

SIMULACE VE FYZICE MNOHA ČÁSTIC

NTMF021, ZS - 3/1 Z+Zk

Miroslav Kotrla a Milan Předota

externě: UTF UK

kmenově:

Oddělení teorie
kondenzovaných látek
FZÚ AV ČR, Praha 8

Ústav fyziky a biofyziky
Přírodovědecká fakulta JU
České Budějovice

kotrla@fzu.cz

predota@prf.jcu.cz

Obsah a cíl

Přednáška 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**.

Přednášky MK na ÚTF

SIMULACE VE FYZICE MNOHA ČÁSTIC

NTMF021, 3/1 Z+Zk,- ZS **Kotrla & Předota**

POKROČILÉ SIMULACE VE FYZICE MNOHA ČÁSTIC - jen v lichých rocích

NTMF024, 2/0 Zk, – LS **Kotrla & Předota**

APLIKACE STATISTICKÉ FYZIKY

NTMF049, 2/0 Zk - LS **Kotrla & Slanina**

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

POKROČILÉ SIMULACE VE FYZICE MNOHA ČÁSTIC

**Simulace složitých,
nerovnovážných
a kvantových jevů**

NTMF024 LS

Miroslav Kotrla & Milan Předota

kotrla@fzu.cz

predota@prf.jcu.cz

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**
- **Metoda Monte Carlo (MC): problém perkolace, výpočet určitých integrálů, ...**
- **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

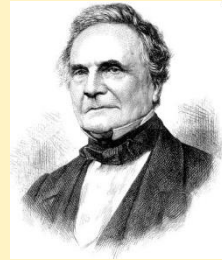
- Charles Babbage (1791-1871)

nápad sestavit programovatelný stroj

Analytical Engine 1837



1822 difference engine



- ENIAC 1942-1947, University Pennsylvania

18 000 elektronek !!!

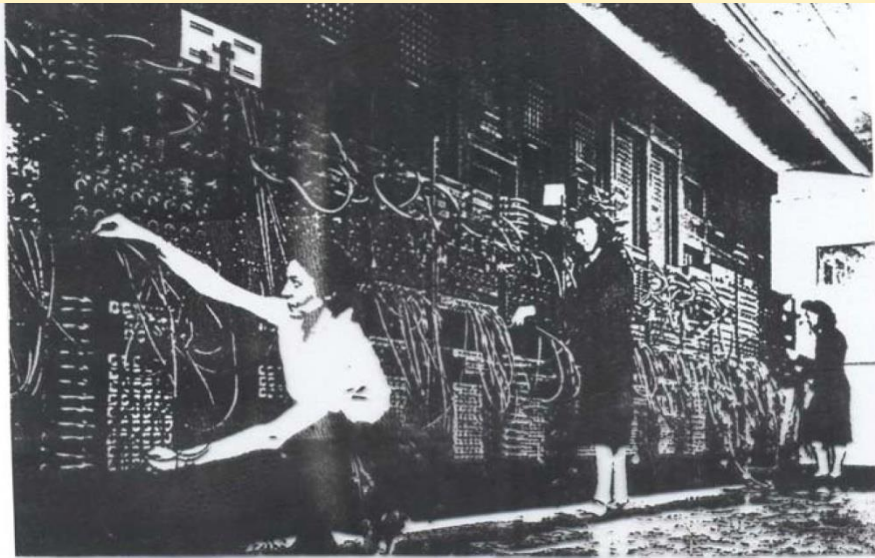


Fig. 1. Programming panels and cables of the Eniac. (Courtesy of N. Metropolis.)

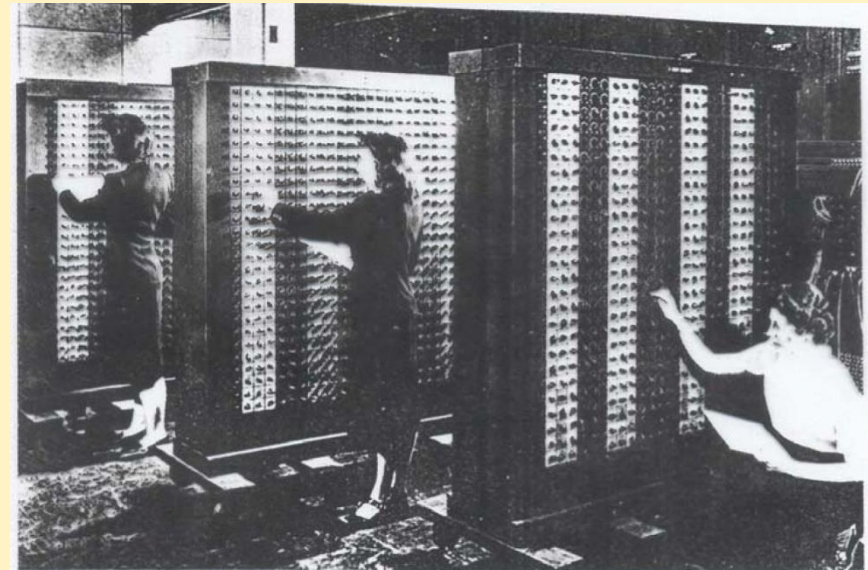


Fig. 2. Function tables of the Eniac. (Courtesy of N. Metropolis.)

