

Pokročilé simulace ve fyzice mnoha částic:

*Simulace složitých, nerovnovážných a
kvantových jevů, NTMF024*

Miroslav Kotrla & Milan Předota

FZÚ AV ČR, Praha 8
oddělení teorie
kondenzovaných látek

kotrla@fzu.cz

JU České Budějovice
Přírodovědecká fakulta
ústav fyziky a biofyziky

predota@prf.jcu.cz

Navazuje na přednášku

**Počítačové simulace
ve fyzice mnoha částic
(NTMF021 ze zimního semestru),**

**v níž byly vysvětleny základy metod
Monte Carlo a molekulární dynamiky
pro klasickou a rovnovážnou situaci.**

Náročnost simulací

	klasické	<u>kvantové</u>
rovnovážné	přímočaré	obtížné
<u>nerovno- vážné</u>	možné	velmi těžké

SYLABUS TÉTO PŘEDNÁŠKY

Simulace časově závislých jevů:

- Difuze částic, určení difuzního koeficientu (Einsteinův vztah), laplaceovský růst - modelování fraktálního růstu - sněhové vločky (DLA)
- Diskrétní modely vývoje: šíření požárů, epidemií.
- Celulární automaty, simulace růstu rozhraní modely transportu ...
- self-difúze částic v mřížovém plynu.

SYLABUS POKRAČOVÁNÍ

- Kinetické MC, volba kinetiky, čas v kinetickém MC, "n-fold way" algoritmus, single step model model ...
- off lattice KMC
- Simulace růstu reálných krystalů. Modelování epitaxního růstu a tvorby nanostruktur.

- MC pro kvantové systémy: variační MC, - Kanonické kvantové MC, izomorfismus kvantových a klasických systémů.
- Simulace z prvních principů, metoda funkcionálu hustoty, Car-Parrinelliho metoda.

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 nespojitě potenciály

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

Studium časových závislostí pomocí metody Monte Carlo

Kinetické Monte Carlo

- střední hodnoty veličin jsou určeny jako časové středováním konfigurací

- časové intervaly jsou generovaných náhodně

Posloupnost generovaných konfigurací se interpretuje jako jedna realizace časového vývoje.

Vhodná pro spojité i diskrétní systémy, spojité i nespojitě potenciály

$$\Delta t = -\frac{1}{R(x)} \ln u_{(0,1)}$$

Modelování časově závislých jevů

a) deterministicky přesný popis

- známe nebo máme představu o všech detailech
- lze napsat soustavu evolučních diferenciálních rovnic (MD, časově závislé konečné elementy)

např. mikroskopický pohyb atomů/molekul, rovnice proudění etc.

příklad o laplaceovském růstu - Dirichletova úloha

b) statistické simulace

Modelování časově závislých jevů

a) deterministicky přesný popis

- známe nebo máme představu o všech detailech
- lze napsat soustavu evolučních diferenciálních rovnic (MD, časově závislé konečné elementy)

např. mikroskopický pohyb atomů/molekul, rovnice proudění etc.

příklad o laplaceovském růstu - Dirichletova úloha

b) statistické simulace

- dynamika známa jen přibližně, ale důležité rysy identifikovány
- popis pomocí stochastických rovnic (některá varianta MC)
- rozlišit:

i. jen evoluce jako sekvence náhodných stavů

např. DLA – diffusion limited aggregation

ii. měření časových závislostí

např. rychlost růstu krystalu

Modelování časově závislých jevů

a) deterministicky přesný popis

- známe nebo máme představu o všech detailech
- lze napsat soustavu evolučních diferenciálních rovnic (MD, časově závislé konečné elementy)

např. mikroskopický pohyb atomů/molekul, rovnice proudění etc.

příklad o laplaceovském růstu - Dirichletova úloha

b) statistické simulace

- dynamika známa jen přibližně, ale důležité rysy identifikovány
- popis pomocí stochastických rovnic (některá varianta MC)
- rozlišit:

DLA – diffusion limited aggregation

i. jen evoluce jako sekvence náhodných stavů

další příklady: požáry, epidemie

ii. měření časových závislostí

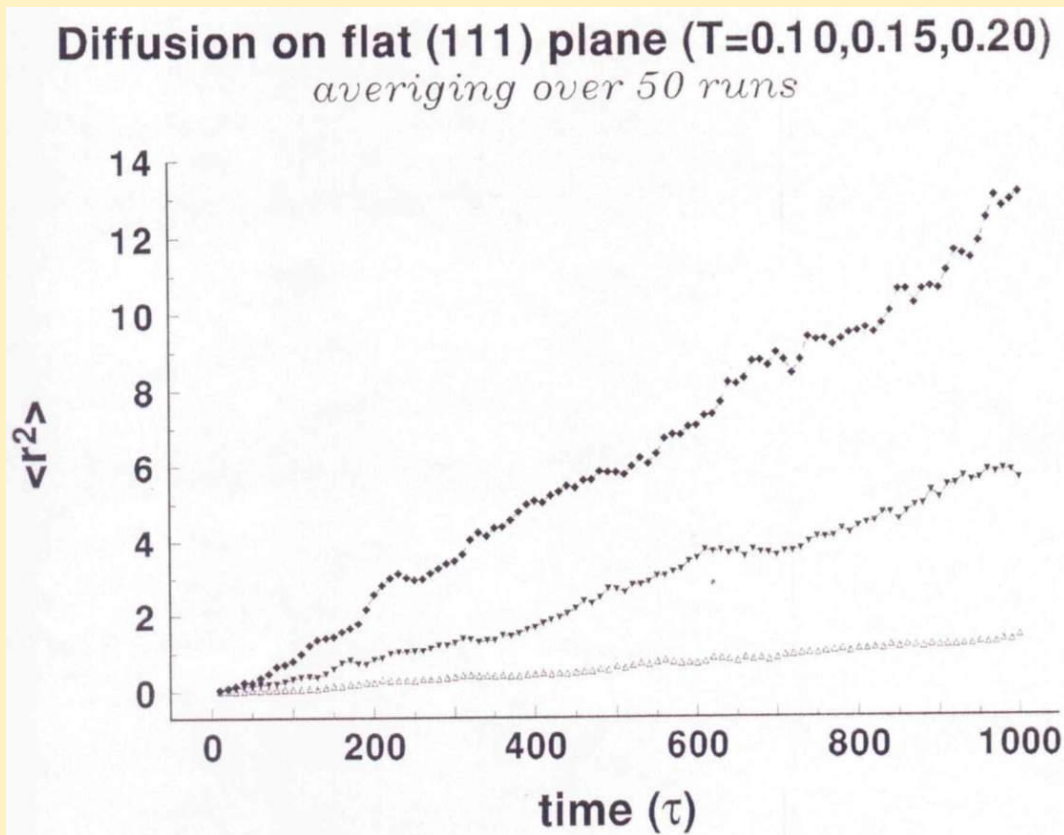
rychlost růstu krystalu

Difúze – pohyb v daném 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 ...

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


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 matice = různé sekvence stavů, tj. odpovídají různé dynamice

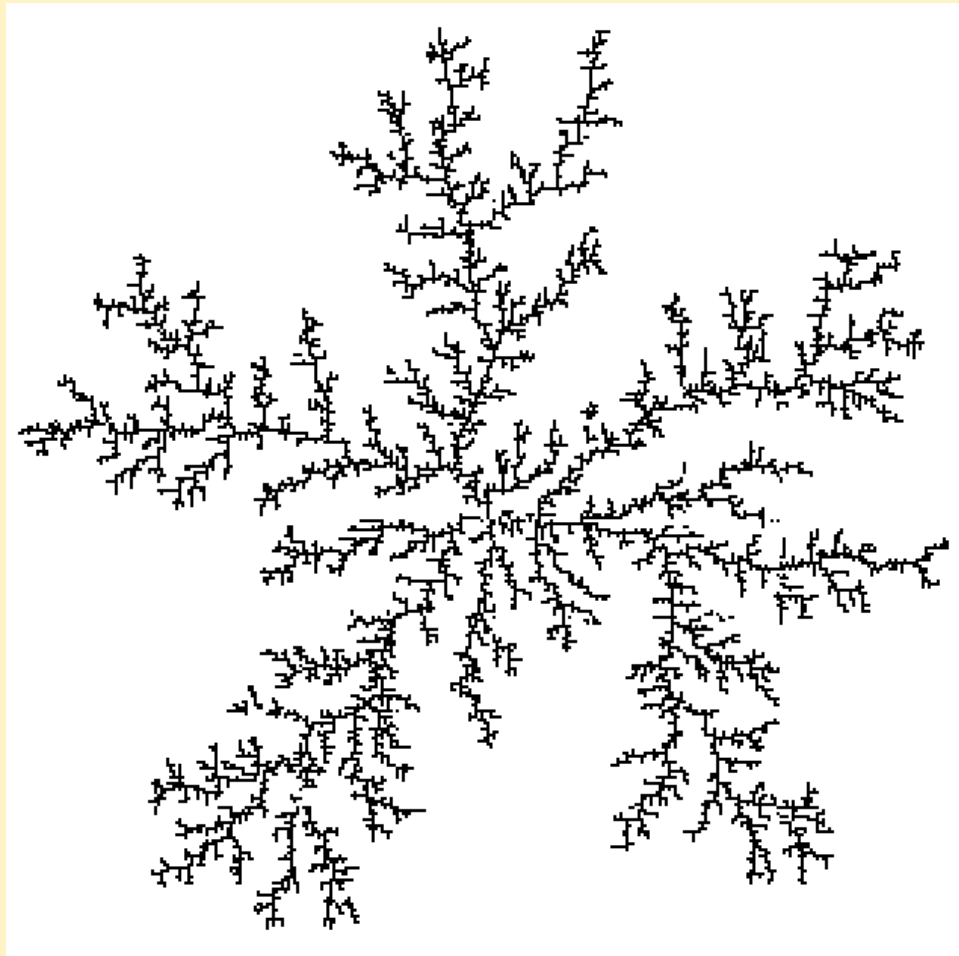
Exponent závislosti na čase se mění!

