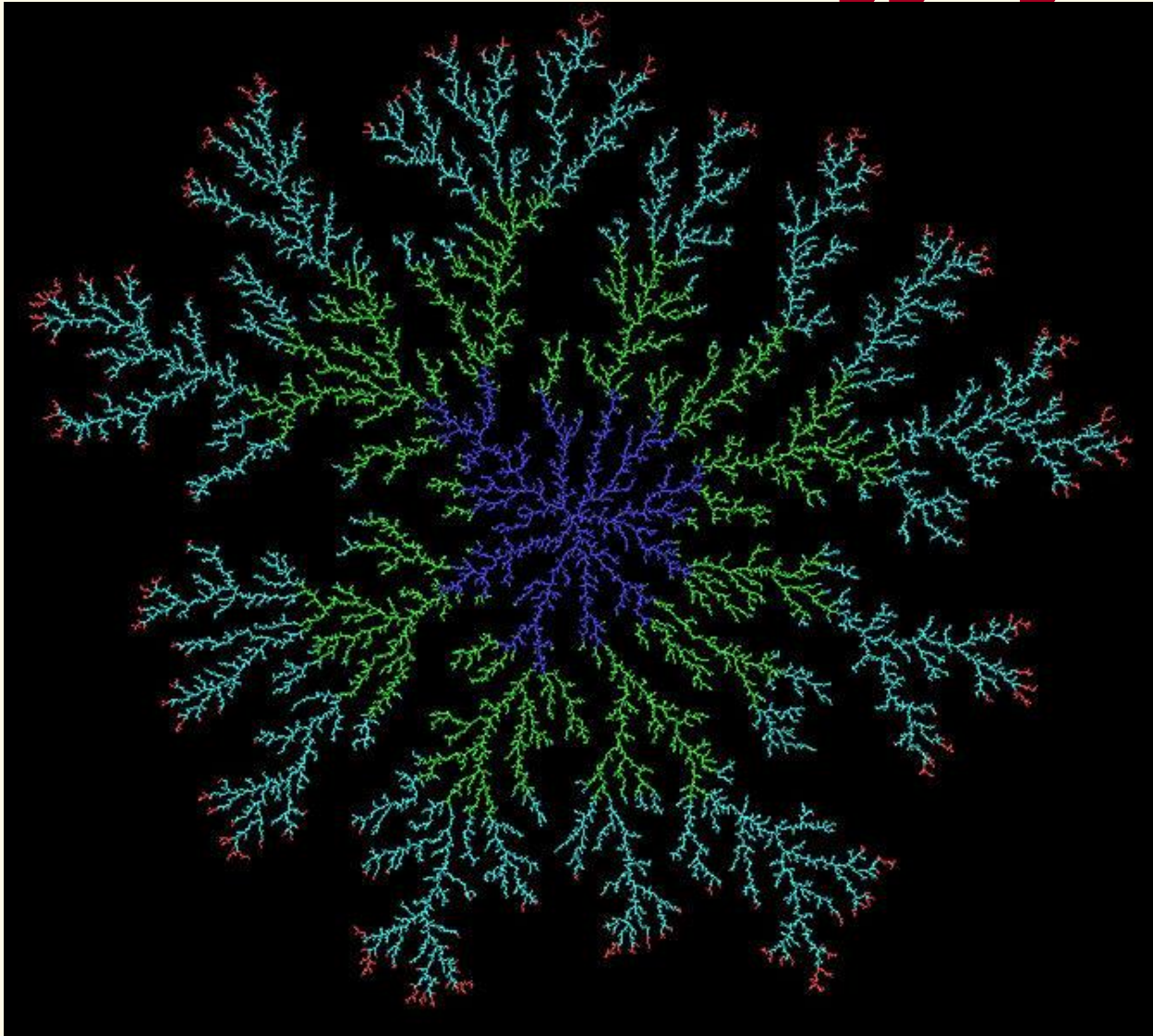


Witten and Sander (1981)

Diffusion Limited Aggregation (DLA)



A DLA consisting about 33,000 particles obtained by allowing random walkers to adhere to a seed at the center. Different colors indicate different arrival time of the random walkers.



http://en.wikipedia.org/wiki/File:Of7_p0001_15h.jpg

OPTIMALIZAČNÍ ÚLOHY

Problém optimalizace v různých oblastech:

- minimalizace času, materiálu, ...
- maximalizace výkonu, zisku, ...
- optimalizace umístění komponent, propojení, ...

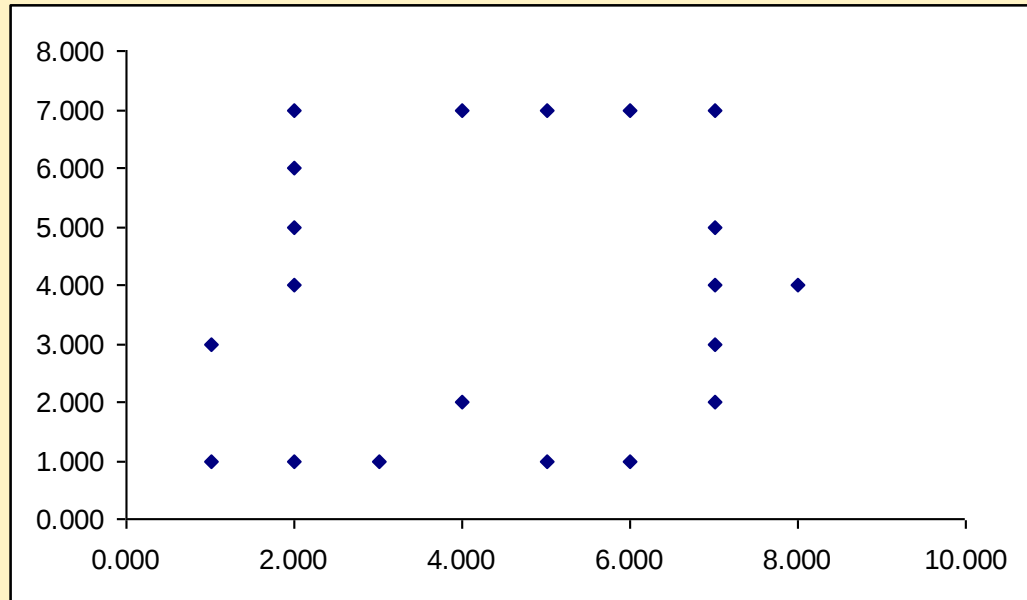
Modelový příklad problém obchodního cestujícího:

- Je dána mapa obsahující N měst.
- Města jsou spojena silnicí o známé délce.
- Pro každá dvě města existuje alespoň jedna cesta po silnici, která je spojuje; těchto cest může být více.

ÚKOL: Najděte co **nejkratší** cestu procházející podle daných podmínek.

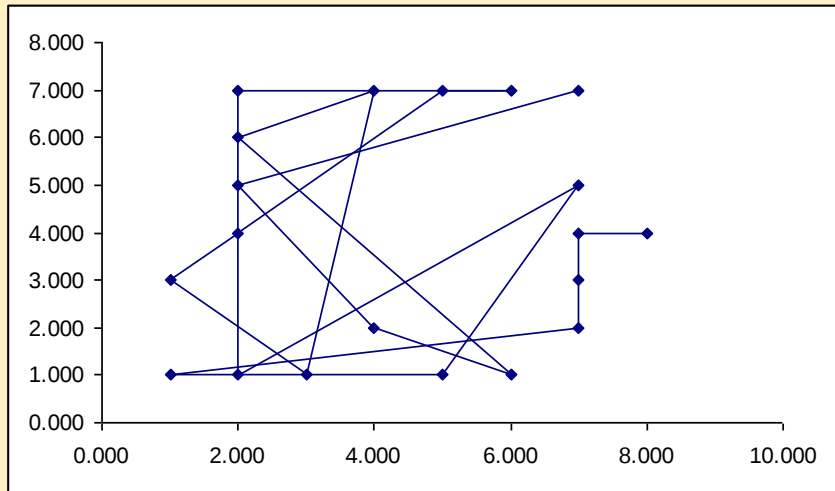
problém obchodního cestujícího

konfigurace měst:

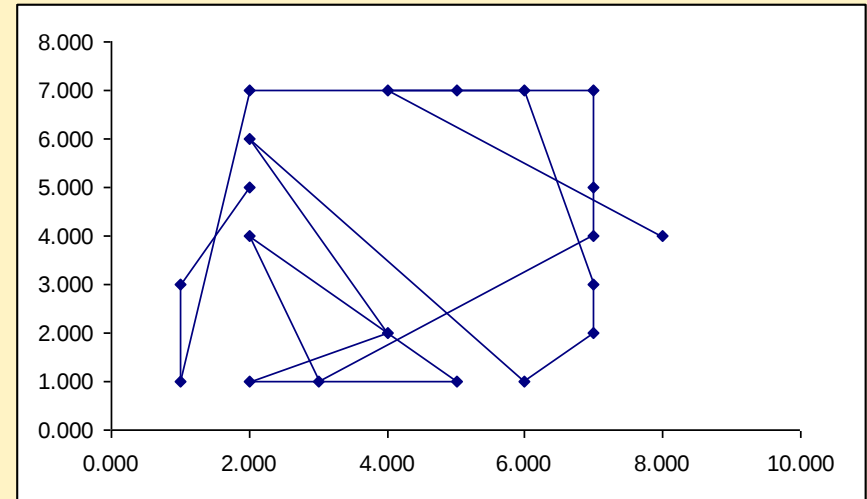


- **ÚKOL:** Najděte co **nejkratší uzavřenou** cestu procházející **alespoň jednou každým městem**.