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

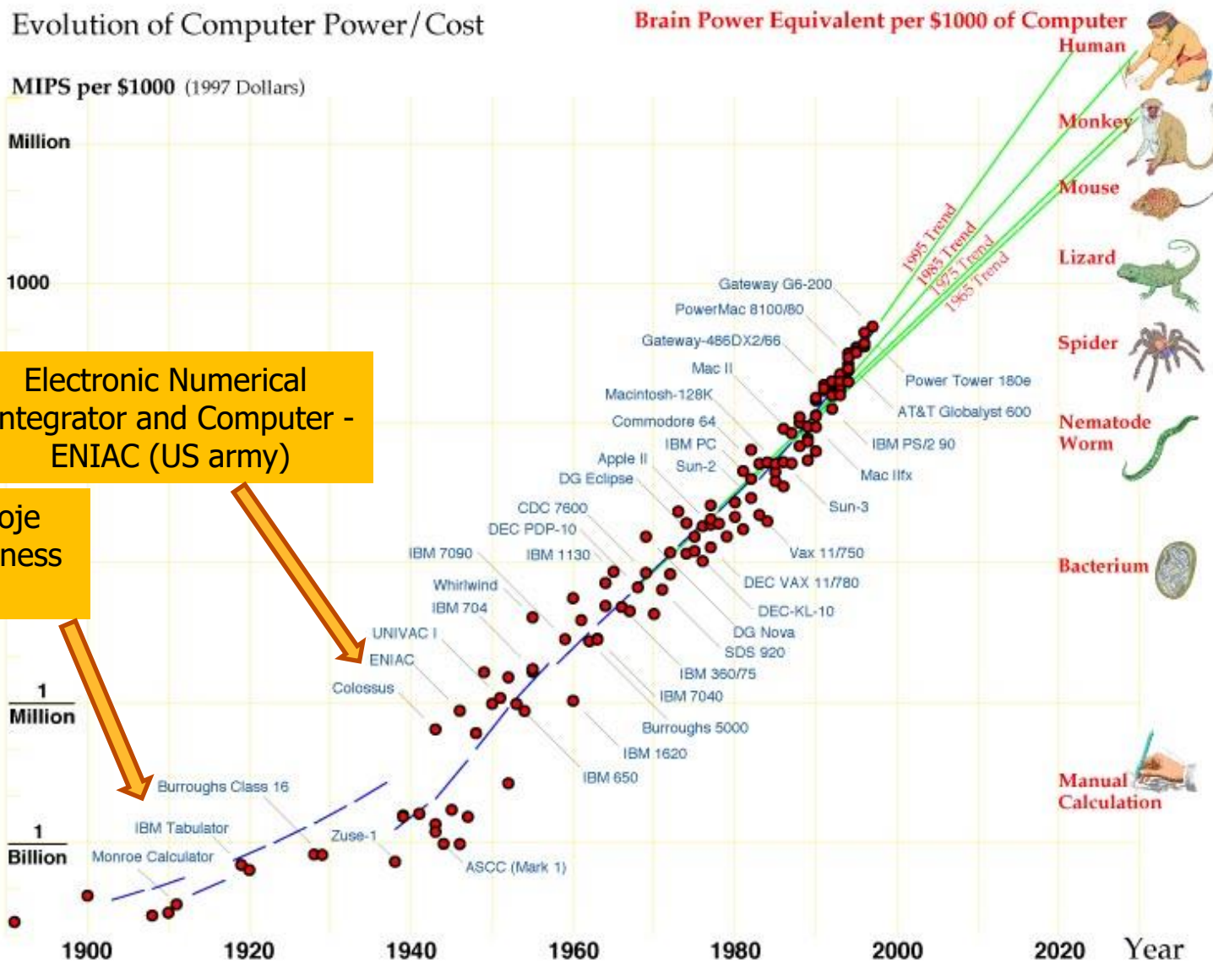
Spider

Nematode

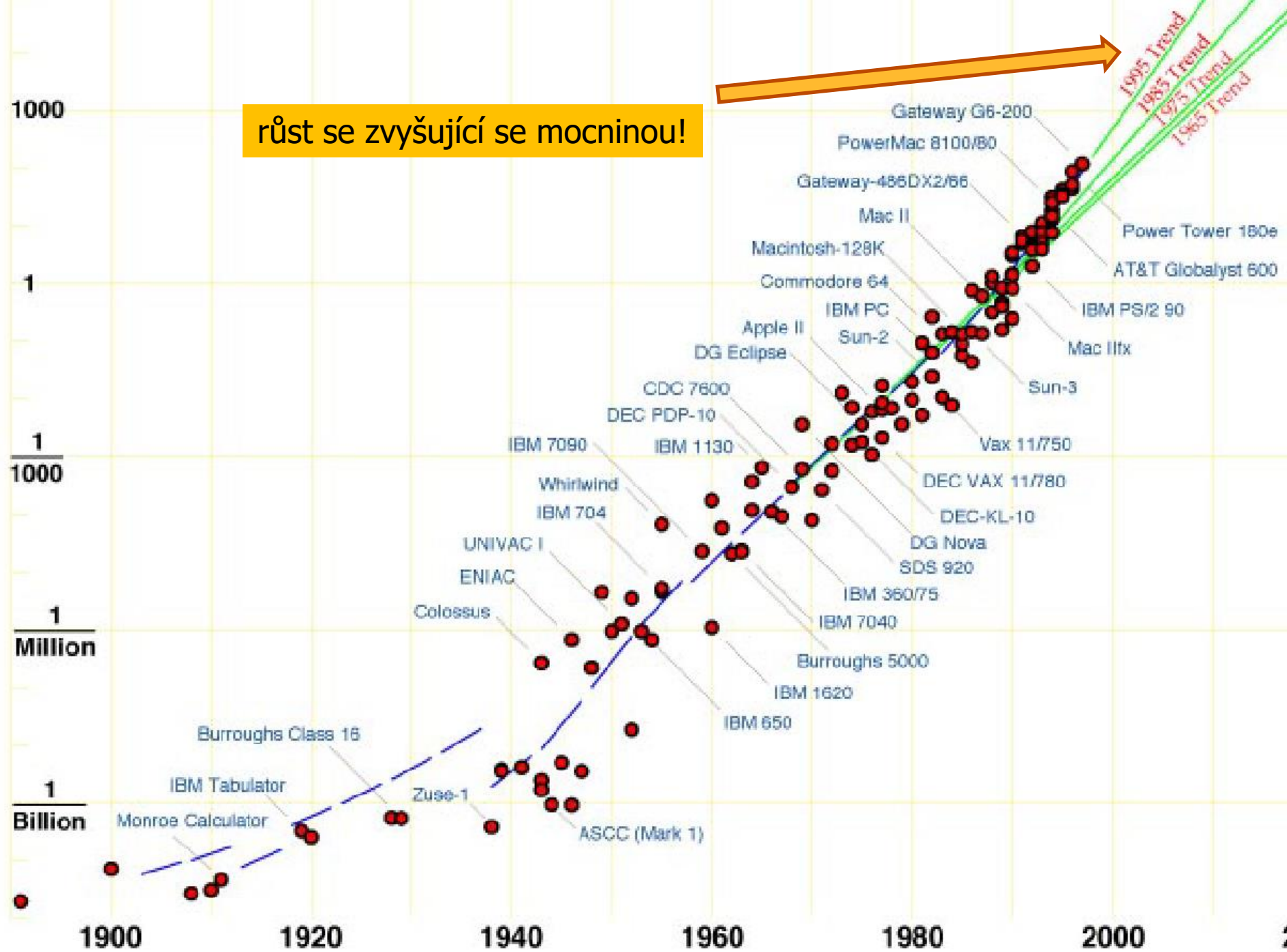
Worm

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

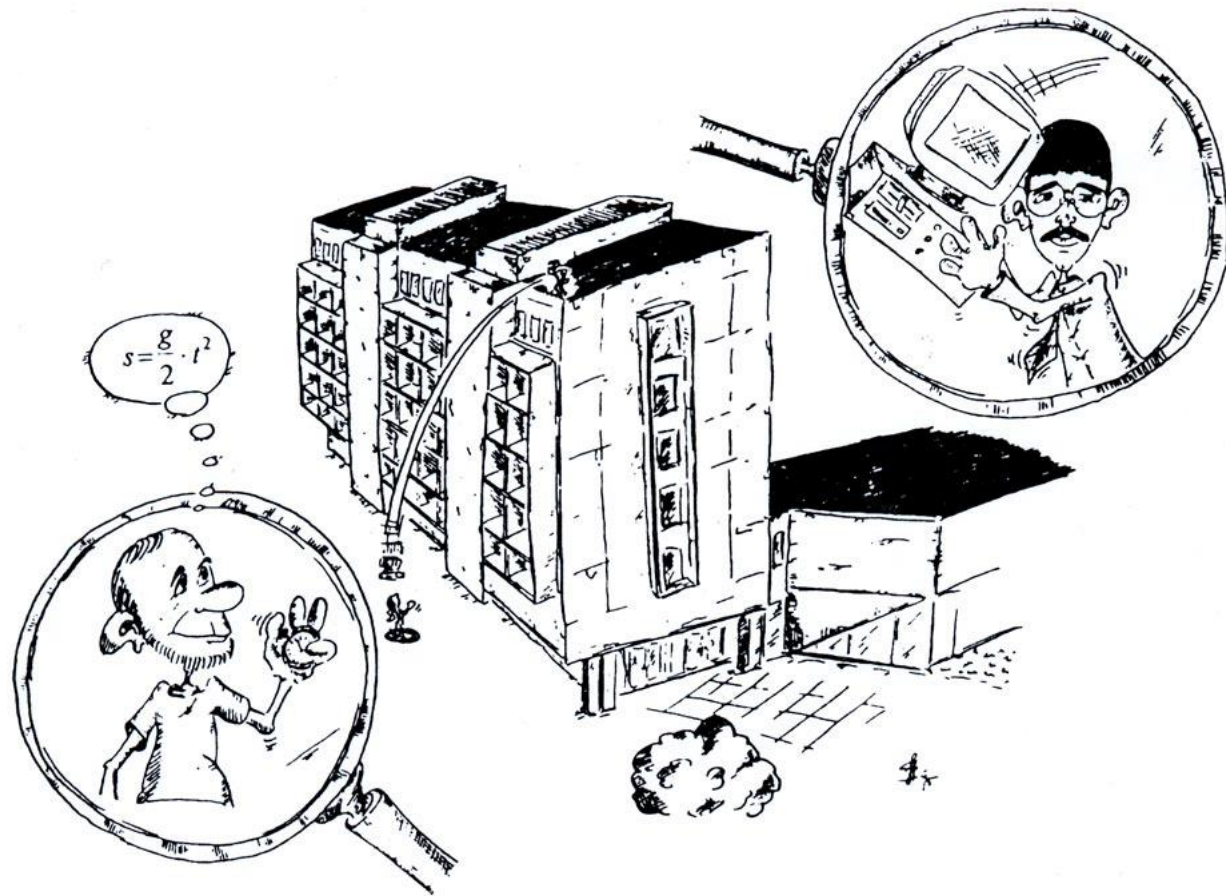
Úloha počítačových simulací



Úloha počítačových simulací



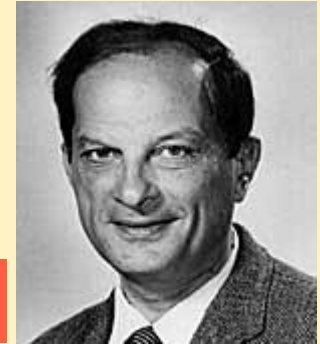
Experiment s počítačem



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

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

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

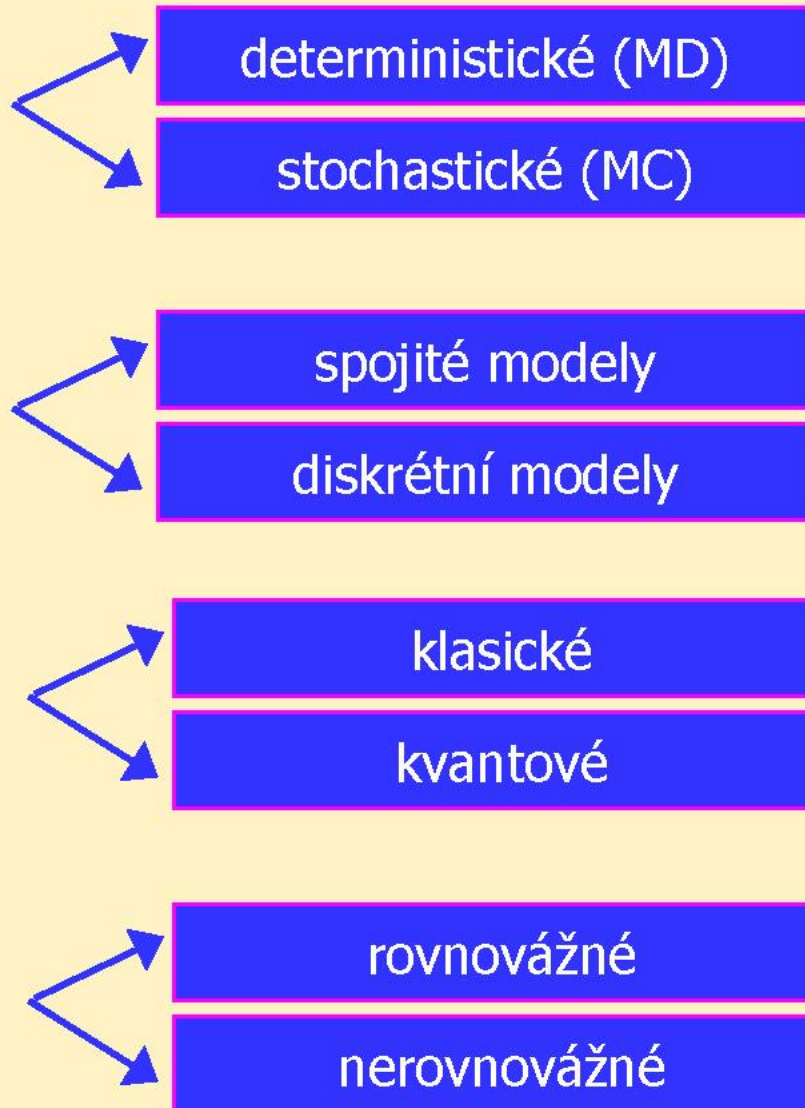
Srovnání MC a MD

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



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)

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)