Nestabilita při laplaceovském růstu

Růst pevné látky z podchlazené tekutiny

- soustava rovnic
- pohyblivé hraniční podmínky
- nestabilita

Laplaceovský růst, nestabilita \gg fraktální objekty



Fraktály

typy:

- matematické (abstraktní) fraktály
- přírodní objekty
- výsledky měření/výpočtů

mnoho příkladů:

- Cantorova množina, Kochova křivka, ...
- mapy (profily pobřeží, síť říčních přítoků, hvězdná obloha, krátery na planetách, ...)
- výsledky měření/výpočtů

další příklady a informace např. na wikipedii:

<http://en.wikipedia.org/wiki/Fractal#Introduction>

např.

H. von Koch - jeden z prvních matematických fraktálů 1904,

B. Mandelbrot - pojem fraktálu – 1975, ...



Fraktály

typy:

- matematické (abstraktní) fraktály
- přírodní objekty
- výsledky měření/výpočtů

mnoho příkladů:

- Cantorova množina, Kochova křivka, ...
- mapy (profily pobřeží, síť říčních přítoků, hvězdná obloha, krátery na planetách, ...)
- výsledky měření/výpočtů

vlastnosti:

1. samopodobnost (self-similarity)
2. fraktální dimenze

PROČ A JAK V PŘÍRODĚ VZNIKAJÍ?



první krok statický popis tj. **Geometrie**



Euklidovská geometrie:

- **tradiční > 2000 let**
- **založená na určité velikosti**
- **vhodná pro makroskopické lidské výtvary**
- **popsaná vzorci**

fraktální geometrie:

- **nová cca 40 let**
- **žádná specifická škála**
- **vhodná pro přírodní objekty**
- **objekty jsou určeny algoritmy**



Škálová invariance



$$M(bL) = g(b)M(L)$$

Po n iteracích po sobě $L \rightarrow b^n L$

$$M(b^n L) = [g(b)]^n M(L) = g(b^n)M(L)$$

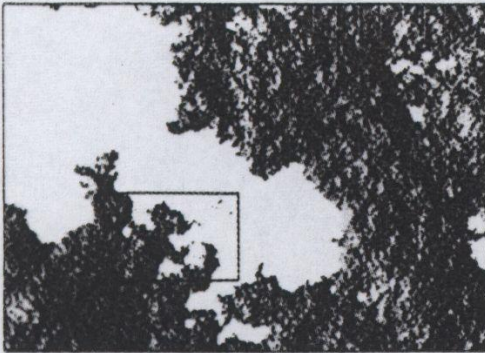
$$[g(b)]^n = g(b^n)$$

řeší

$$[g(b)] = b^\alpha$$

Příklad samopodobnosti - krajina

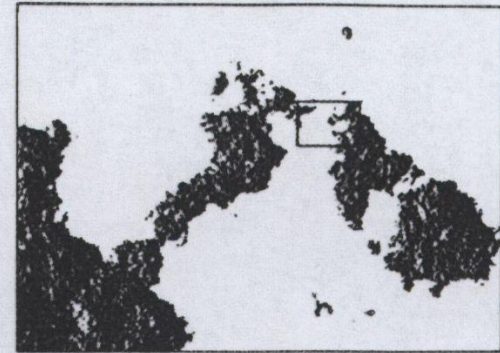
MAG 1.00E + 00



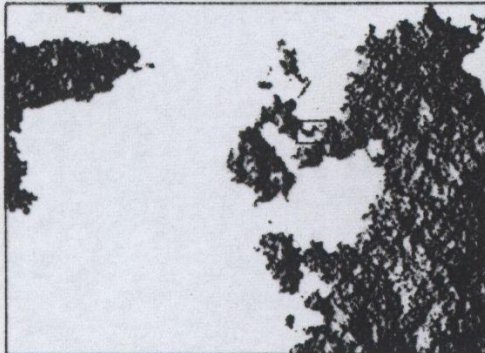
MAG 4.00E + 00



MAG 3.20E + 01



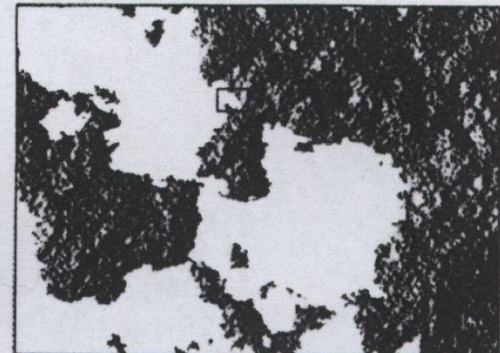
MAG 2.56E + 02



MAG 4.10E + 03



MAG 6.55E + 04



MAG 1.05E + 06



MAG 1.68E + 07



MAG 1.00E + 00



pojem dimenze

objekt rozděl na N stejně velkých částí o velikosti r

- úsečka $r = 1/N$
- čtverec $r = \frac{1}{\sqrt{N}}$
- krychle $r = \frac{1}{\sqrt[3]{N}}$
- hyperkrychle $N=1/r^D$