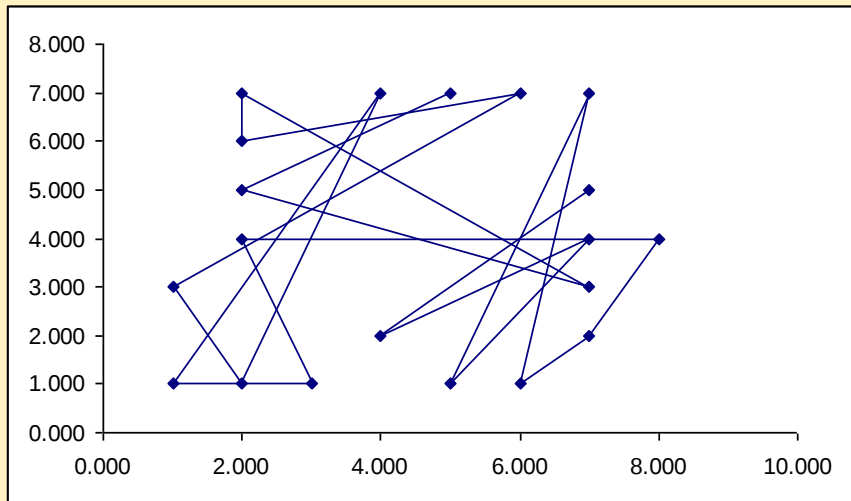
Příklad řešení – M. Setvín



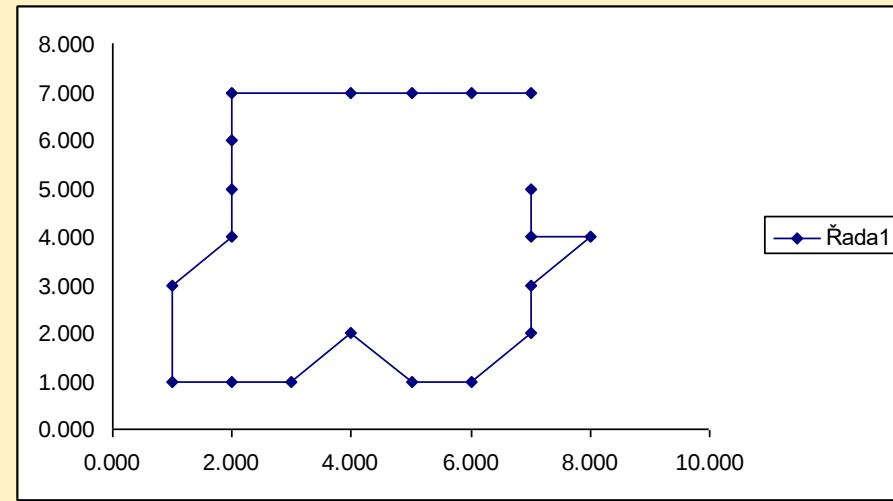
a)



b)



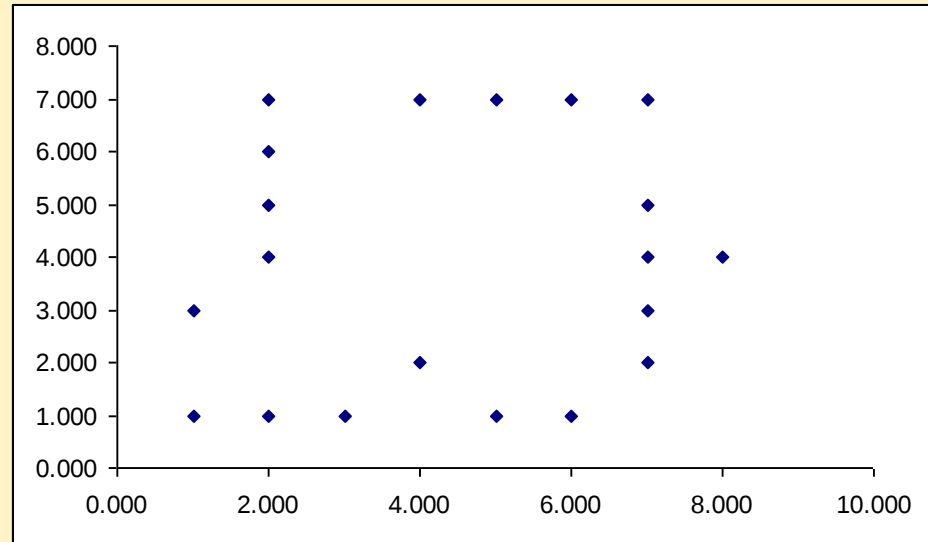
c)



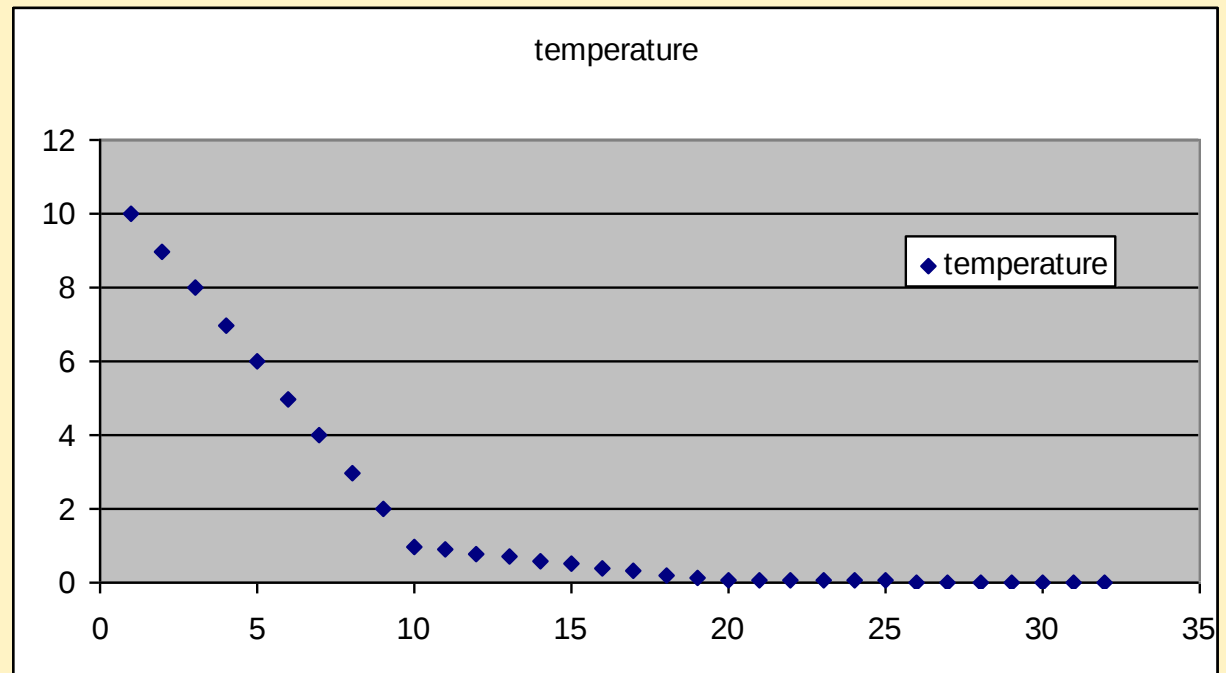
d)

Příklad řešení – M. Setvín

konfigurace měst

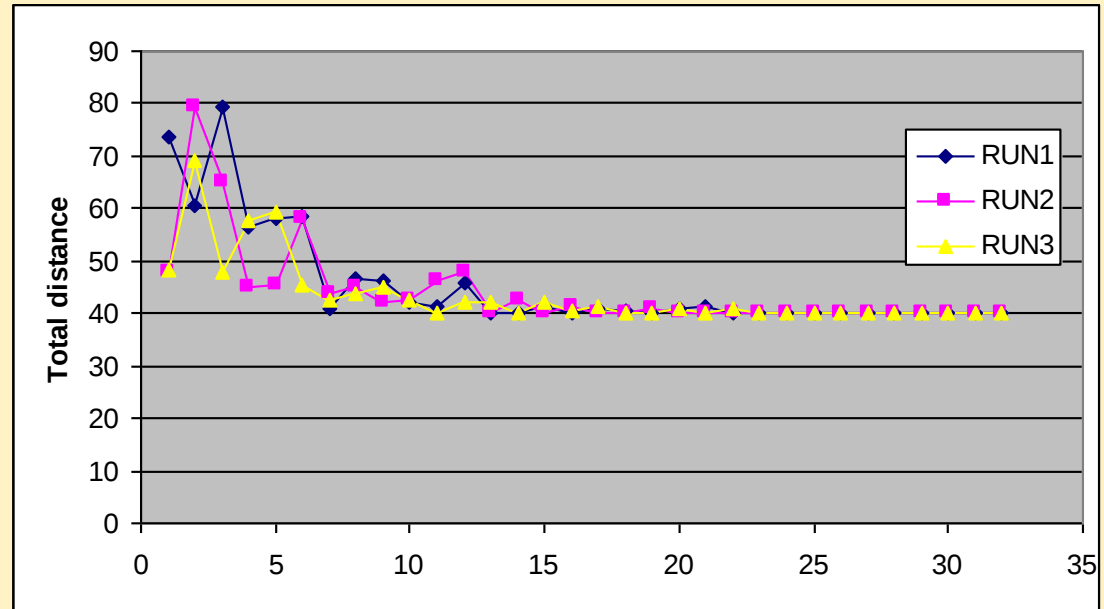


ochlazování

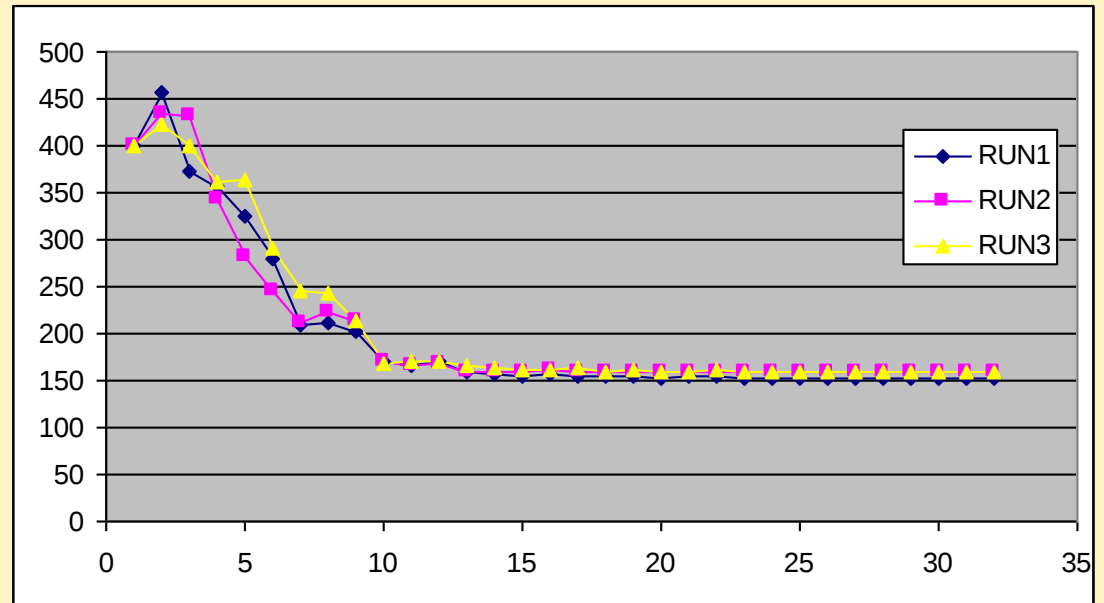


Příklad řešení – M. Setvín

10 měst
1000 kroků
v každém cyklu



50 měst
10000 kroků
v každém cyklu



Kde mne najít?