mikroskopický pohyb atomů/molekul, rovnice proudění etc.

např. pro laplaceovský růst – komplikovaná 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

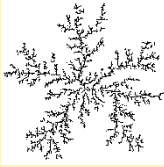
např. rychlost růstu krystalu

Nestabilita při laplaceovském růstu

Růst pevné látky z podchlazené tekutiny

- soustava rovnic
- pohyblivé hraniční podmínky
- nestabilita

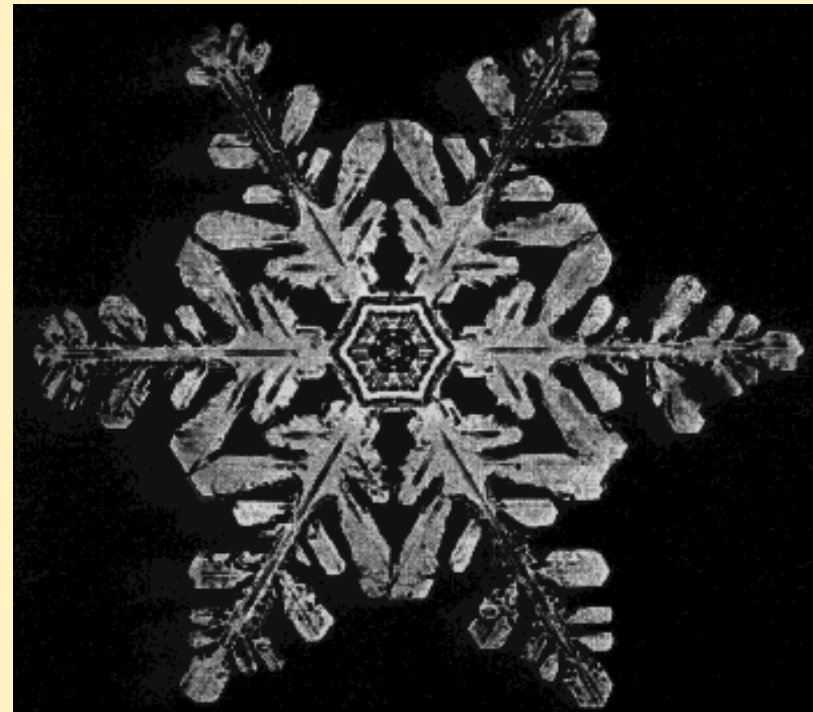
Diffusion limited aggregation (difúzí omezená agregace)



A DLA klastr vzniklý při elektrodpozici z roztoku sulfatu mědi

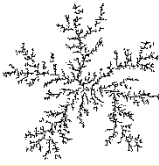


jedna z forem sněhové vločky



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

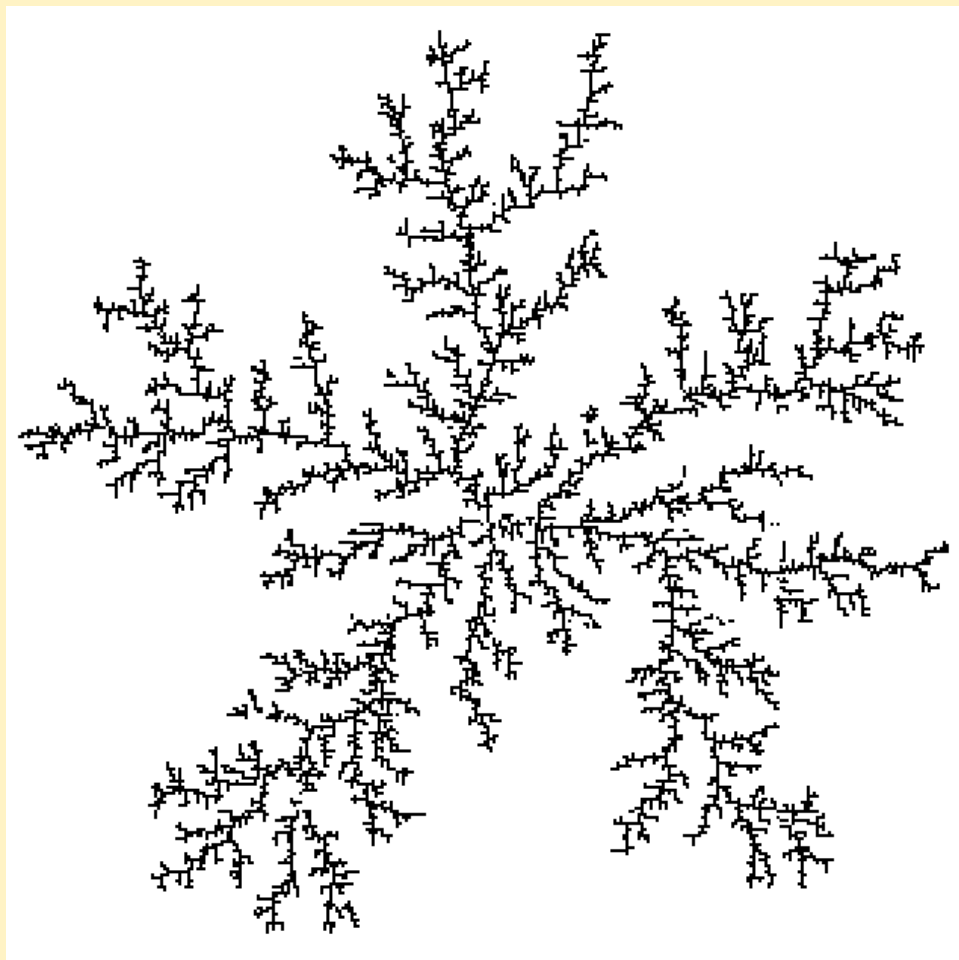
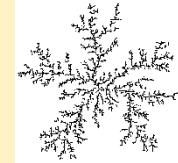
<http://classes.yale.edu/fractals/panorama/physics/dla/DLA.html>