$$D = \frac{\log N(r)}{\log 1/r}$$

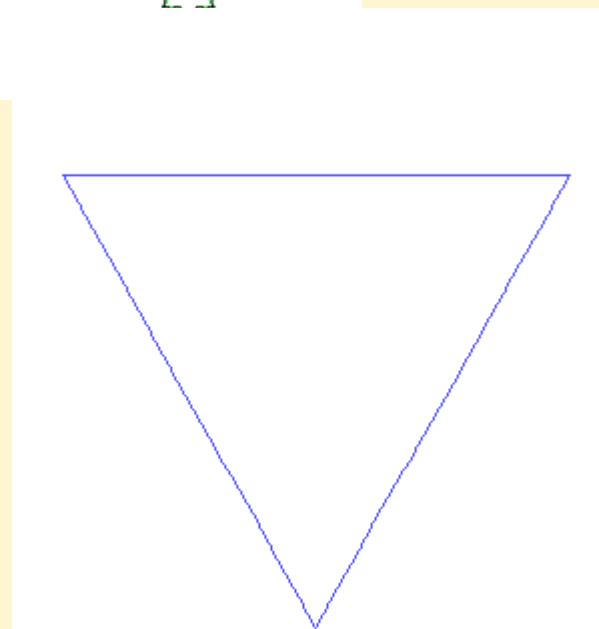
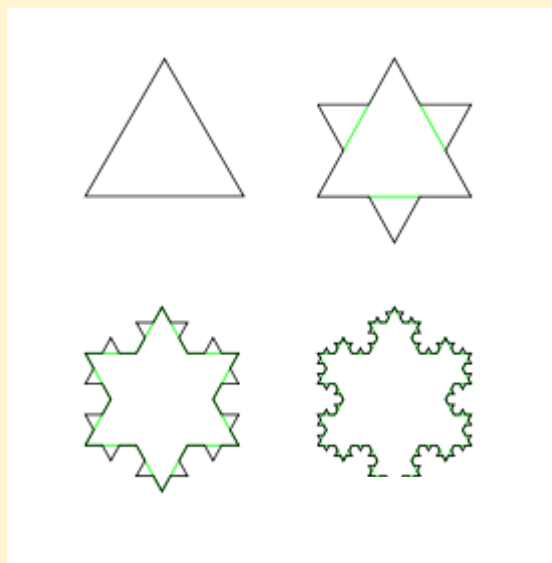
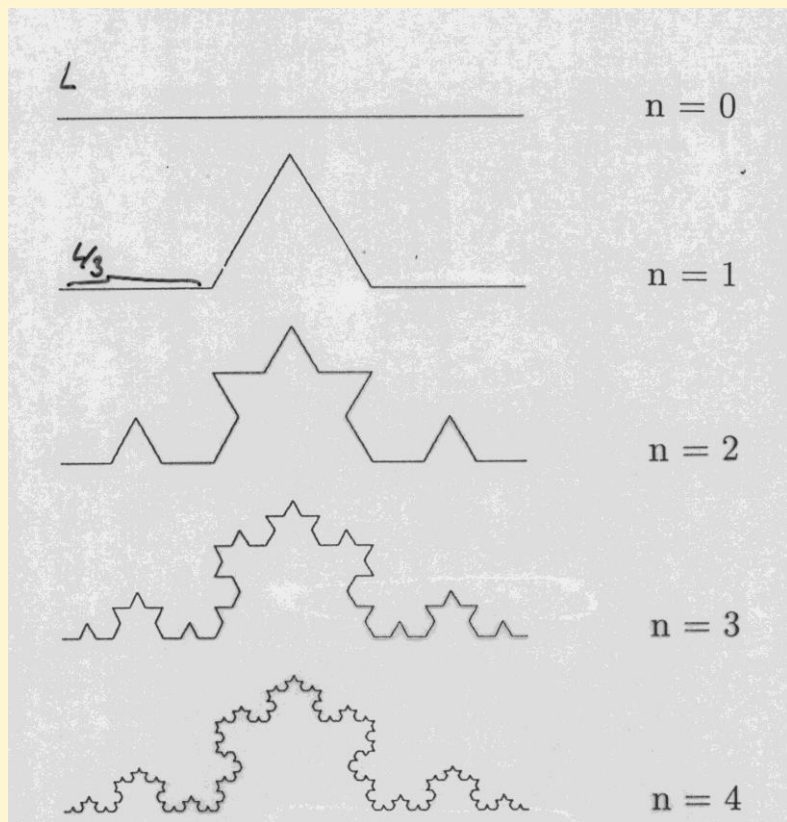
fraktální dimenze:

přeškálování délky $L \rightarrow b L$ pak „hmoty“ $M(bL) = b^D M(L)$

$$D_f = \frac{\log \frac{M(L)}{M(bL)}}{\log 1/b}$$

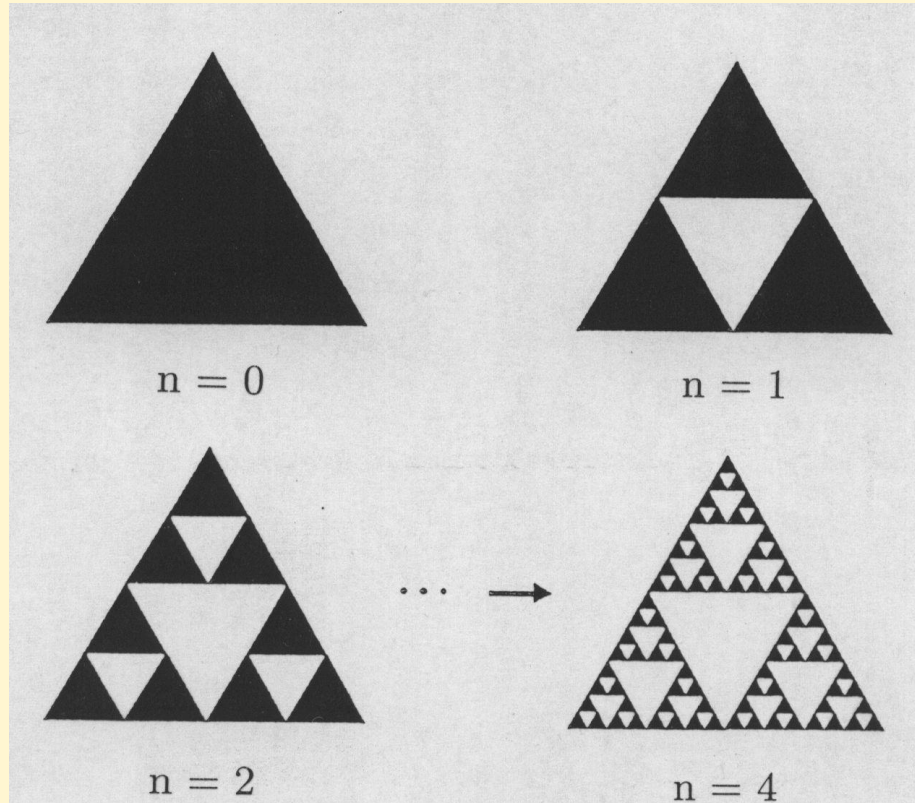
Kochova křivka - rok 1904

http://en.wikipedia.org/wiki/Helge_von_Koch



$$D_f = \frac{\log 4}{\log 3}$$

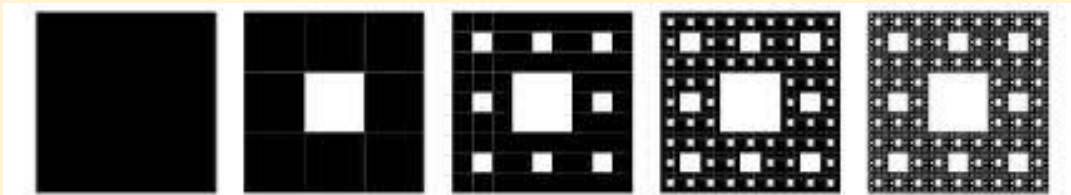
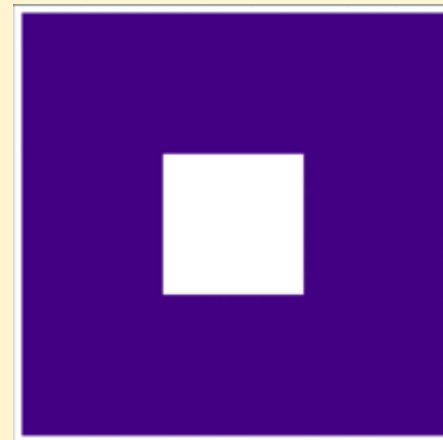
V rovině ...