V budově Ústavu
teorie informace
a automatizace
(UTIA),
**Pod Vodárenskou
věží 4, Praha 8,**
křídlo vpravo,
místnost 435,
doprava: např.
metrem do
stanice Ládví

též na stránce

<http://kotrla.fzu.cz/>

Obsah přednášky – NTMF021

- Úvod+ náhodné procházky, ...
- Metoda Monte Carlo (MC): výpočet určitých integrálů, problém perkolace, ...
- Aplikace MC na mřížové modely (Ising)
- MC simulace jednoduchých modelů kapalin
- Základy metody MD: integrátory (Verletův algoritmus), termostatování etc.
- Realizace MD
- Měření termodynamických a strukturních veličin
- Simulace v různých souborech

Pro zápočet

Účast na cvičeních

Úspěšné vyřešení započtových úloh

MC úlohy budou zadány postupně na přednáškách a na [www stránce http://kotrla.fzu.cz/?page_id=76](http://kotrla.fzu.cz/?page_id=76)

MD úlohy budou zadány na přednáškách doc. M. Předoty

Pro zkoušku

Dopředu zkušební otázky

Dvě otázky

- ✓ jedna z okruhu MC simulací
- ✓ jedna z okruhu MD simulací

Výpočetní možnosti

i) Váš notebook/PC

ii) externí zdroje

Metacentrum

Internetové připojení eduroam ?, !

Metacentrum

<https://metavo.metacentrum.cz/>

MetaVO je virtuální organizace pro **zaměstnance a studenty akademických a výzkumných institucí v ČR.**

Uživatelé registrovaní v MetaVO mají možnost bezplatného využití výpočetní a úložné kapacity a řady aplikačních programů.

První informace

<https://cs.wikipedia.org/wiki/Metacentrum#Historie>

Připomínka historie počítačů

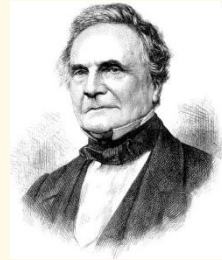
- Charles Babbage (1791-1871)

nápad sestavit programovatelný stroj

Analytical Engine 1837



1822 difference engine



- ENIAC 1942-1947, University Pennsylvania

18 000 elektronek !!!

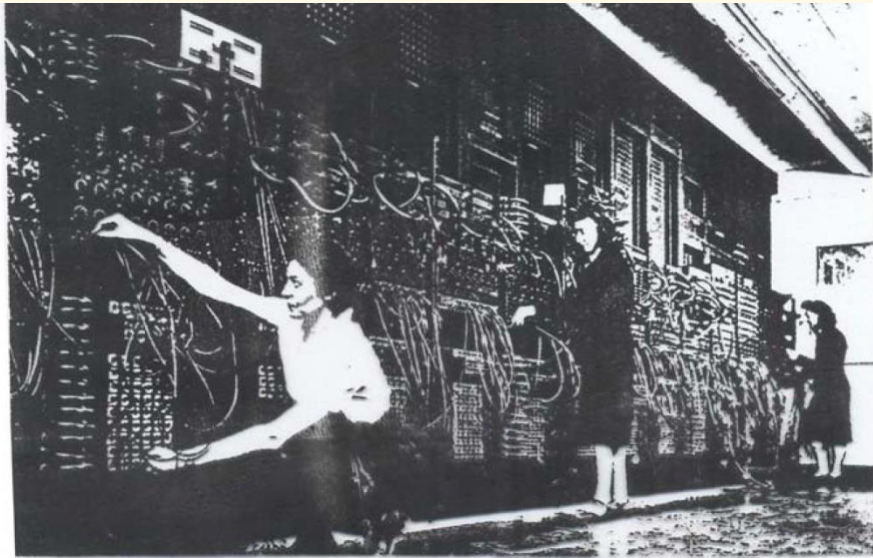


Fig. 1. Programming panels and cables of the Eniac. (Courtesy of N. Metropolis.)

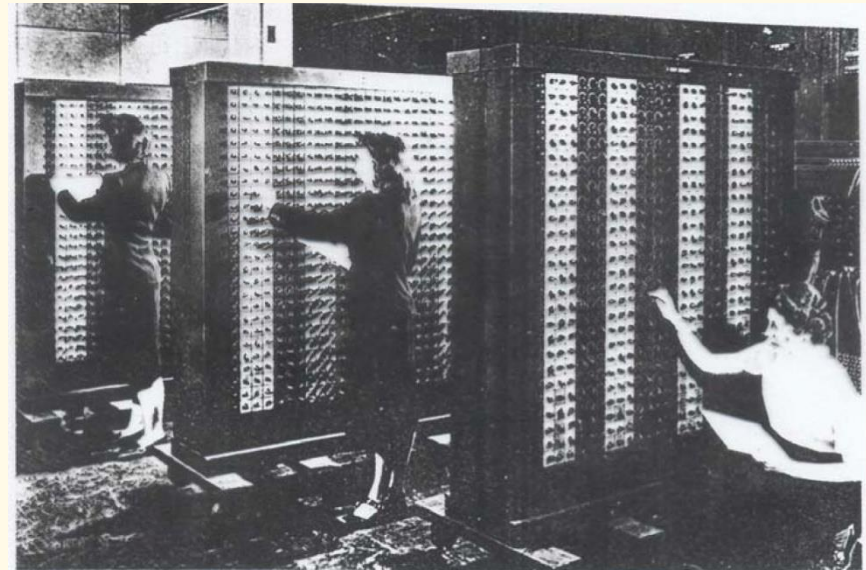


Fig. 2. Function tables of the Eniac. (Courtesy of N. Metropolis.)

více např. na <http://accad.osu.edu/~waynec/history/timeline.html>

Vývoj výkonnosti počítačů

Evolution of Computer Power/Cost

MIPS per \$1000 (1997 Dollars)

Million

1000

Electronic Numerical Integrator and Computer - ENIAC (US army)

elektromechanické stroje
např. International Business
Machines (IBM)