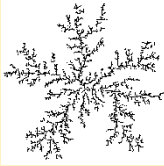


Fraktální dimenze

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

Fraktální objekty vzniklé růstem





Úloha DLA (diffusion limited agregation)

Fraktální dimenze vytvořeného klastru

Uvažujte čtvercovou mřížku v rovině. Vrcholy buď jsou nebo nejsou obsazeny molekulou. Na začátku simulace je jedna molekula uprostřed mřížky.

Nová molekula se objeví na náhodně vybraném vrcholu na obvodu mřížky. Molekula náhodně difunduje do té doby, než dosáhne vrcholu, který sousedí s nějakým již obsazeným vrcholem. A usadí na povrchu vznikajícího klastru. **Připojení je nevratné.**

Jeden krok simulace popisuje difúzi molekuly z velké vzdálenosti až do okamžiku, kdy se

Tento proces se pak **opakuje**, až se vytvoří **dostatečně veliký klastr**. Určete fraktální dimenzi vytvořeného klastru.



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. $R_{\text{start}} = R_{\max} + 1$)

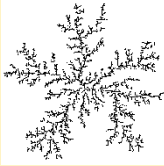
3. Diffusion

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

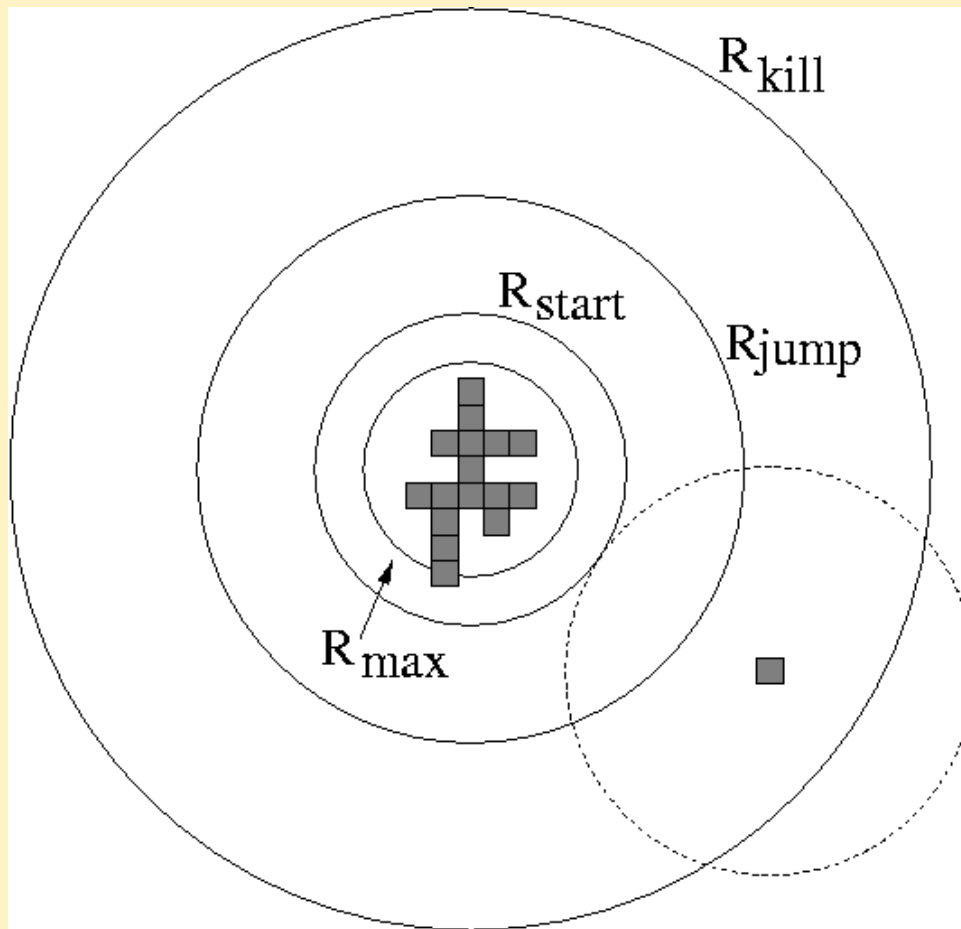
4. Aggregation

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.

Algoritmus pro DLA)

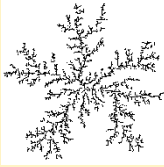


(difúzí omezená agregace)



Witten and Sander (1981)

Diffusion Limited Aggregation (DLA)



3. Diffusion (shortcuts)

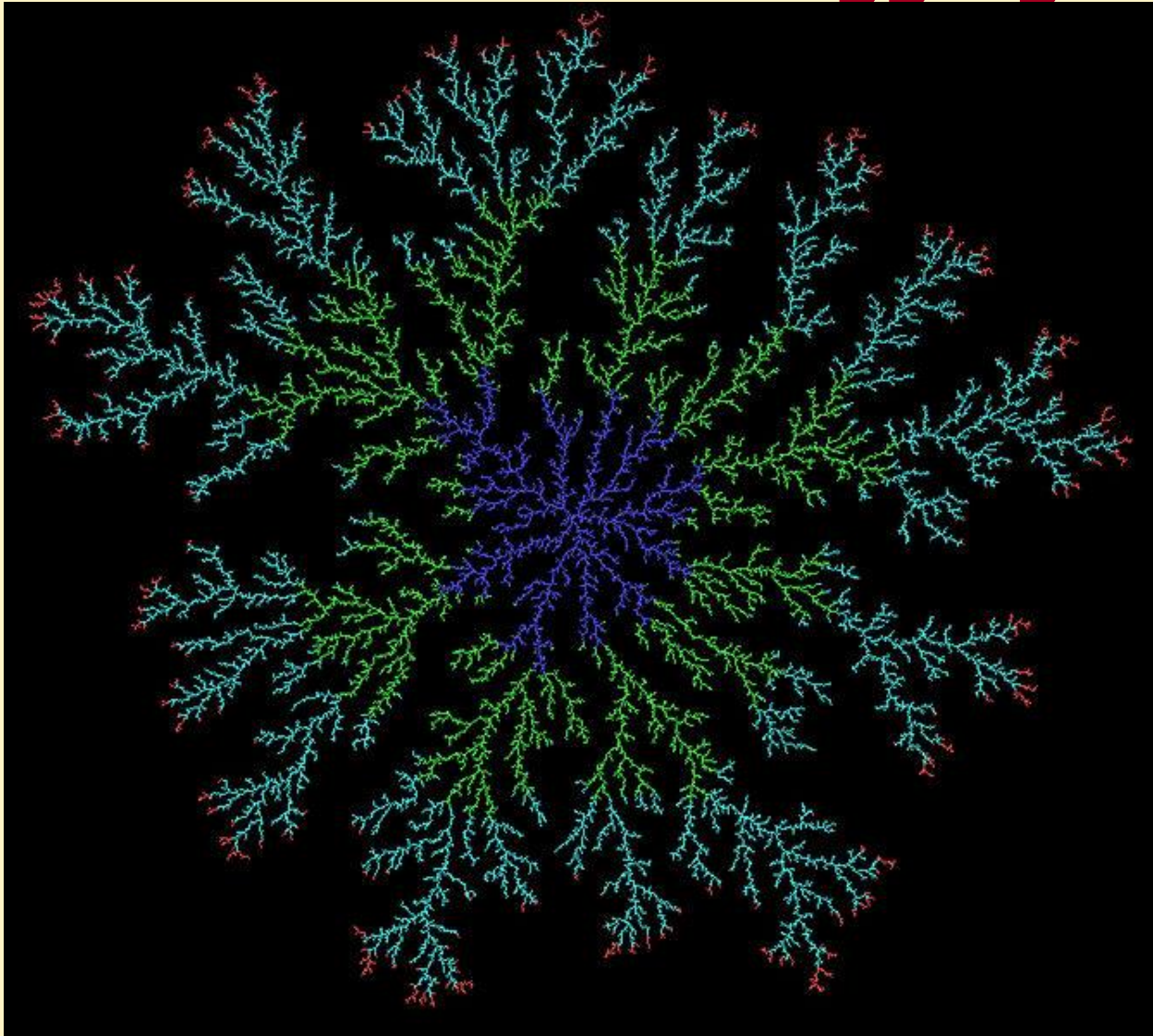
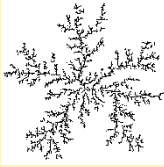
calculate the current distance r of the particle from the origin.