Sierpinski gasket

$$D = \frac{\log 3}{\log 2}$$

Sierpinski carpet



Mnoho příkladů na internetu

<http://en.wikipedia.org/wiki/Fractal>



přírodní objekty



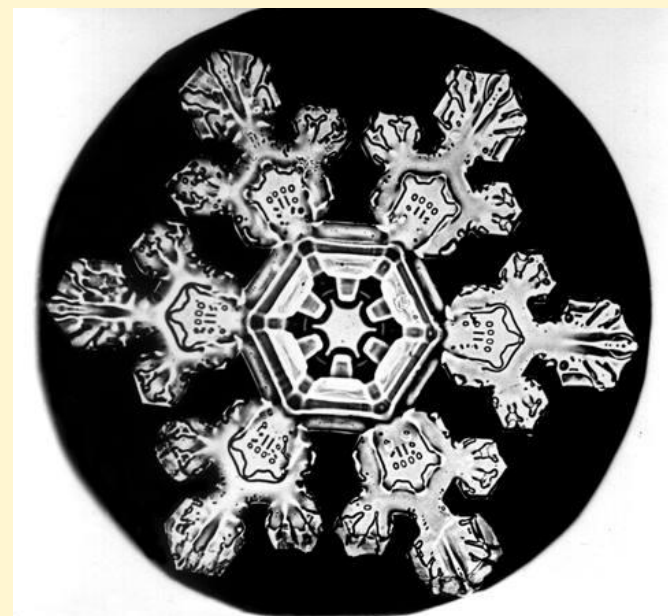
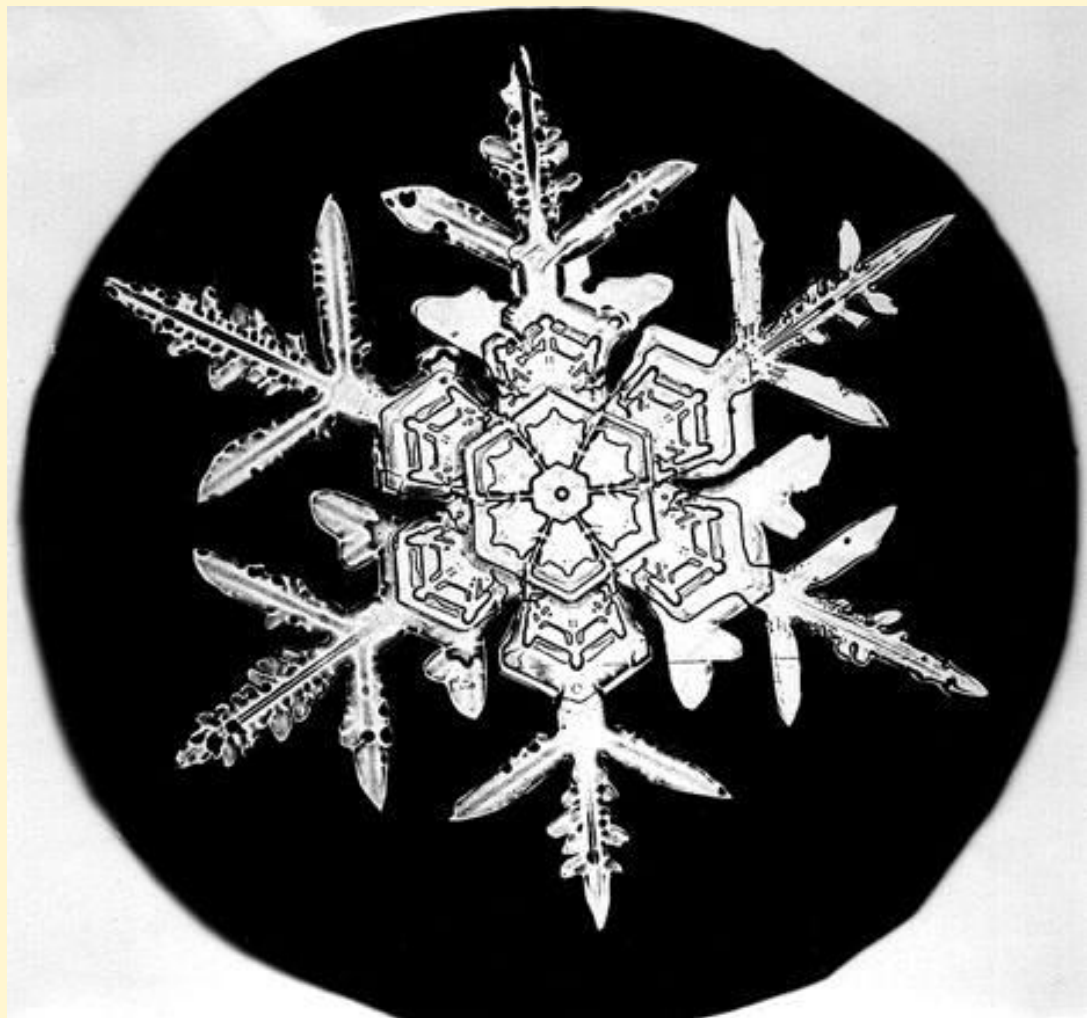
DLA klaster vzniklý elektrodepozicí sulfátu mědi

výpočet fraktální dimenze – box counting

<http://www.fast.u-psud.fr/~moisy/ml/boxcount/html/demo.html>

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

Sněhové vločky



Výbojem vytvořený fraktál



High-voltage dielectric breakdown within a block of plexiglas creates a fractal pattern called a Lichtenberg figure. The branching discharges ultimately become hairlike, but are thought to extend down to the molecular level.

http://capturedlightning.com/frame_s/lichtenbergs.html

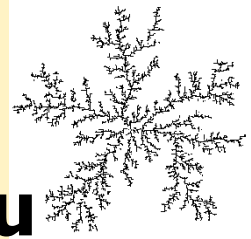


Literatura



- B.B. Mandelbroad, The fractal geometry of nature, W.H. Freeman and comp., New York 1983.
- M. Plischke a B. Bergensen, Equilibrium statistical Physics, World Scientific, Singapore, 1994(2. vydání)
- K. Huang, Statistical Mechanics, John Wiley & Sons, Singapore, 1987 (2. vydání)
- A. -L Barabasi a H. E. Stanley, Fractal Concepts is Surface Growth, Cambridge University Press, Cambridge, 1995.
- A. C. Levi and M. Kotrla, Theory and simulations of crystal growth, J. Phys. Cond. Matt. 9, 299-344 (1997).
- N. G. Van Kampen, Stochastic Processes in Physics and Chemistry, North-Holland, Amsterdam, 1981.

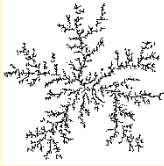
Úloha DLA



Fraktální dimenze vytvořeného klastru

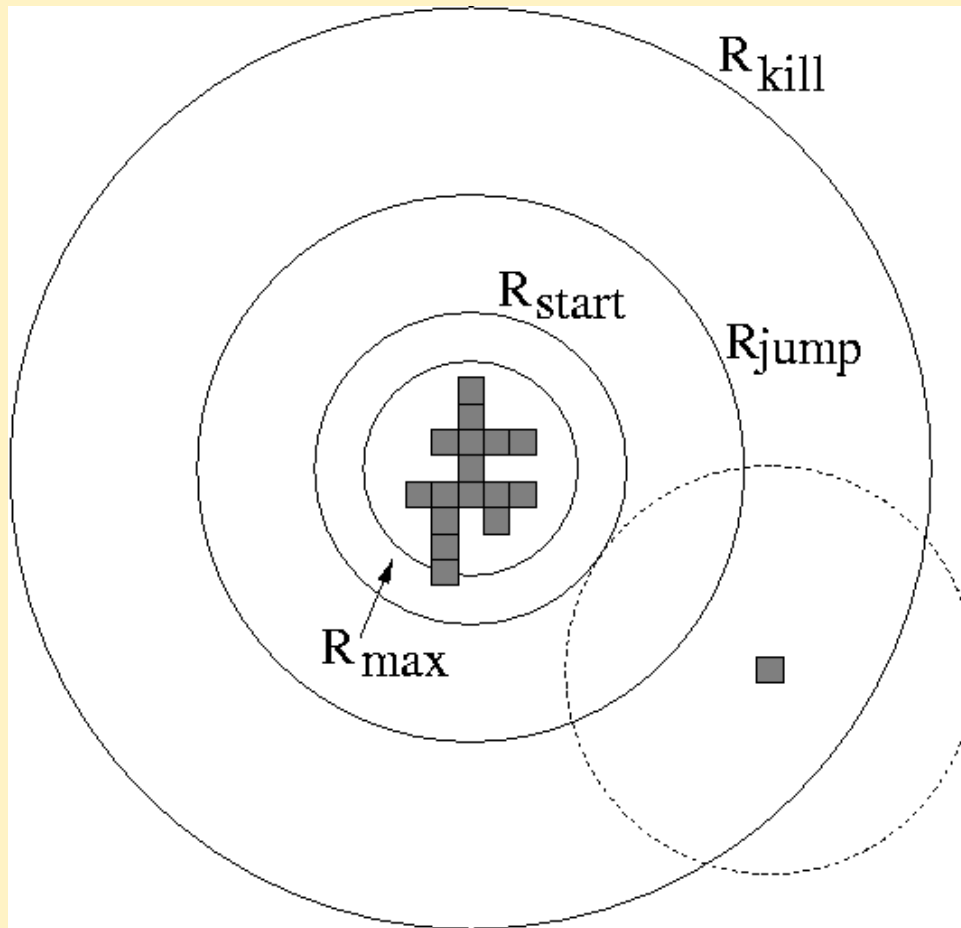
- Uvažujte hexagonální mřížku v rovině. Vrcholy buď jsou nebo nejsou obsazeny molekulou.
- Na začátku simulace je jen jedna molekula uprostřed mřížky.
- Jeden krok simulace popisuje difúzi molekuly z velké vzdálenosti až do okamžiku, kdy se usadí na povrchu vnikajícího klastru. Připojení je nevratné.

- Molekula se objeví na náhodně vybraném vrcholu na obvodu mřížky. Potom molekula náhodně difunduje -- přeskakuje na libovolný sousedící vrchol do té doby, kdy dosáhne vrcholu, který sousedí s nějakým již obsazeným vrcholem.
- Tento krok se pak opakuje, až se vytvoří dostatečně veliký klastr. Určete fraktální dimenzi vytvořeného klastru.