1
Million

1
Billion

1900

1920

1940

1960

1980

2000

2020

Year

Brain Power Equivalent per \$1000 of Computer

Human

Monkey

Mouse

Lizard

Spider

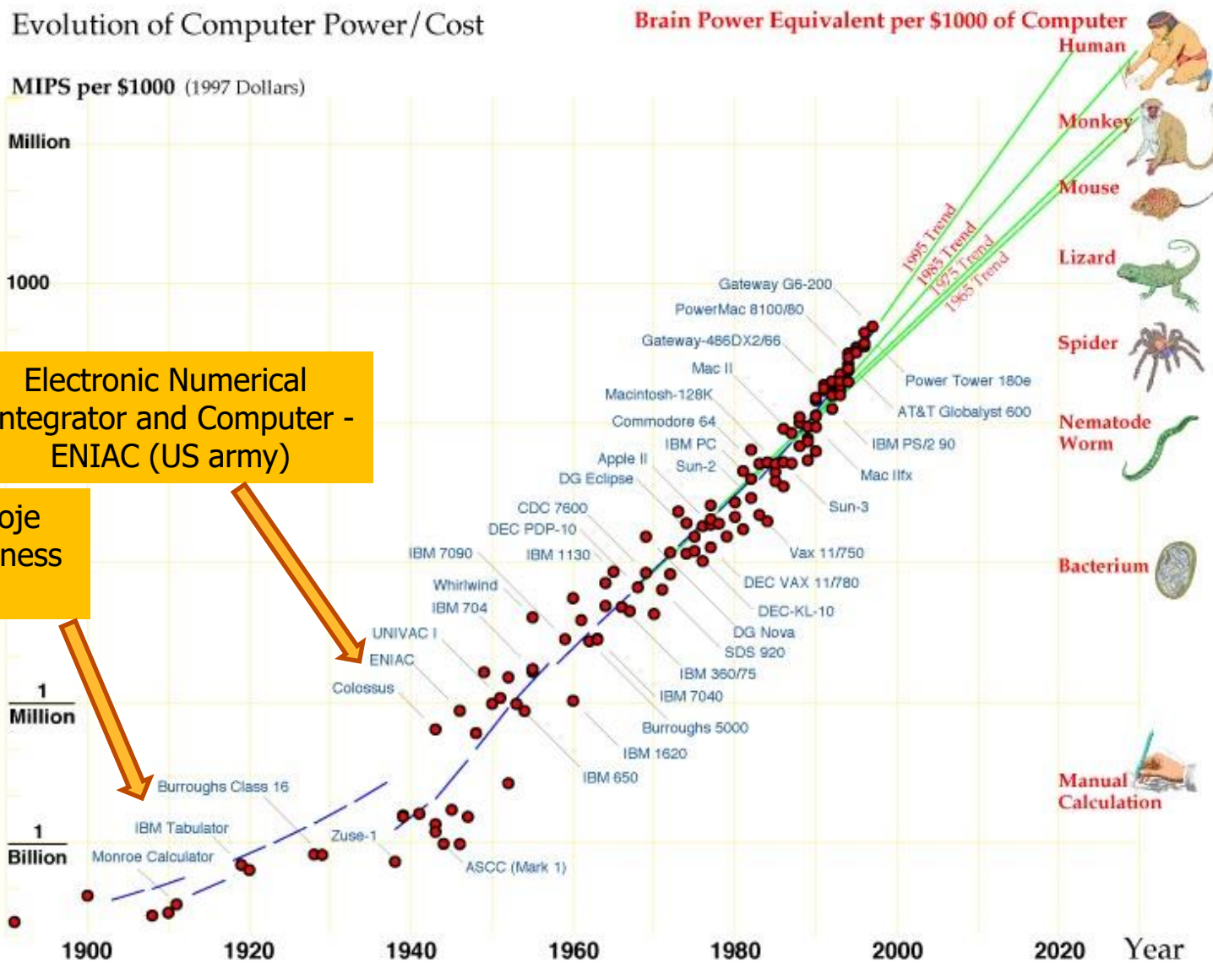
Nematode

Worm

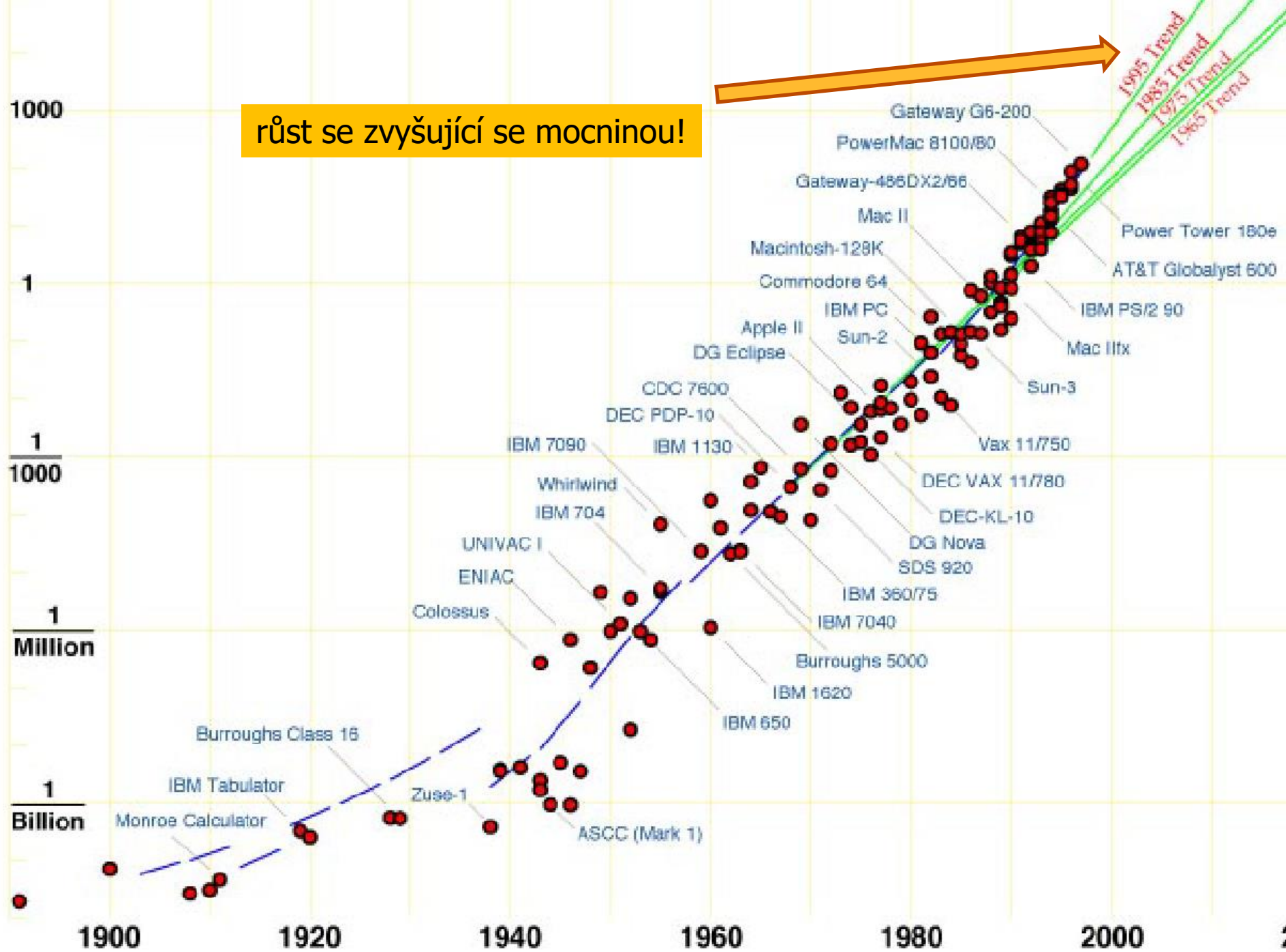
Bacterium

Manual

Calculation



růst se zvyšující se mocninou!



Srovnání výkonnosti počítače v navigačním modulu Apollo, iPhone 5 a iPhone 6,7

<http://observationdeck.io9.com/comparison-of-lunar-module-navigation-computer-with-an-880735459>

	Apollo Guidance Computer (1969)	iPhone 5 (2012)
Speed	1.024 megahertz	1.3 gigahertz (1270x faster)
Processing Memory (RAM)	4 kilobytes	1 gigabyte (250,000x more)
Storage	32 kilobytes	64 gigabytes (2,000,000x more)
Weight	70 lbs (32 kg)	3.95 oz. (112 g) (286x lighter)

iPhone 6/7
(2014/2016)

1.4 GHz/Quad-core

1 Gbit/2 Gbit

128 Gbit/256 Gbit

129 g /138 g

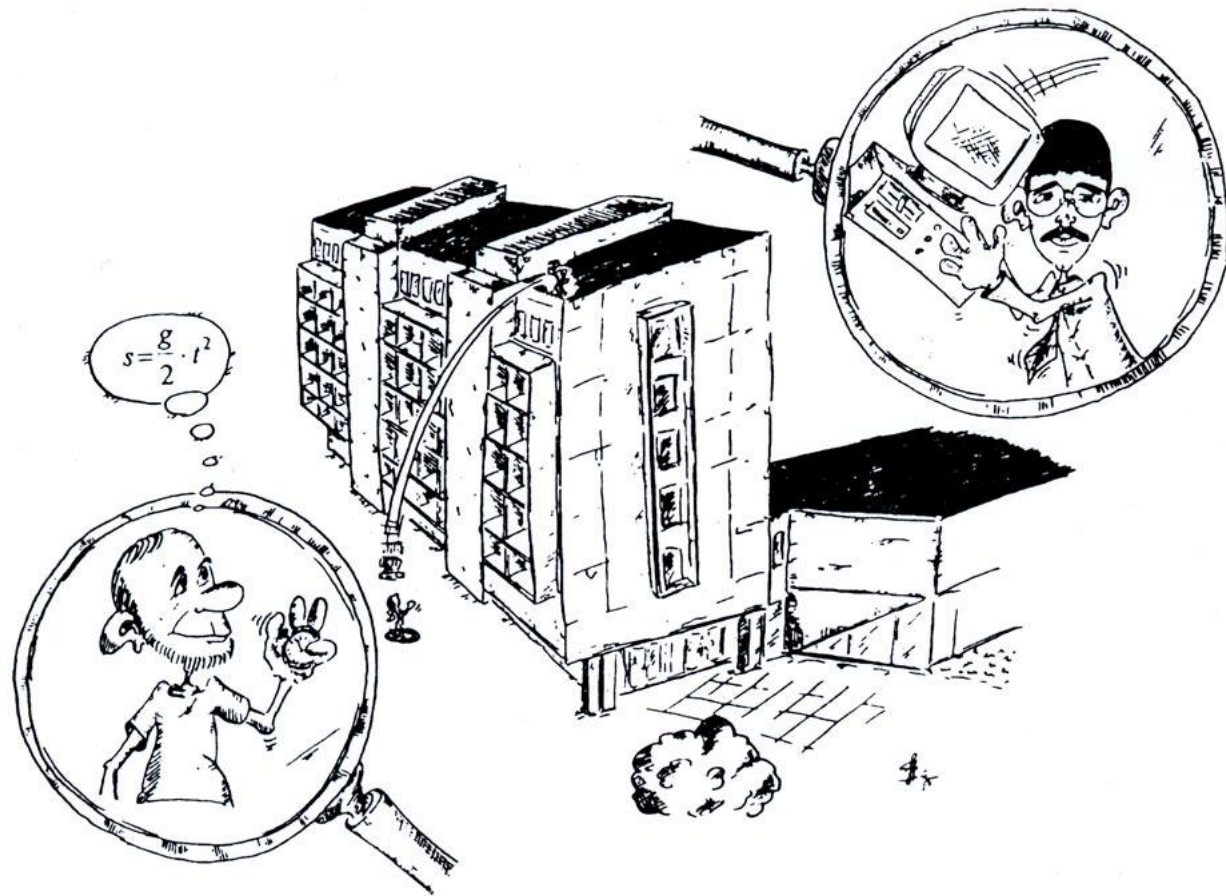
Úloha počítačových simulací



Úloha počítačových simulací



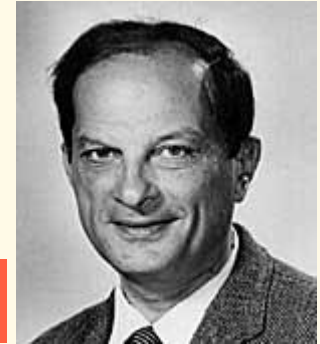
Experiment s počítačem



With this original answer to the question “How to measure the height of the building of the Institut für Physik in Chemnitz with a computer and a stop watch only?” the editors give a peculiar interpretation of the topic “Physics with a computer”.

Experiment modelovaný na počítači

Stanisław Ulam (1909-1984)



Projekt Manhattan - jaderná puma a složitý pasiáns



program pro
simulaci hry

**Počítač může být využit u statistických
problémů s neznámým řešením.**

Popis ***N***-částicového systému

STAV A

Spojité modely

$$A = \left(r^N, p^N \right)$$

Diskrétní modely

$$A = \left\{ \vec{s}_1, \vec{s}_2, \dots, \vec{s}_N \right\}$$

Mikroskopické simulace a statistická mechanika

System je určen hamiltoniánem $H(A)$ pro stavy A .

statistická rozdělení NVT, NPT, μ VT

zde kanonické rozdělení

$$\pi(A) = \exp[-\beta H(A)] / Z, \quad \text{partiční suma } Z = \int \pi(A) DA$$

střední hodnota $\langle X \rangle = \int X(A) \pi(A) DA$

volná energie $F = - \frac{1}{\beta} \log[Z]$

suma resp.
integrace

termodynamické relace jako derivace volné energie

Nevýhody a omezení

- **vliv velikosti systému**
- **vliv okrajových podmínek**
- **omezený čas simulace**
- **metodologické problémy**

Klasifikace simulací



Molekulární dynamika (MD)

Modeluje realistický časový vývoj systému.

Dynamika diktována fyzikálními zákony

Střední hodnoty veličin jsou **určeny časovým středováním** konfigurací.