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.

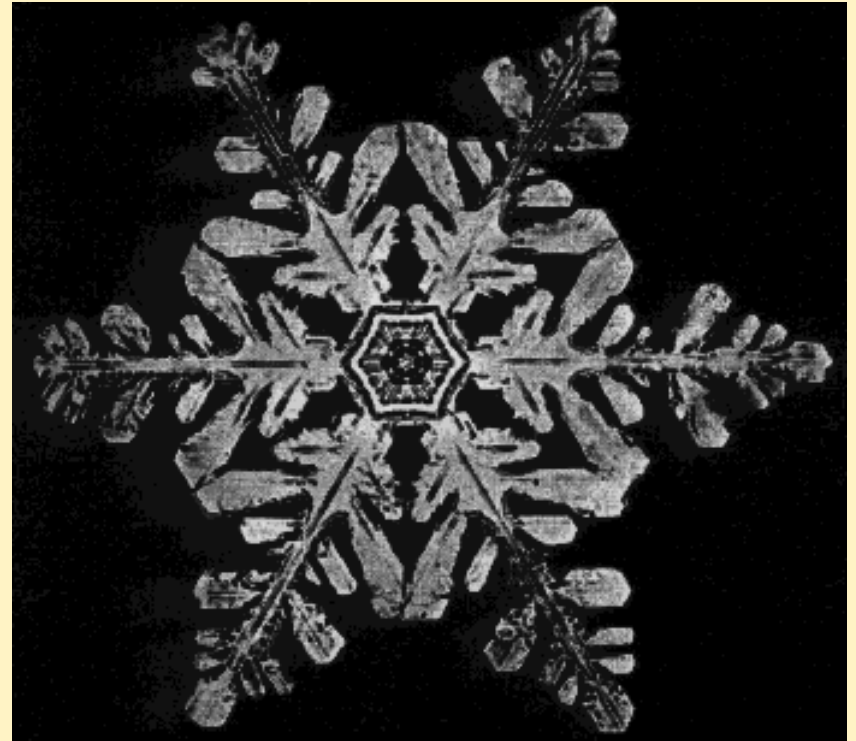
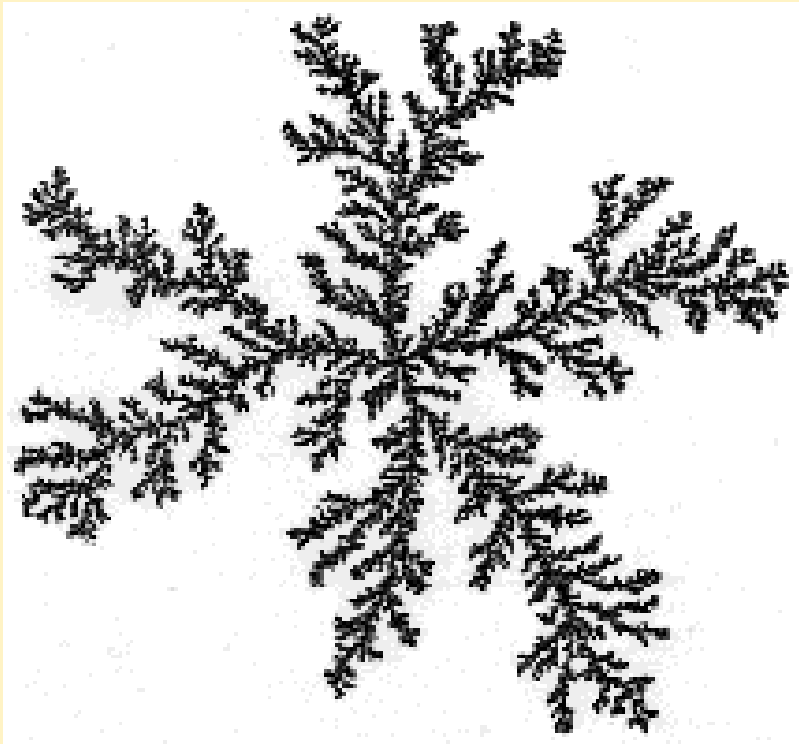
Diffusion Limited Aggregation (DLA)



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>

Studium časových závislostí pomocí metody Monte Carlo

Kinetické Monte Carlo

- střední hodnoty veličin jsou **určeny jako časové středování konfigurací**
- časové intervaly jsou generovány náhodně

**Posloupnost generovaných konfigurací se
interpretuje jako jedna realizace časového vývoje**

Vhodná pro spojité i diskrétní systémy, spojité i
nespojité potenciály

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

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.

Monte Carlo

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

Typy MC simulací

- a) Geometrické MC
- b) MC integrace
- c) Termodynamické MC
- d) Modelování vývoje na strukturální úrovni
- e) Výpočet kinetických koeficientů (KMC)

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.