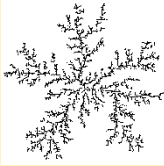


Algoritmus pro DLA)

(difúzí omezená agregace)



Witten and Sander (1981)



Basic algorithm: DLA on a square lattice

1. Initialize

start with an immobile seed particle in the center of an otherwise empty square lattice (cluster mass $M = 1$, cluster radius $R_{\max} = 1$)

2. Launch a new particle

place a single particle with equal probability on a circle with radius $R_{\text{start}} > R_{\max}$ about the center (as small as possible, e.g. $R_{\text{start}} = R_{\max} + 1$)

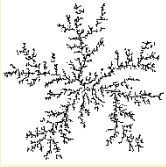
3. Diffusion

move the particle from its current position to a randomly chosen nearest neighbor (NN) site. Repeat 3 until a NN site of a cluster particle is reached, then go to step 4

4. Aggregation

add the particle to the cluster, increase M by one and re-evaluate R_{\max} . stop if the desired mass M is reached, else go to step 2.

Diffusion Limited Aggregation (DLA)



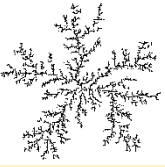
3. Diffusion (shortcuts)

calculate the current distance r of the particle from the origin.

If $r < R_{\text{jump}}$: move the particle from its current position to a randomly chosen nearest neighbor site.

If $R_{\text{kill}} > r R_{\text{jump}}$: move the particle with equal probability anywhere on a circle with radius $(r - R_{\text{start}})$ around its current position.

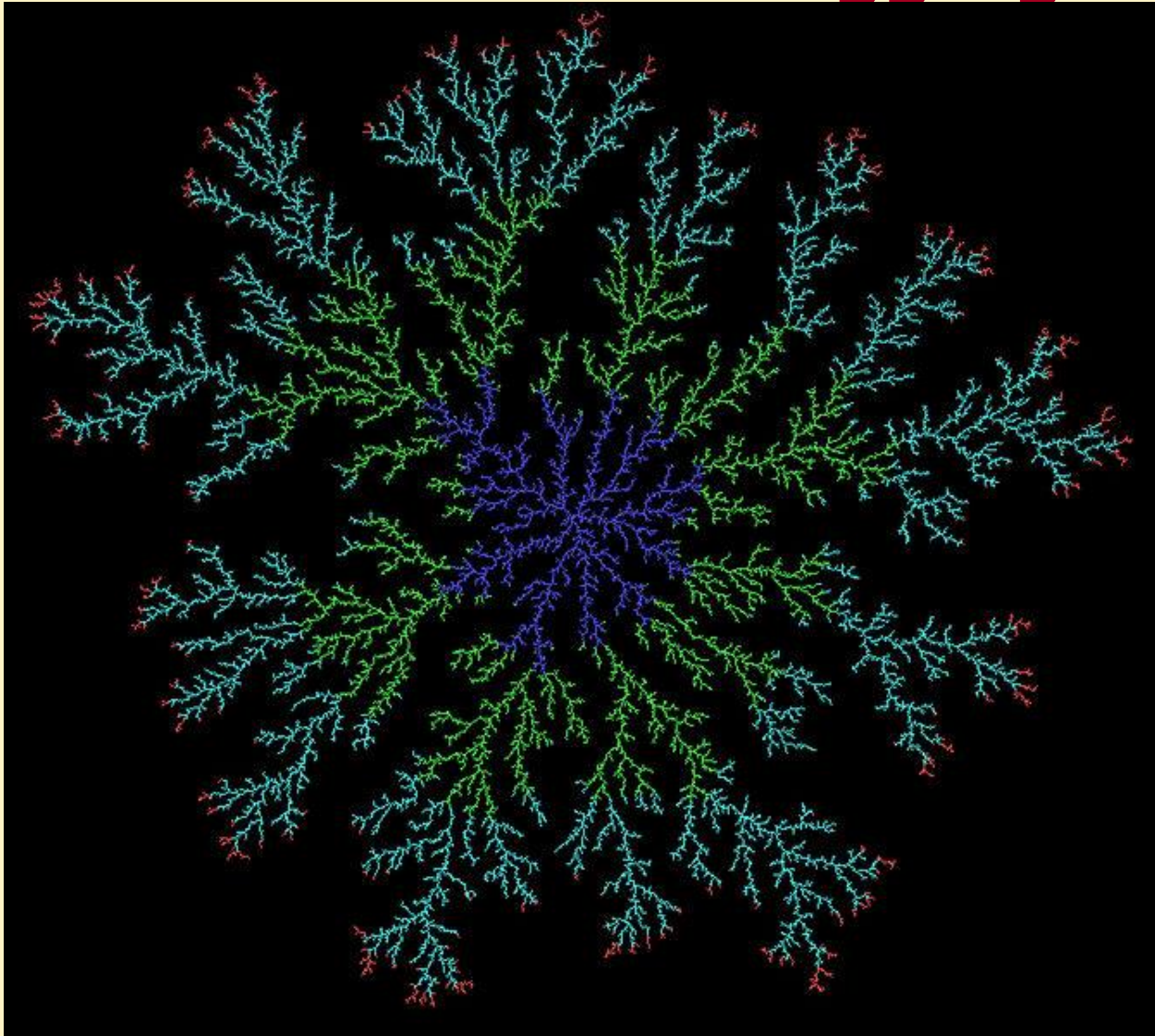
If $r \geq R_{\text{kill}}$: remove the particle from the lattice, go to step 2. repeat 3 until a nearest neighbor of a cluster site is reached, then go to 4.



Fraktální dimenze

$$D_f = \frac{\log N}{\log r_{\max}}$$

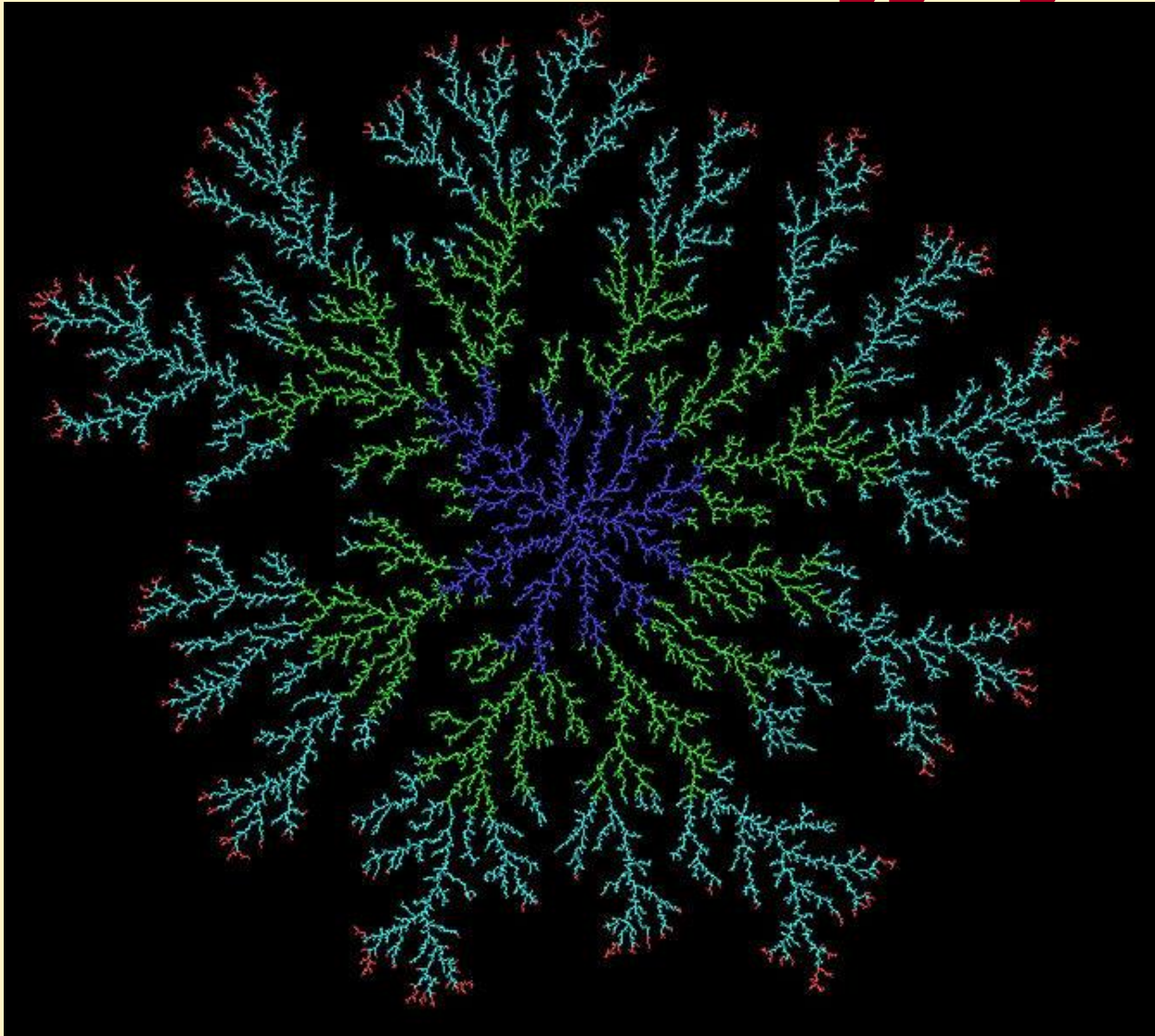
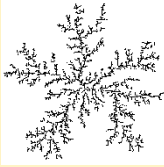
Diffusion Limited Aggregation (DLA)