Deterministická metoda

Vhodná pro rovnovážné i nerovnovážné simulace

Použitelná pouze pro spojitě systémy, nevhodná pro nespojitě potenciály

$$\frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \frac{\mathbf{F}_i(\mathbf{r}^N)}{m_i}$$

Monte Carlo (MC)

Střední hodnoty veličin jsou **určeny souborovým středováním** (NVT, NPT, μ VT) posloupnosti konfigurací generovaných náhodně s fyzikálně určenou pravděpodobností za použití generátoru (pseudo)náhodných čísel.

Stochastická metoda

Primárně určena pro rovnovážné simulace

Posloupnost generovaných konfigurací se obecně jen podobá časovému vývoji nebo mu vůbec neodpovídá.

Vhodná pro spojité i diskrétní systémy, spojité i nespojité potenciály

$$p(\mathbf{r}^N) = \exp[-\beta U(\mathbf{r}^N)]; \beta = \frac{1}{kT}$$

Monte Carlo

Simulační metoda založená na užití stochastických procesů a generace náhodných čísel.

Typy MC simulací

- a) **Geometrické MC** (DLA, náhodné procházky, perkolace, celulární automaty, ...)
- b) **MC integrace**
- c) Termodynamické MC
- d) Modelování vývoje na strukturální úrovni
- e) Výpočet kinetických koeficientů (KMC)
- f) etc.

Úroveň aproximací

spojitý model
„skutečný“ potenciál

ab initio MD

spojitý model
aproximativní semiempirický
nebo modelový potenciál

MD & MC

mřížový model
pevné polohy a
hamiltonián s
několika málo
parametry

MC

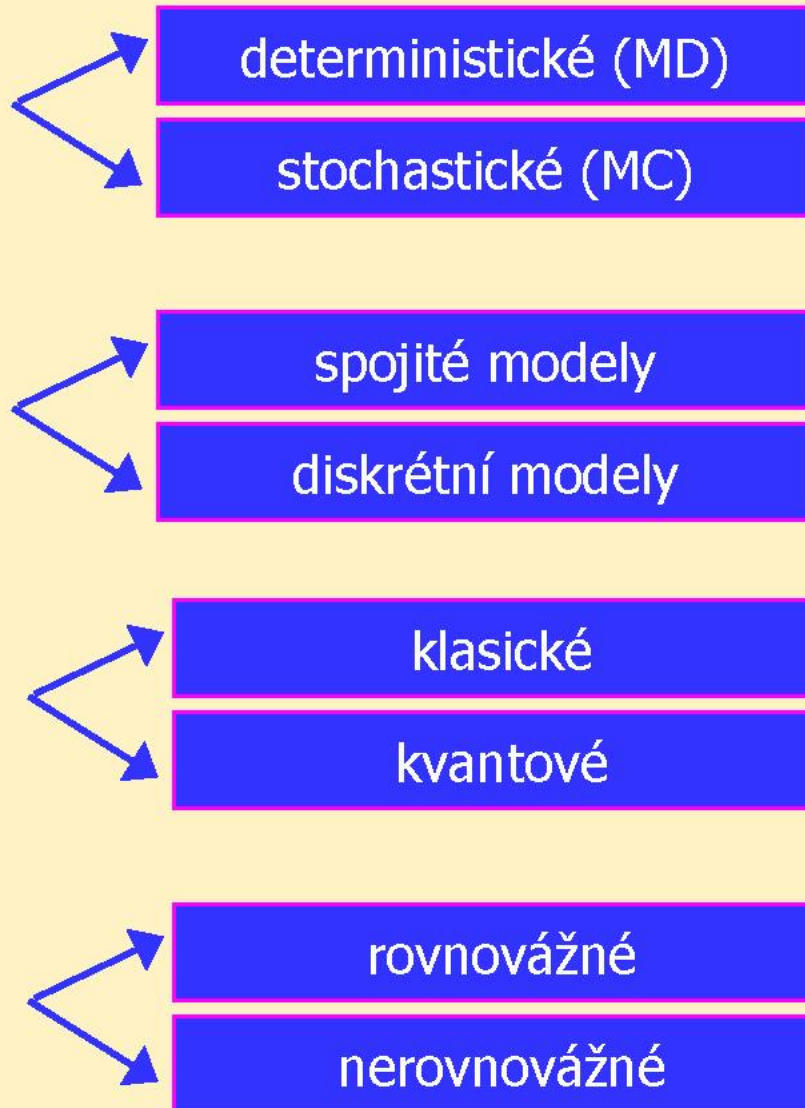
Srovnání MC a MD

MC	MD
stochastická metoda	deterministická metoda
převážně statické problémy	dynamická metoda
mříž i spojitý prostor	jen spojitý prostor
aproximativní "fitování"	ab initio možné
relativně jednoduché	náročnější

omezení

MC	MD
CPU čas	CPU čas + paměť
RNG	volba potenciálu
konečný objem	konečný objem + krátké časy

Klasifikace simulací



Fázové uspořádání

vývoj domén při ochlazení pod kritickou teplotu

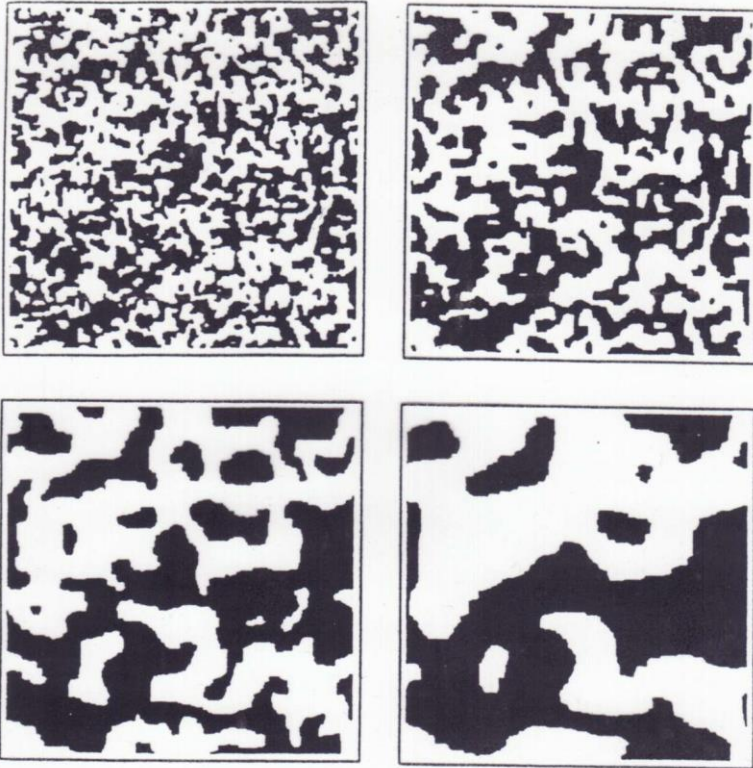


Figure 2. Monte Carlo simulation of domain growth in the $d = 2$ Ising model at $T = 0$ (taken from Kissner [8]). The system size is 256×256 , and the snapshots correspond to 5, 15, 60 and 200 Monte Carlo steps per spin after a quench from $T = \infty$.

Soutředíme se na
závislost velikosti
domény L na čase

$$L(t) = ?$$

Kvantové úlohy

hamiltonián H

+

Hilbertův prostor
stavů

□ $T = 0$

Schroedingerova rovnice -> vlastní energie, vlastní stavy
střední hodnoty

$$H|\Psi\rangle = E |\Psi\rangle$$

$$\langle X \rangle = \langle \Psi | X | \Psi \rangle$$

□ $T > 0$

statistický operátor
stavová suma

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} \exp(-H / k_B T)$$

$$Z = \text{Tr} \exp(-H / k_B T)$$

Kvantové úlohy – MC/MD

hamiltonián H

+

Hilbertův prostor
stavů

□ $T = 0$

Schroedingerova rovnice -> vlastní energie, vlastní stavy
střední hodnoty

$$H|\Psi\rangle = E |\Psi\rangle$$

$$\langle X \rangle = \langle \Psi | X | \Psi \rangle$$

□ $T > 0$

statistický operátor
stavová suma

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} \exp(-H / k_B T)$$

$$Z = \text{Tr} \exp(-H / k_B T)$$

střední hodnota

$$\langle X \rangle = \text{Tr}(X \rho)$$

MC - výpočet střední hodnoty středováním
MD - tzv. funkcionál hustoty (LS)

Náročnost simulací

	klasické	kvantové
rovnovážné	přímočaré	obtížné
nerovnovážné	možné	velmi těžké

škály

	MC	MD
klasická static.	$N=10^6$ i víc	--
klasická dynam.	$N=10^5 - 10^6$ reálný čas	$N=10^4 - 10^6$, 10 ns
kvantová		$N=10^2$, ps

record MC pro Isingův model 1996

$4800^3 \sim 10^{11}$ uzlových bodů

Milníky v metodologii numerických simulací

MC		MD
1953	Metropolisův algoritmus	
1955		Fermi-Pasta-Ulam
1957	Lennard-Johnesova kapalina	
1963		jednoduché kapaliny se spojitým potenciálem.
1966	Coulombické interakce	
1967		Verletův algoritmus
1968	NPT soubor pro tuhé koule	
1969	grand kanonický soubor	
1970	GFMC	

Milníky v metodologii numerických simulací

MC		MD
1972	volná energie – ambrela sampling	NEMD
1973	dynamické jevy	
1976	QMC $T > 0$	
1980		konstantní tlak.
1984		Nosého termostat
1985		ab initio metoda Cara-Parrineliho
1987	Swendsenův-Wangův algoritmus	

Nebezpečný duch simulací



doporučená literatura

- I. Nezbeda, J. Kolafa, M. Kotrla,
Úvod do počítačových simulací:
Metody Monte Carlo a molekulární dynamiky,
Karolinum 2003.
- D. Landau a K. Binder,
A Guide to Monte Carlo Simulations
in Statistical Physics,
Cambridge University Press 2002.
- M.E.J. Newman, G.T. Barkema,
Monte Carlo Methods in Statistical Physics,
Oxford University Press, 1999.
- D. Frenkel, B. Smit,
• Understanding molecular simulation,
Academic Press, San Diego, USA 2002.