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 $R(A,B,C,...)$

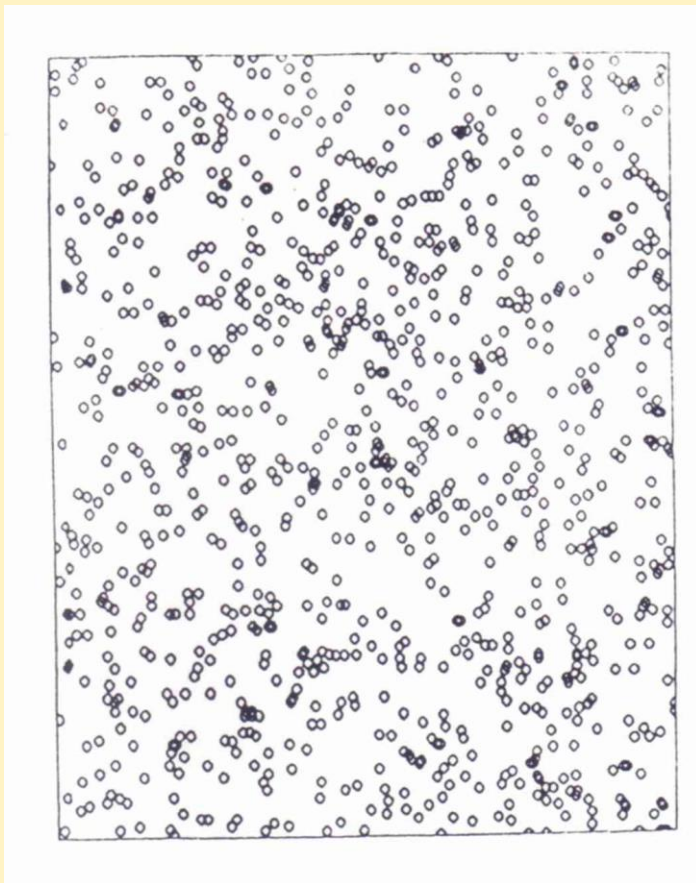
Náhodná čísla - pokračování

- příklady generátorů
- kombinace generátorů
- testy generátorů

- rovnoměrné rozdělení
v určitém intervalu

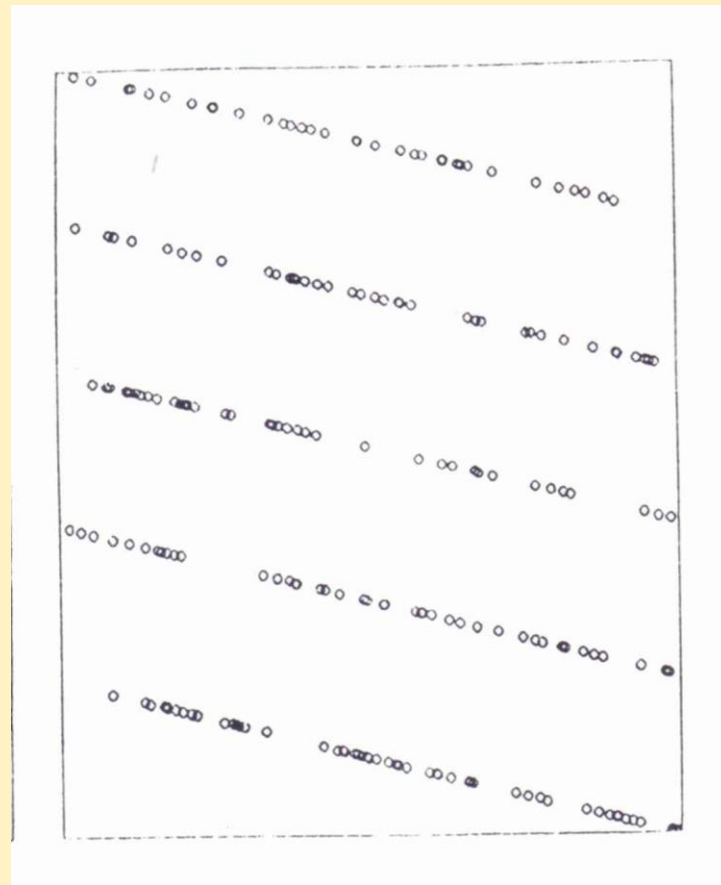
Testy generátorů

Y



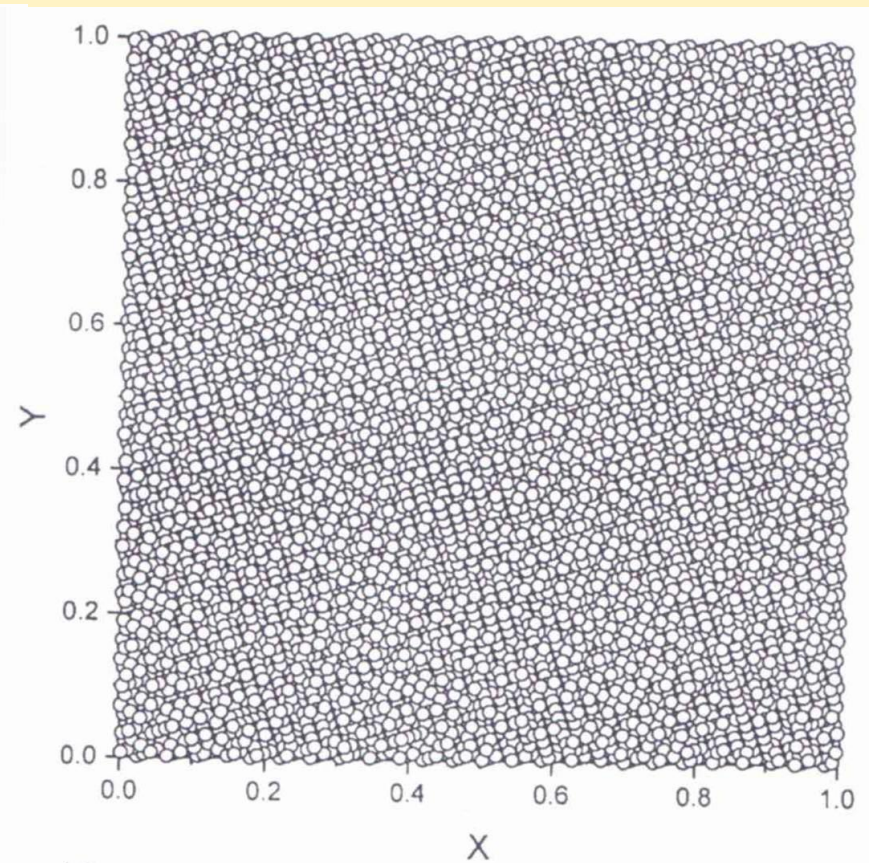
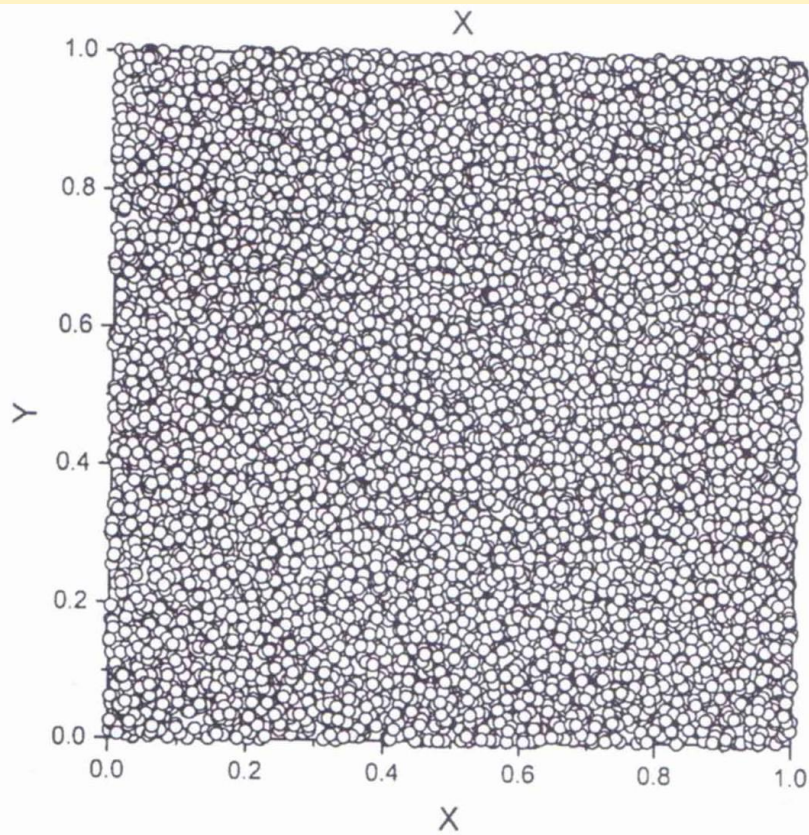
X