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

Diffusion Limited Aggregation (DLA)

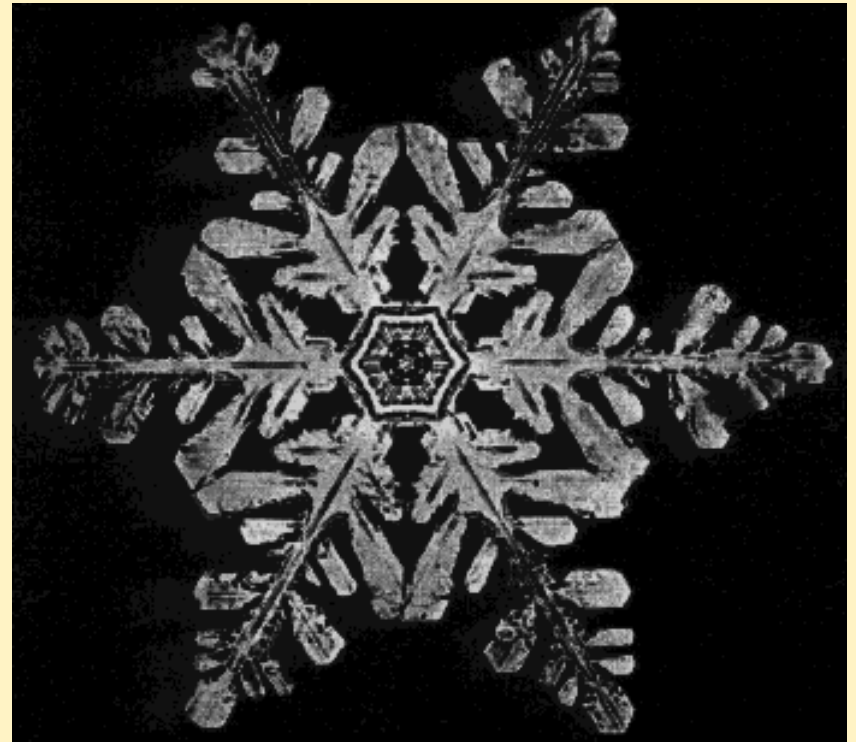
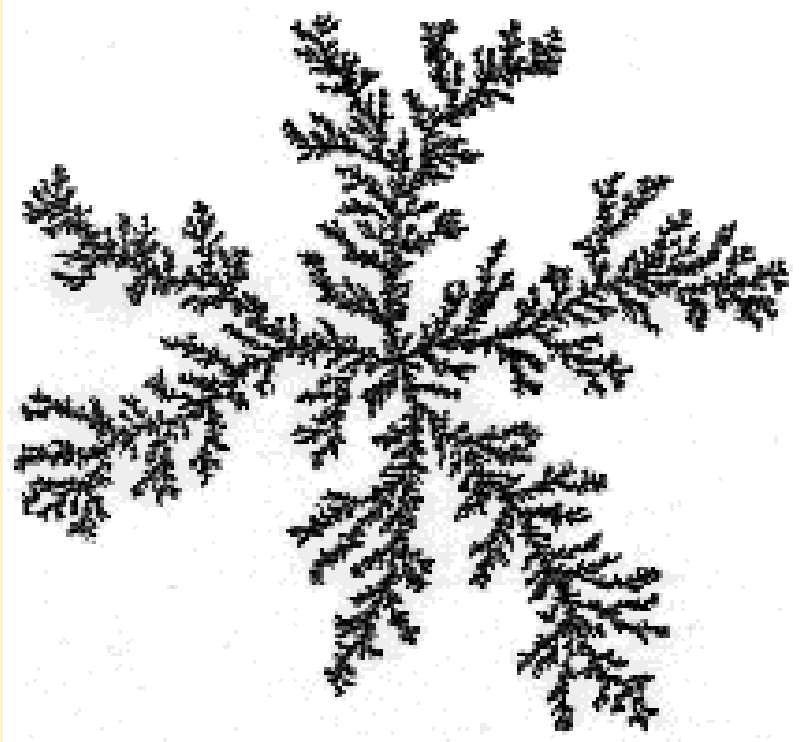


A DLA consisting about 33,000 particles obtained by allowing random walkers to adhere to a seed at the center. Different colors indicate different arrival time of the random walkers.

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



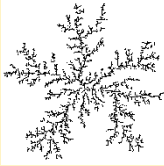
Diffusion limited aggregation



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

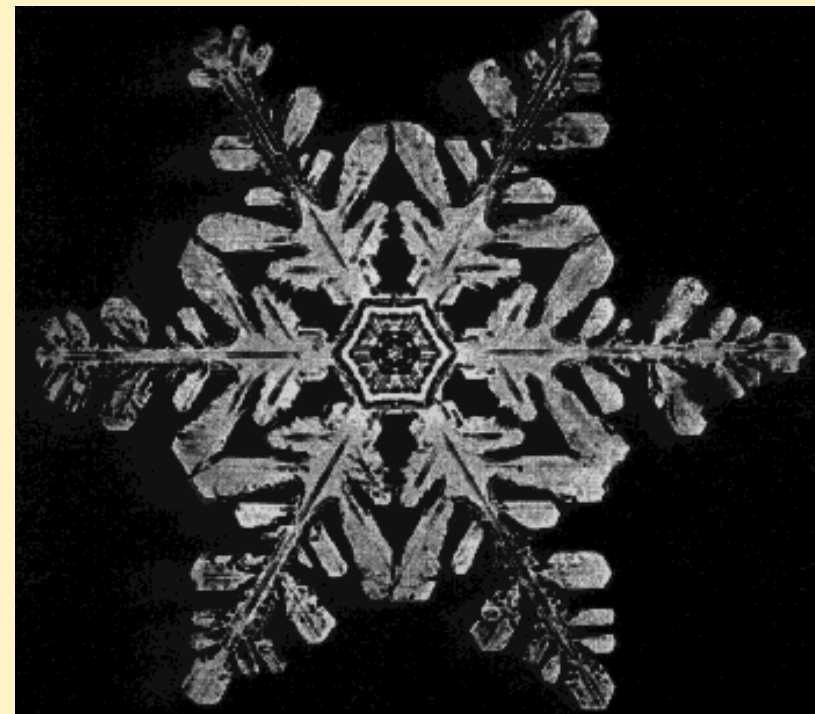
<http://classes.yale.edu/fractals/panorama/physics/dla/DLA.html>

Diffusion limited aggregation (difúzí omezená agregace)



A DLA klastr vzniklý při elektrodepozici z roztoku sulfátu mědi

jedna z forem sněžové vločky



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

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

Celulární automaty (CA)

- alternativní popis samoorganizace
- diskrétní souřadnice i diskrétní proměnné + diskrétní čas
- CA mají netriviální dynamické chování
- jednodušší než modely samoorganizace s diferenciálními rovnicemi
- CA jsou jednodušší, proto umožňují detailnější analýzu
- přesto velká rozmanitost komplikovaných jevů

Historické pozn.:

- ⌚ **1963 von Neumann a Ulam zavedli jako idealizaci biologických systémů („cellular spaces“) s cílem modelování samoprodukce**
- ⌚ **postupně zaváděny v dalších oblastech pod různými jmény**
- ⌚ **1983 Wolfram – [Rev. Mod. Phys. 55, 601 \(1983\)](#)**
- ⌚ ...