MC úlohy

a) Geometrické MC

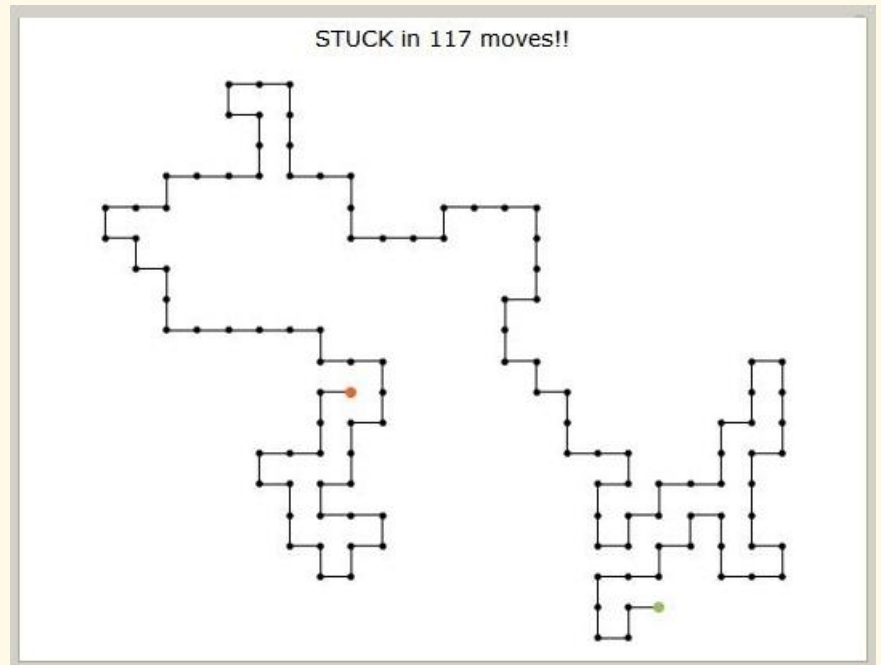
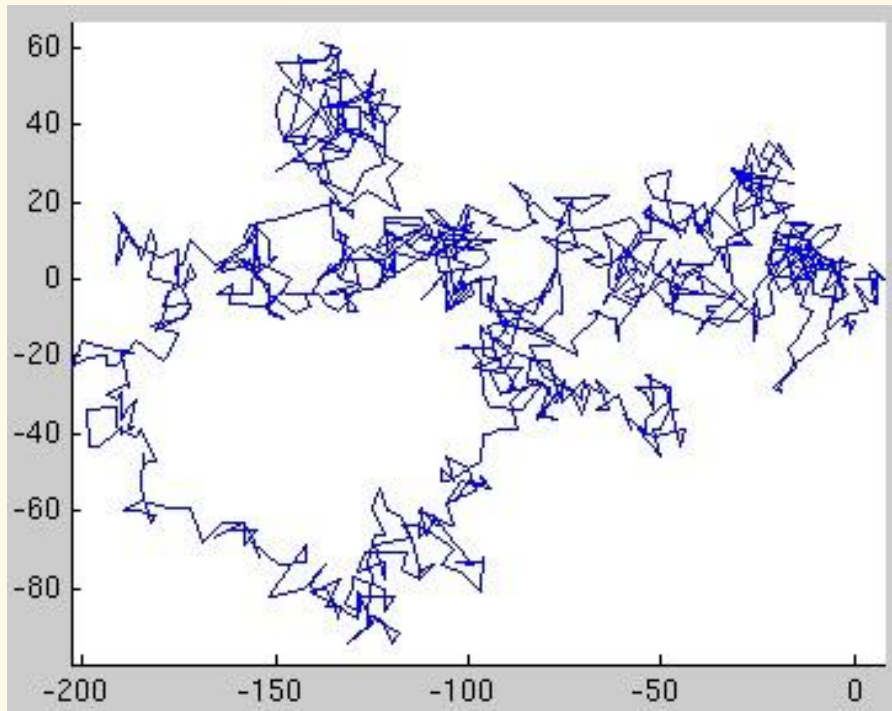
- srovnání náhodných procházek – exponenty
- uzlová perkolace – práh perkolace
- uzlová perkolace – rozdělení klastrů
- růst sněhové vločky – fraktální dimenze (LS)

b) Termodynamické MC

- 2D Isingův model – magnetizace vs. T
- 3D Isingův model – hystereze
- Wolfův algoritmus
- tekutiny s různými potenciály: LJ, tuhé koule etc.

Náhodné procházky

- prostá
- bez návratů
- samovyhýbající se (self-avoiding walk-SAW)



úloha o náhodných procházkách

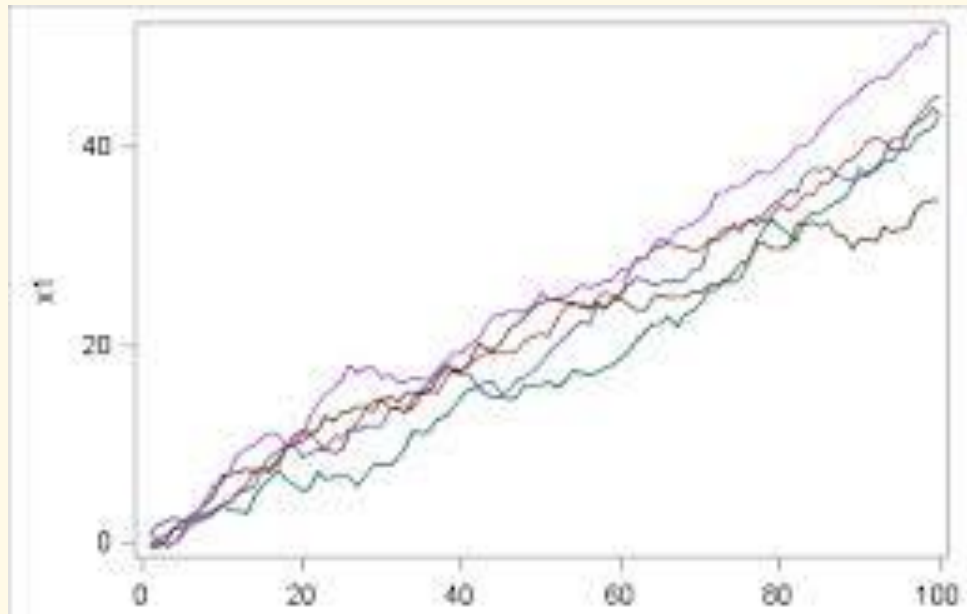
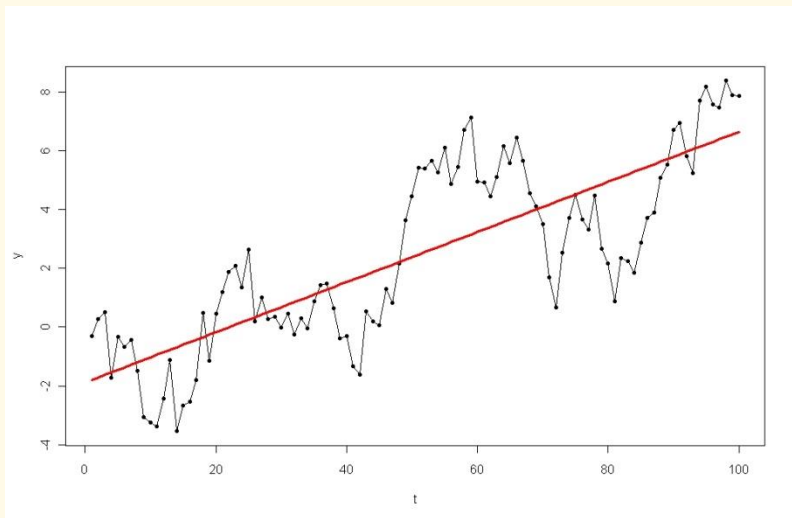
I-4 Srovnání typů náhodných procházek v 2D

Simulujte náhodnou procházku na dvou-dimenzionální čtvercové mřížce. Určete závislost vzdálenosti počátečního a koncového bodu na počtu kroků pro různé typy procházek: prostá náhodná procházka, procházka bez okamžitých návratů, procházka bez protínání. (V posledním případě se lze omezit na menší počet kroků.)

Určete exponenty pro jednotlivé typy procházek, udejte chyby získaných exponentů.

Náhodné procházky

Měříme vzdálenost R od počátku v závislost na čase a určíme příslušnou funkci $R(t)$.