Y



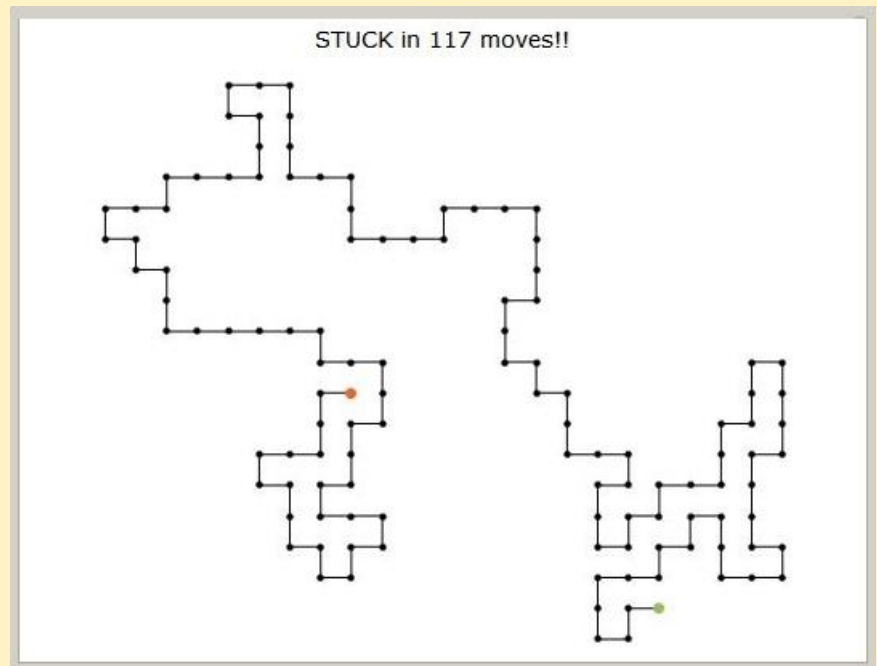
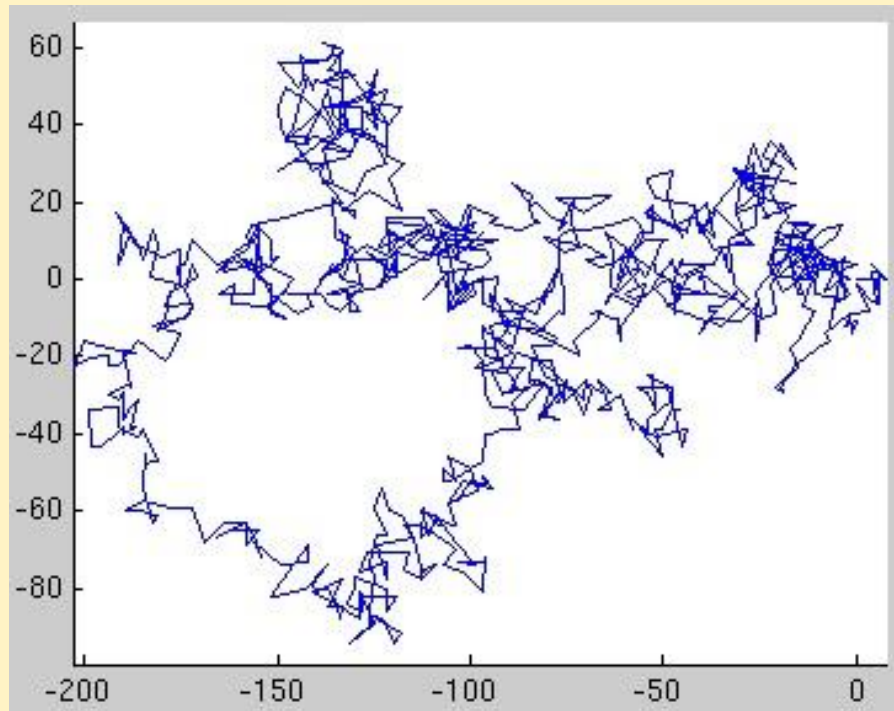
X

Testy generátorů



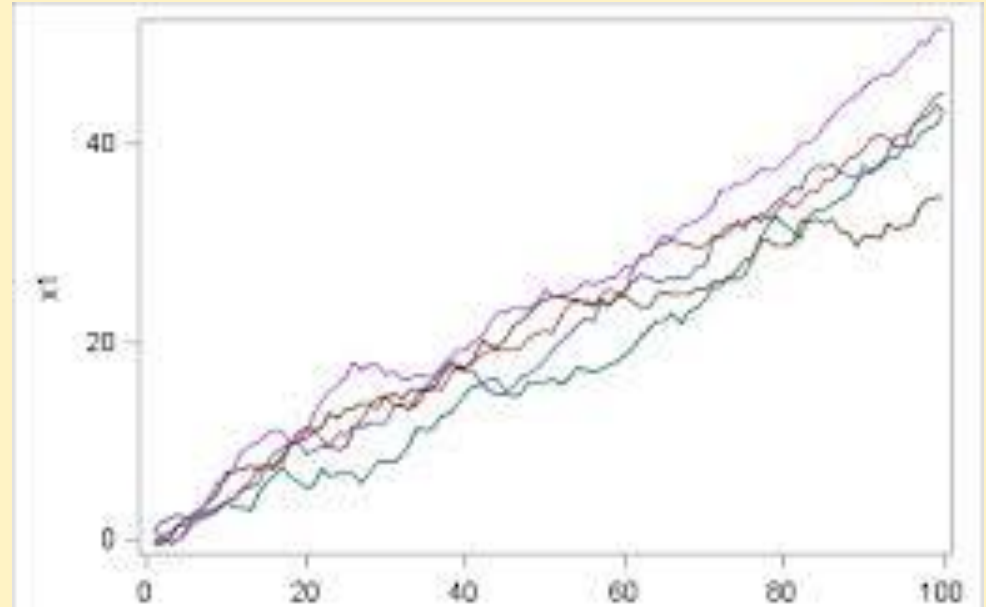
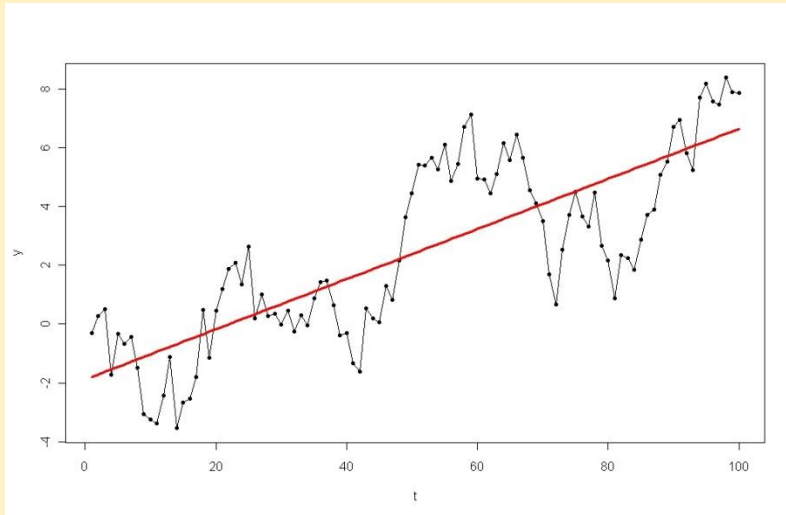
Náhodné procházky