Celulární automaty (CA)

Formalizace:

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 \mathbf{S}

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 $\mathbf{s}_i(t+1) = \mathbf{F}(\{\mathbf{s}\}_{O(i)}(t))$

Simulace lesních požárů



on line simulátory požáru na internetu:

simulator požáru s ovládáním pravděpodobnosti šíření

<http://www.shodor.org/interactivate/activities/fire/>

simulator požáru s nastavením větru a paliva (lesa, křoví, trávy)

<http://www.pbs.org/wgbh/nova/fire/simulation.html>

CA simulator požáru a růstu stromů - ovládáním pravděpodobností hoření a růstu I

<http://schuelaw.whitman.edu/JavaApplets/ForestFireApplet/>

CA simulator požáru a růstu stromů - ovládáním pravděpodobností hoření a růstu II

<http://www.eddaardvark.co.uk/fivecell/forest.html>

pěkný

Simulace lesních požárů - pokračování

úloha- požár

Uvažujte "les" na čtvercové mřížce při periodických okrajových podmínkách a simulujte následující celulární automat:

- Každý vrchol mřížky se může nacházet ve třech stavech: živý strom, hořící strom, spáleniště.
- Nová konfigurace se generuje z předchozí podle pravidel:
 1. Má-li živý strom alespoň jednoho hořícího souseda (ze 4 sousedů), pak vzplane.
 2. Hořící strom shoří (v následující konfiguraci se změní ve spáleniště)
 3. Na spáleništi vyrostе nový strom s pravděpodobností p

Vyjděte z konfigurace s náhodně rozmístěnými stromy a spáleništi v poměru 1:1 a s několika náhodně umístěnými hořícími stromy.

Vhodné p je několik %.

Sledujte časovou závislost hustoty stromů pro různé hodnoty pravděpodobnosti p . Proved'te středování přes několik běhů, sledujte závislost a na velikosti systému. Modifikace: místo několika hořících stromů na začátku zaveďte pravděpodobnost vzniku požáru q .



Simulace šíření epidemií

úloha - epidemie

Uvažujte následující model šíření epidemie:

- Každý vrchol mřížky se může nacházet v jenom ze tří stavů: nakažený (N), zdravý (Z), imunní (I).
- Aktivními vrcholy budeme rozumět nejbližší sousedy vrcholů ve stavu N , kteří sami jsou ve stavu Z .

Aplikujte dále následující algoritmus:

- Vyber náhodně aktivní uzel.
- S pravděpodobností p jej převed' do stavu N (nakažený), jinak jej převed' do stavu I (imunní).

Simulujte na čtvercové mřížce při periodických okrajových podmínkách.

V počáteční konfiguraci necht' je centrální vrchol ve stavu N (nakažený) a všechny ostatní ve stavu Z (zdravý).

Odhadněte kritickou hodnotu pravděpodobnosti onemocnění p_c pro to, aby nákaza zachvátila celý systém, tj. aby došlo k perkolaci nákazy.

Základní model transportu

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.

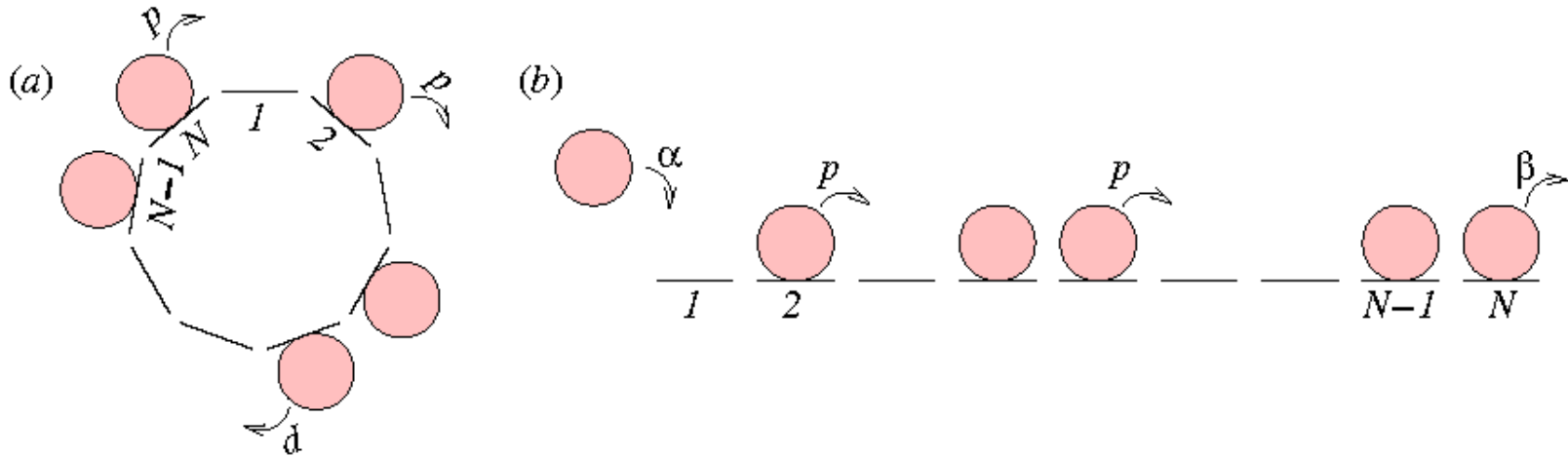
Základní model transportu

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.

Užívány různé hraniční podmínky:

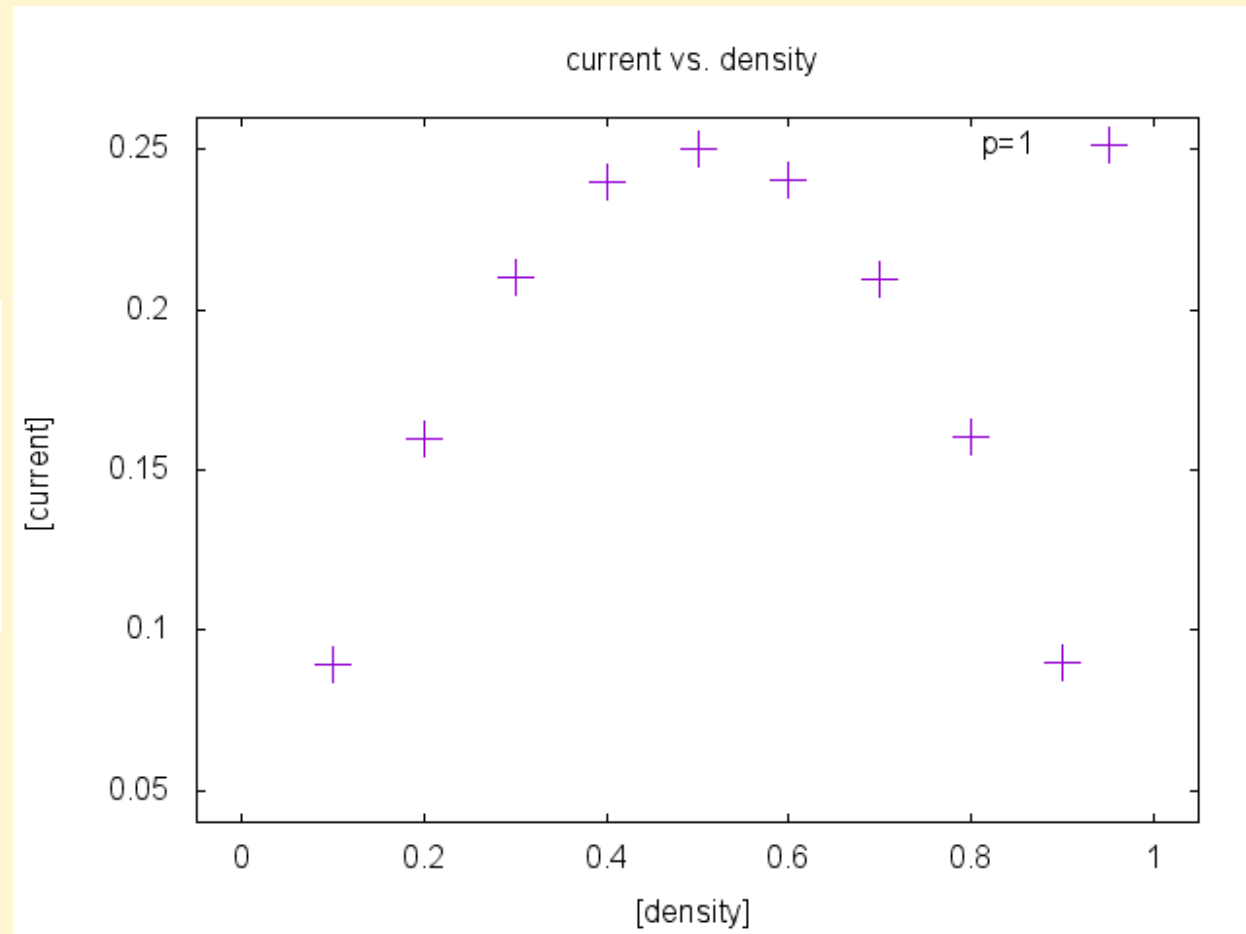


Total Asymmetric exclusion process with (a) periodic and (b) open-boundary conditions. The labels indicate the rates at which the various particle moves can occur.