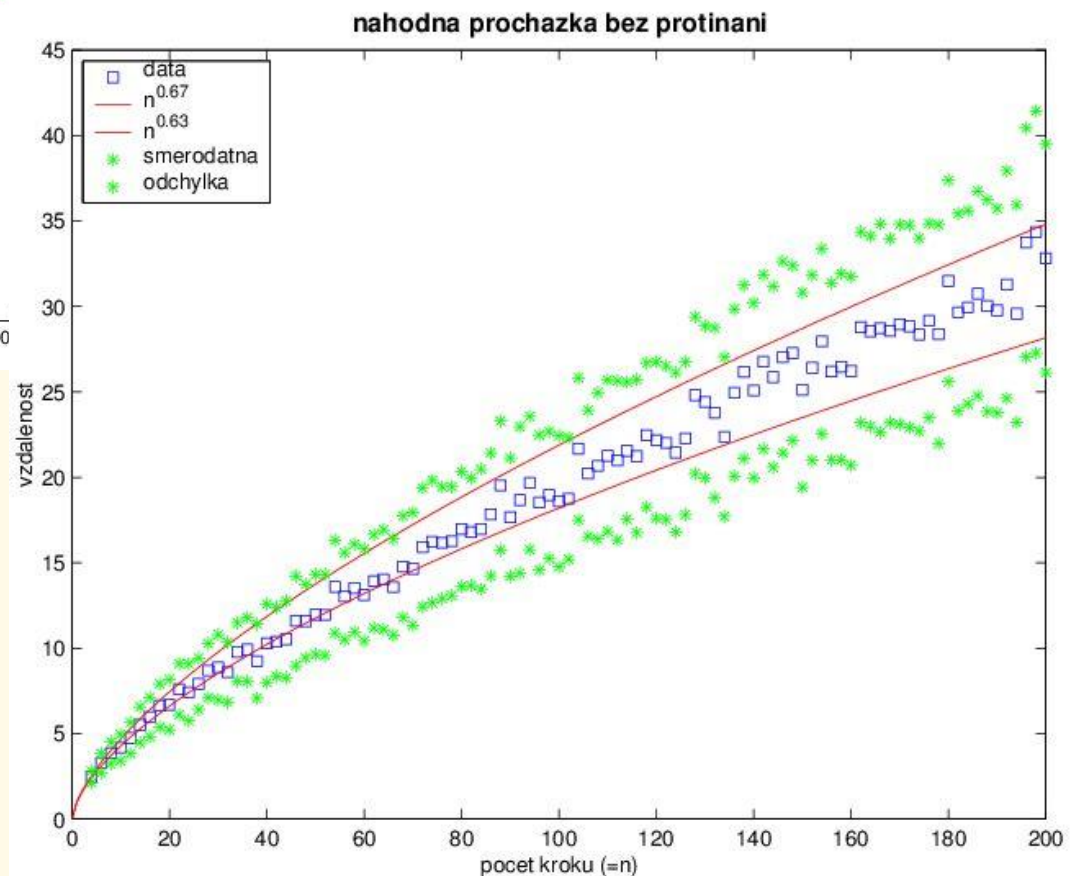
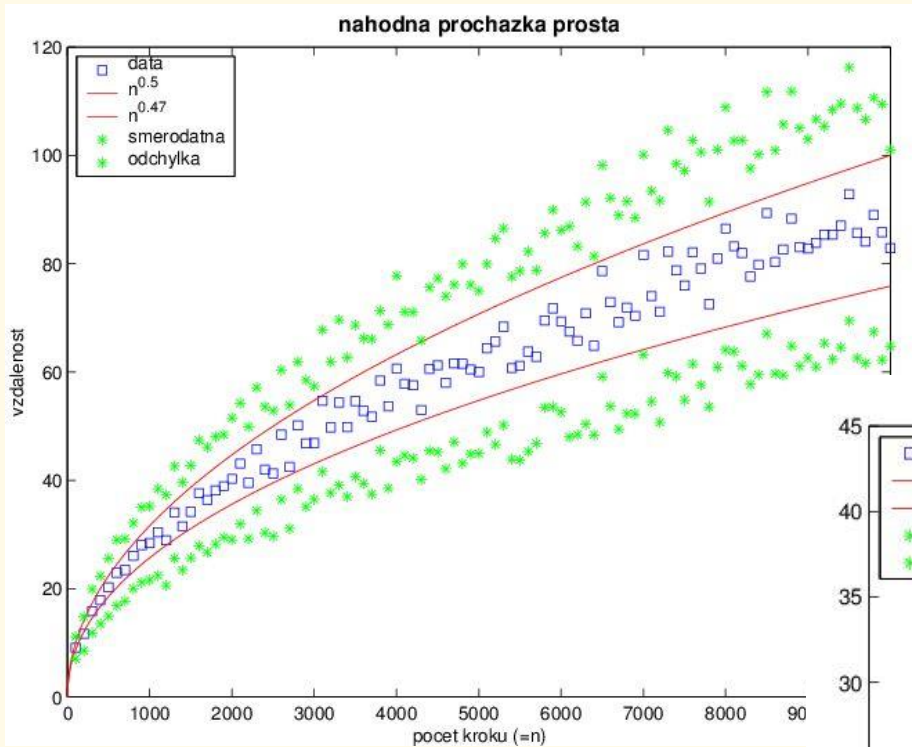


Různé běhy je třeba vystředovat a pak závislost fitovat.

Určit exponent α v $R \sim t^\alpha$.

Náhodné procházky - řešení

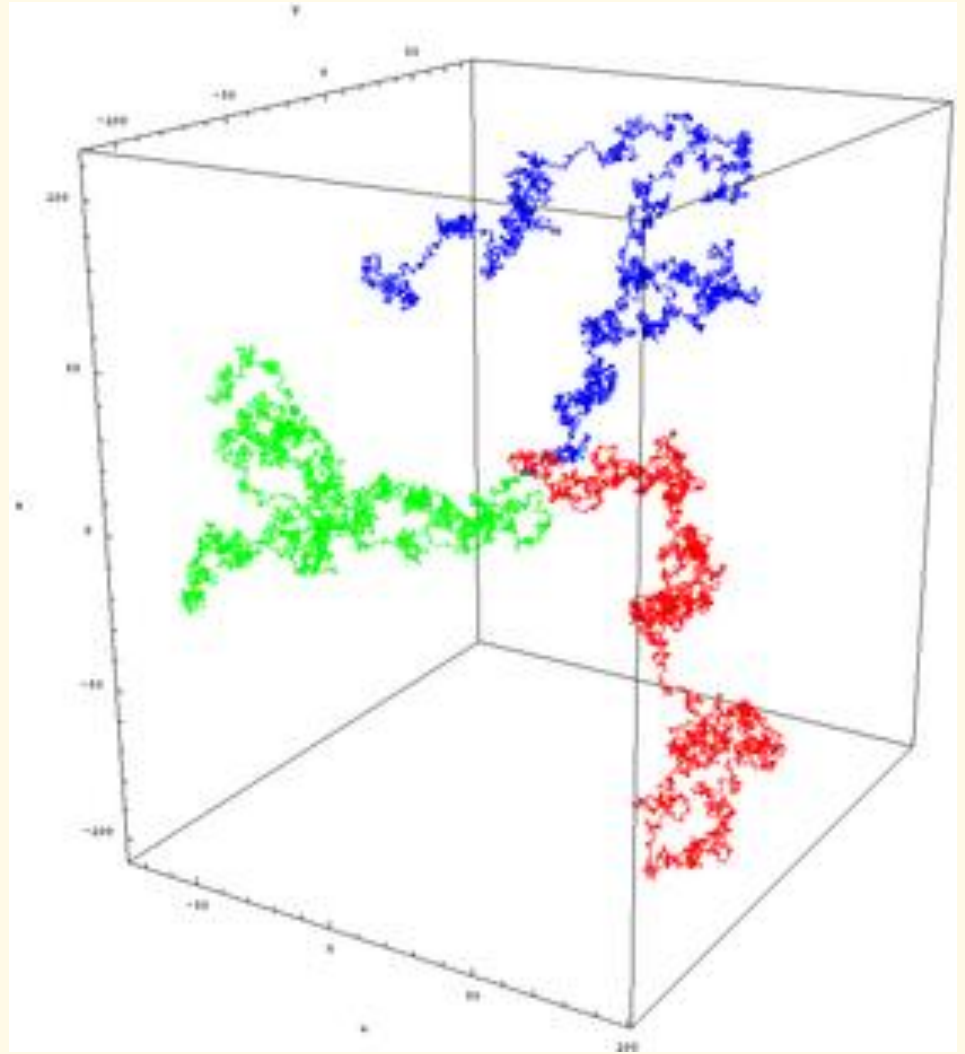
p. Psíkal



Náhodné procházky

těž pro tři dimenze

samovýbající se
self-avoiding walk (SAW) -
není omezení na délku



http://en.wikipedia.org/wiki/Random_walk#Gaussian_random_walk

Náhodná čísla

Skutečně náhodná jsou v přírodě nebo jsou získaná pomocí technických aplikací.

- pro použití třeba zaznamenat a pak načíst do programu
- nepraktické, nereprodukovatelné, pomalé

Proto generujeme sami pomocí programu

- generátory náhodných čísel přesněji pseudonáhodných čísel
- program je deterministický

například v FORTRAN/C/C++ standardně pomocí funkcí **rand** a **srand**

<http://physics.ujep.cz/~mmaly/vyuka/oporaPrgB/010.html>

Náhodná čísla - pokračování

Sekvence čísel, každé je generované pomocí n předchozích.

$$r_i = F(r_{i-1}, r_{i-2}, \dots, r_{i-m})$$

Požadavky:

- co největší perioda
- minimální korelace
- efektivní = rychlý výpočet
- přenositelnost na různé platformy

Typy:

- kongruentní $K(C,M)$
- s posuvným registrem $R(A,B,C,...)$

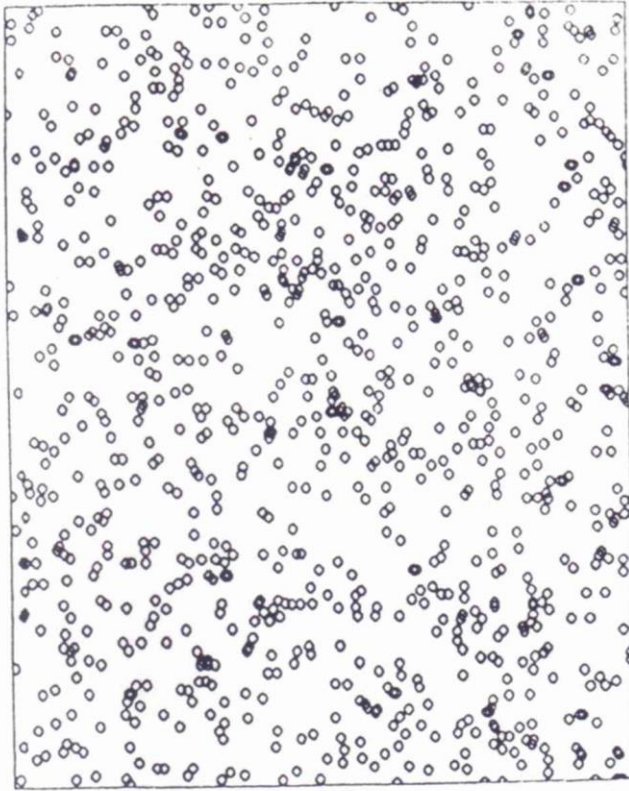
Náhodná čísla - pokračování

- příklady generátorů
- kombinace generátorů
- testy generátorů

- rovnoměrné rozdělení
v určitém intervalu

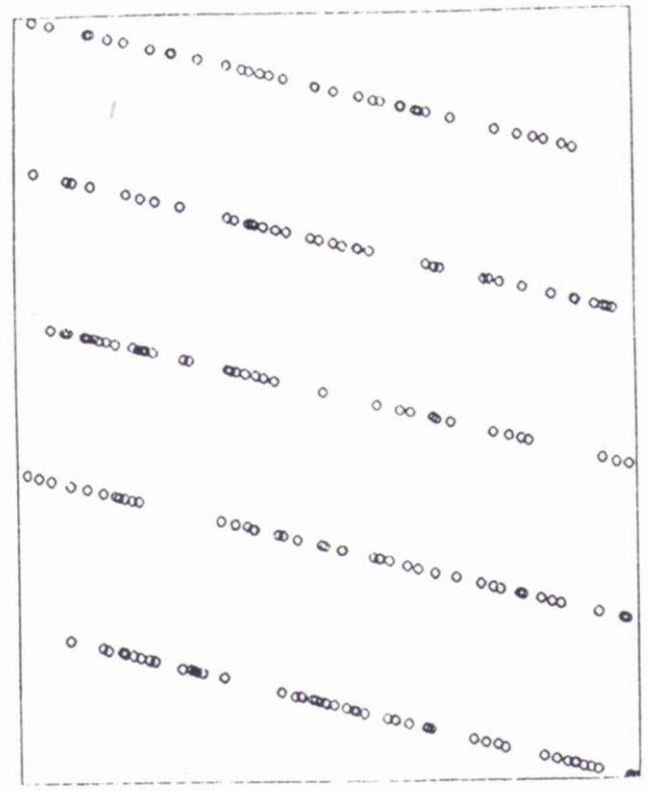
Testy generátorů

Y



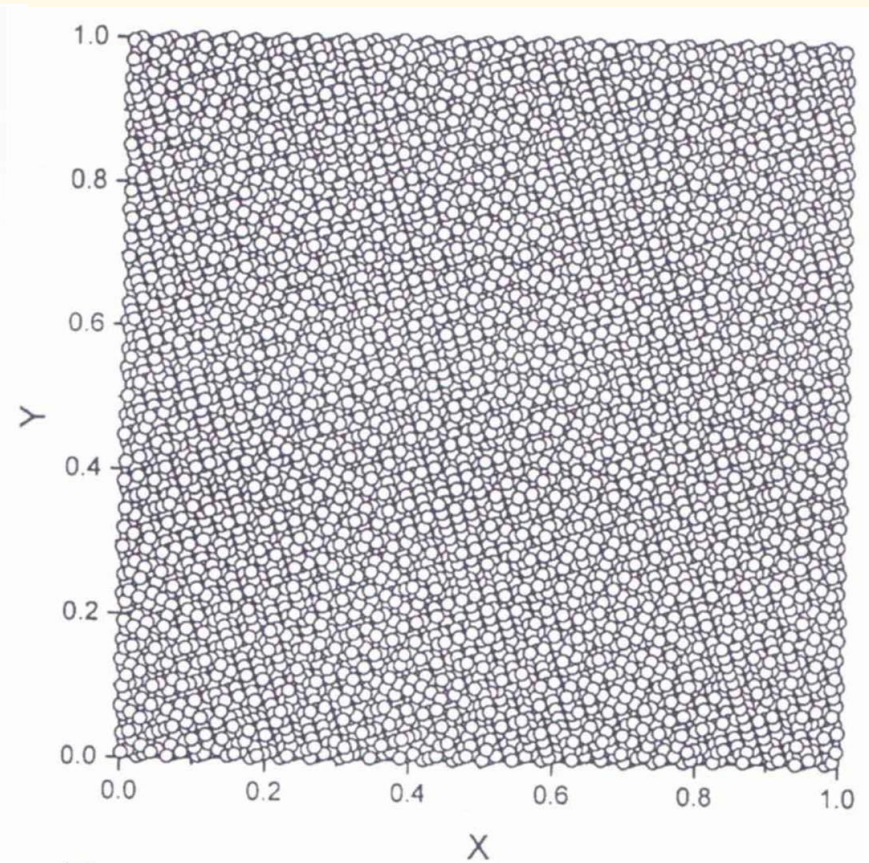
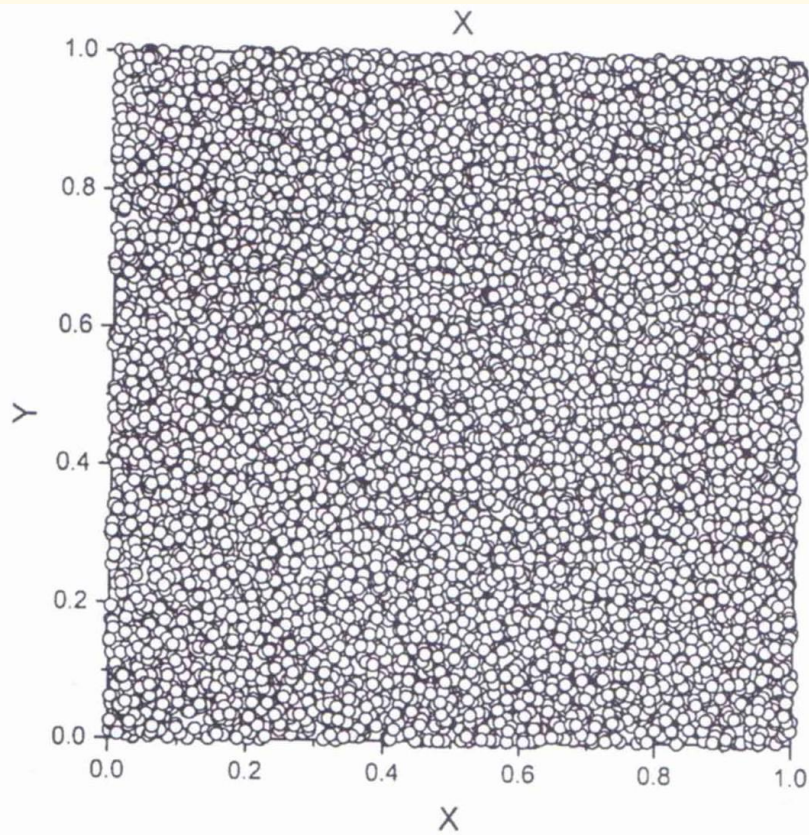
X

Y



X

Testy generátorů



Cvičení

Náhodná čísla - realizace

Existují kódy generátorů v různých programovacích jazycích.

Generátor je vhodné inicializovat např. pomocí času v počítači – `time()` .

Začátek: jednoduchý prográmeček pro výpis zvoleného počtu náhodných čísel.

Náhodná čísla - realizace

Začátek: jednoduchý prográmek pro výpis zvoleného počtu náhodných čísel při volání generátoru RAND.

```
program rngtest
print *, 'vlož počet pokusu '
read *, npokus
print *, ' počet pokusu ', npokus
do 10 i=1,npokus
    rndtest=RAND()
    write(6,*) i,rndtest
10 continue
end program rngtest
```

```
vlož počet pokusu
10
    počet pokusu      10
      1 0.61411285
      2 0.39798999
      3 1.78151131E-02
      4 0.41991234
      5 0.46889496
      6 0.71923804
      7 0.23525500
      8 0.93125153
      9 0.54643750
     10 0.97659349
```

Náhodné procházky v 2D

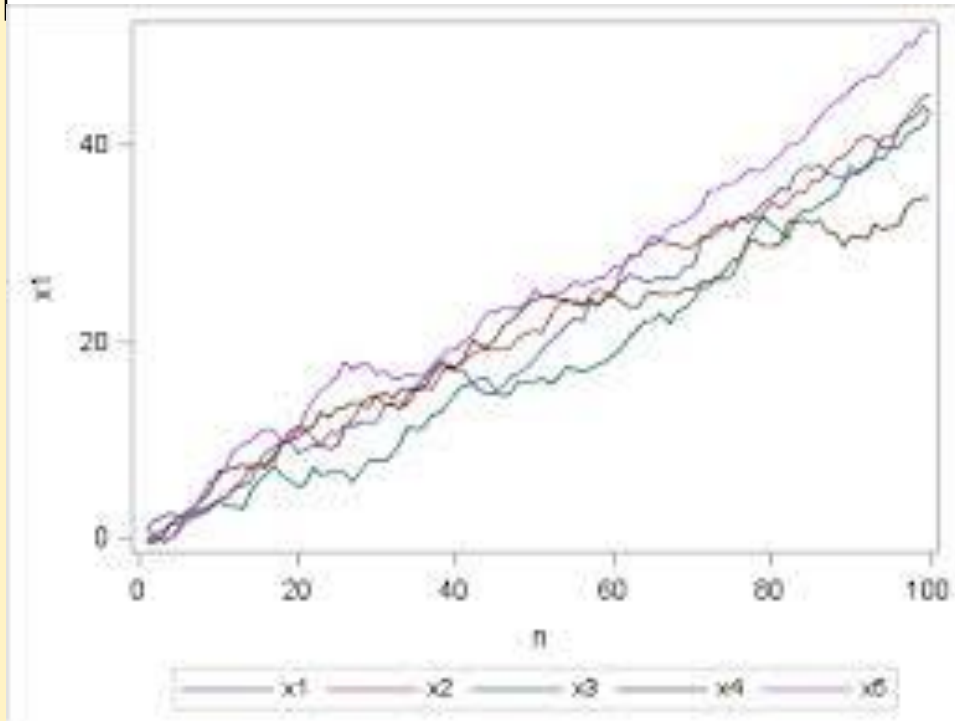
Simulujte a analyzujte různé typy náhodných procházek na dvou-dimenzionální čtvercové mřížce. Určete závislost vzdálenosti počátečního a koncového bodu na počtu kroků pro tyto typy procházek: prostá náhodná procházka (výběr ze čtyř směrů), procházka bez okamžitých návratů (výběr ze tří směrů) a jako volitelný bonus i procházka bez protínání.

Cíl: Porovnejte naměřené exponenty včetně odhadu chyby jejich měření.

Postupuje podle následujícího:

Prostá náhodná procházka

Začnete prostou náhodnou procházkou na dvou-dimenzionální čtvercové mřížce, tj. vybíráte náhodně pohyb jedním ze čtyř směrů. Měřte závislost vzdálenosti R od počátečního do koncového bodu na počtu kroků (čase) t pro n procházek. Např.



Různé běhy následně vystředujte, pro každý krok tak dostanete střední hodnotu vzdálenosti $\langle R \rangle$. Vyneste vývoj $\langle R \rangle$ v závislost na čase t včetně indikace chyb, viz dále.

Chyby při měření náhodné procházky

V daném kroku náhodné procházky určete směrodatnou odchylku $\Delta(n)$ měřené střední hodnotu vzdálenosti polohy částice v závislosti na počtu běhu n .

Vykreslete odchylky $\Delta(n)$ - error bars – pro vybrané body procházky.

V **gnuplotu** lze použít speciální příkaz:
plot "Graph_Data.dat" using 1:2:3 with yerrorlines
Chyba je v třetím sloupci souboru
"Graph_Data.dat"

Cíl úlohy srovnání exponentů

Odhad exponentů:

Vyneste funkci $\langle R(t) \rangle$ v log-log měřítku a určete exponenty časové závislosti τ^α pro jednotlivé typy procházek (prostá procházka a procházka bez okamžitých návratů). Udejte chyby získaných exponentů.

Bonus: samovyhýbající se procházka

Provedte podobný výpočet pro procházku bez protínání (self-avoiding walk SAW) a srovnejte vývoj s předchozími typy procházek.

Minimálním cílem je ukázat, že SAW má jiný exponent – u SAW se lze omezit na menší počet kroků.