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



Náhodné procházky

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

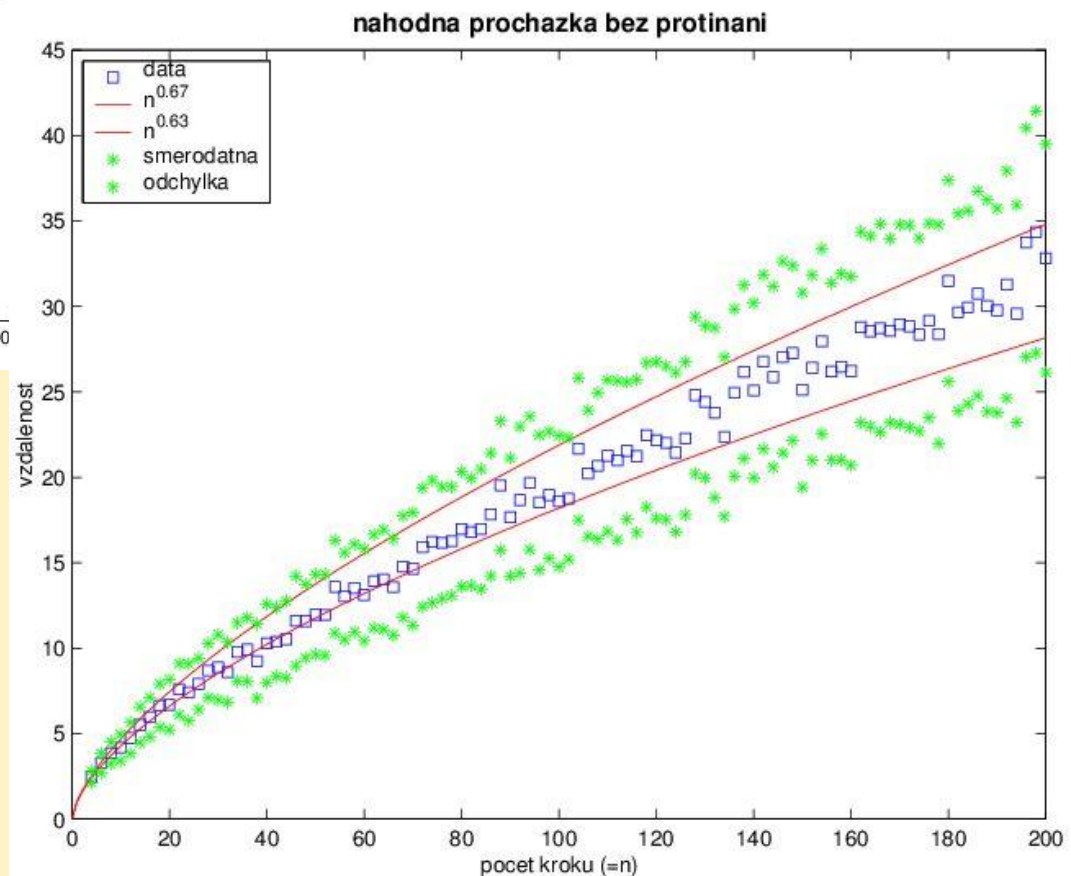
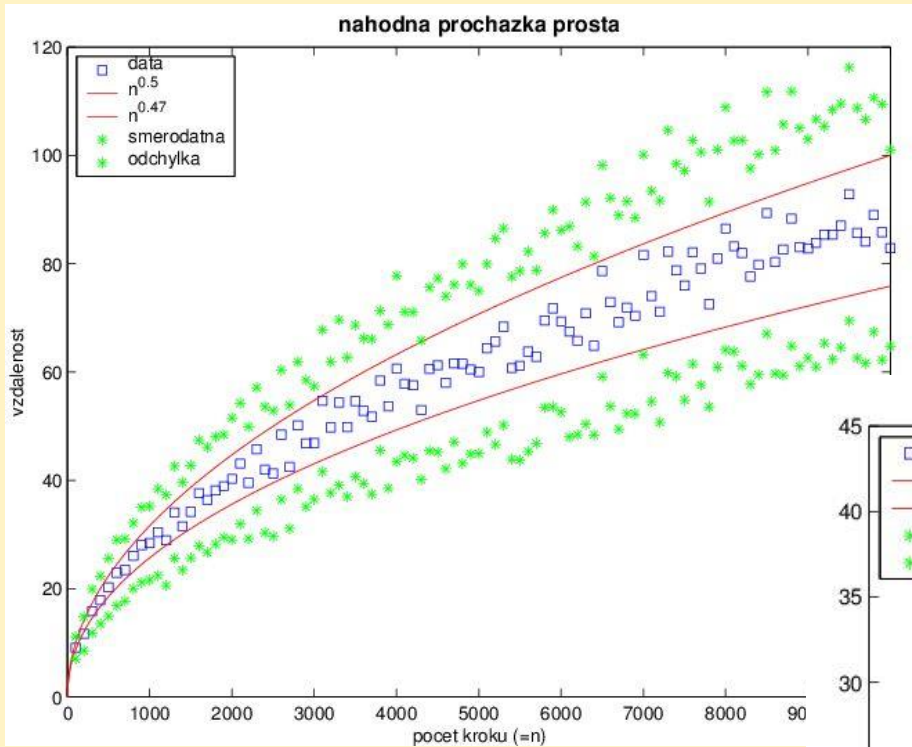


Různé běhy je třeba vystředovat a pak závislost fitovat.

Určit exponent α v $R \sim t^\alpha$.

Náhodné procházky - řešení

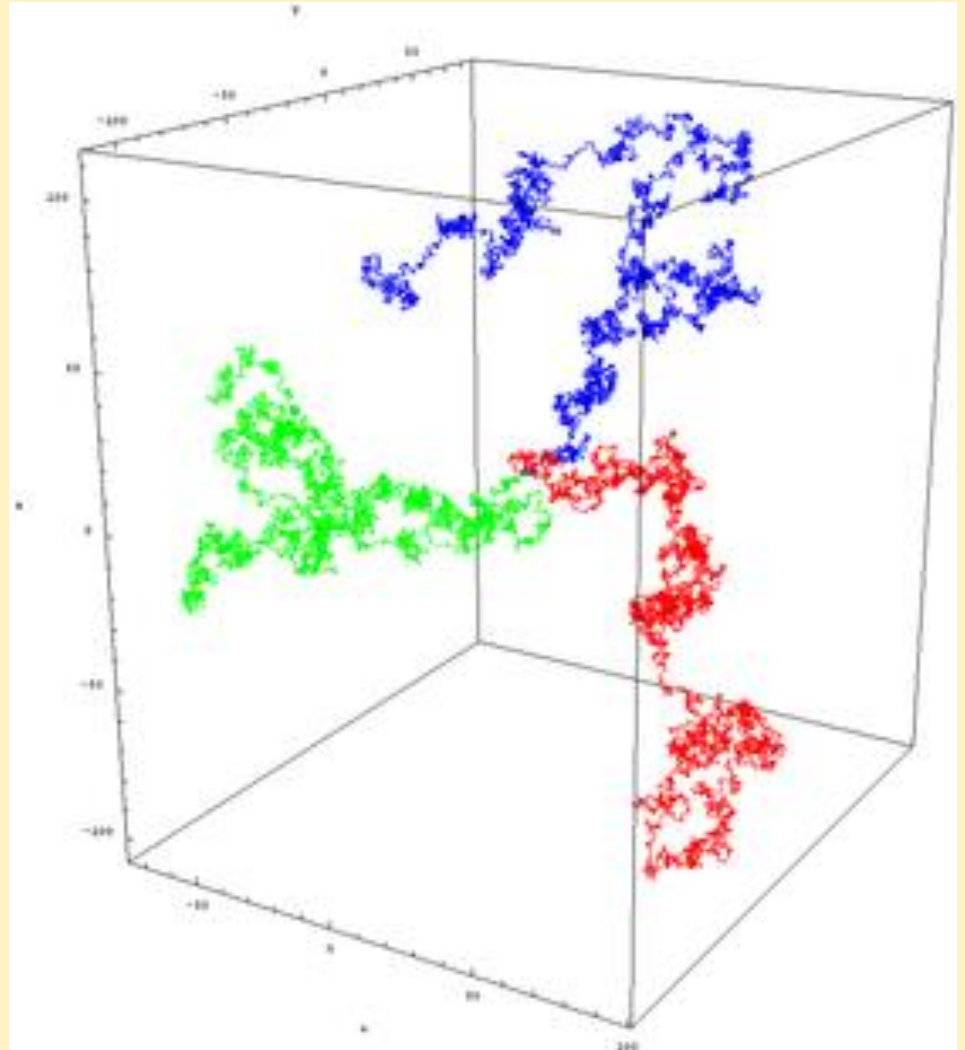
p. Psíkal



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

Cvičení

Metacentrum Virtuální organizace

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

Výpočetní a datové prostředky dostupné ve Virtuální organizaci jsou zčásti dedikované pro jejich vlastníky a zčásti volně přístupné s prioritním přístupem pro vlastníky.

Pravidla využití

Členství v MetaCentru je bezplatné pro akademické pracovníky a studenty členů sdružení CESNET, pouze se požaduje ocenění využití prostředků MetaCentra v publikacích uživatelů, nejlépe formou poděkování.

Metacentrum

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

Registrace: - vyplnit přihlášku,
info o sobě, volba uživatelského jména a hesla

Přihlášení znamená projití autentizačním
mechanismem eduID.cz

Potřebné programy pro práci:
pro připojení na vzdálený linux (ssh, scp z linuxu,
Putty, WinSCP, Xming z MS Windows)

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.

Presentace bude na:

Pod stránce přednášky

Simulace ve fyzice mnoha částic

http://kotrla.fzu.cz/?page_id=76

pod položkou

Presentace - úvodní přednáška