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

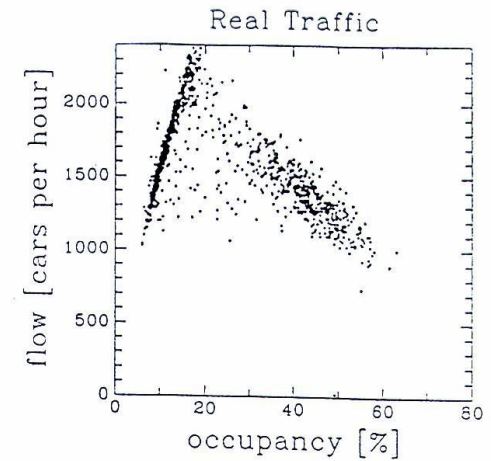
Numerická simulace

Při numerických simulacích se užívá náhodný sekvenční updating.

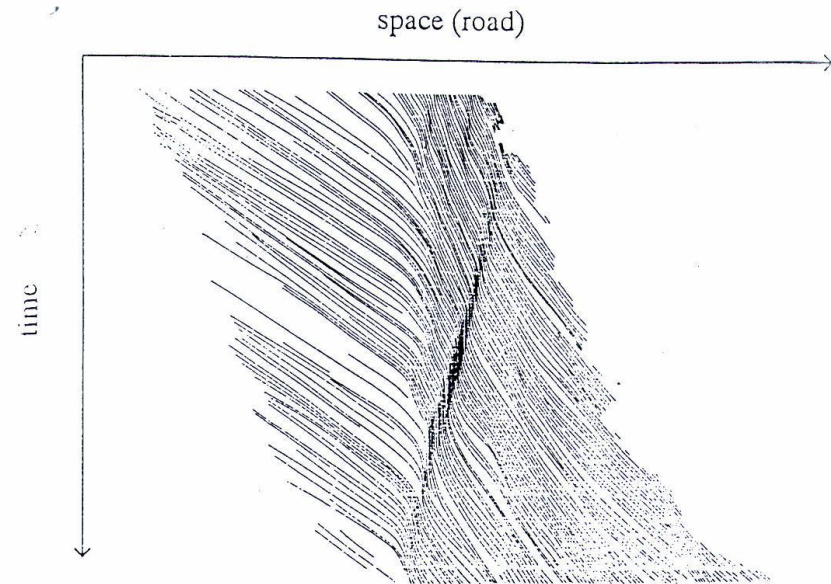


Data o skutečné dopravě

Cíl je maximální průjezdnost.
Ale vznikají zácpy.



Traffic flow q (in cars per hour) vs. occupancy (in cars per hour) from measured 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.

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.

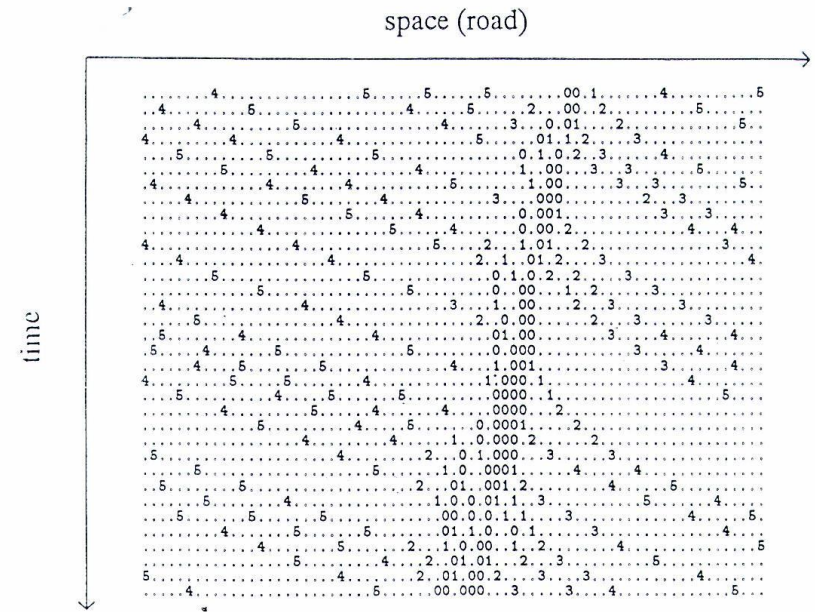
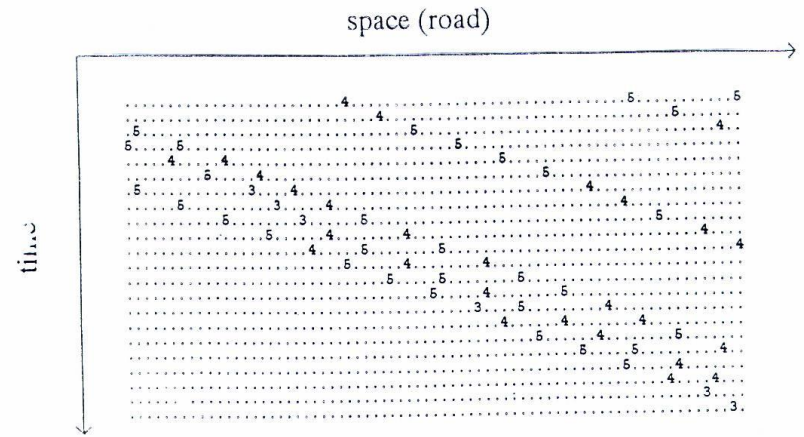
1. ZRYCHLENÍ: když auto jede menší než maximální rychlostí, pak jeho rychlost je zvýšena o jednotku, tj. $V \rightarrow V+1$, pokud $V < V_{max}$.
2. BRZDĚNÍ: každé auto se kontroluje, aby jeho vzdálenost k předchozímu autu byla menší než jeho rychlost, tj. když $L \leq V$, pak $V \rightarrow V-1$.
3. 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.

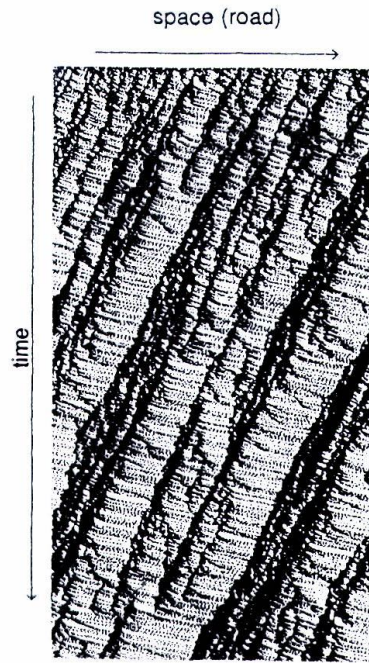
Zácpy se pohybují
proti směru jedoucích
vozidel.



Simulace Nagel- Schreckenbergova modelu

Zácpa se rozplyne,
když počet omezených
auta je nula.

Počet kroků t , než se
zácpa rozplyne, je
doba života zácpy.



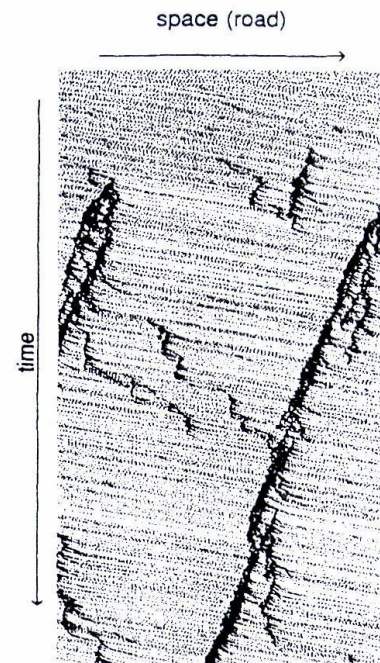
$v_{\max}=5$, parallel update

$$\rho = 0,3$$

rozdělení dob života

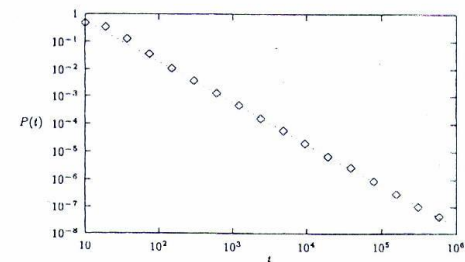
$$P(t) \sim t^{-\delta}$$

$$\delta = 1,5 \pm 0,01$$



$v_{\max}=5$, parallel update

$$\rho = 0,1$$



Lifetime distribution $P(t)$ for emergent jams in the outflow region; average over more than 65 000 clusters (avalanches). The dotted line has slope $-\frac{1}{2}$. Numerically imposed cutoff at $t = 10^6$.

Diagram dopravy

