

MC úlohy k přednášce NTMF021 pro ZS 2014/2015

Úlohy k simulacím MC: I geometrické problémy a integrace

I-1 Uzlová perkolace – práh perkolace

Určete práh uzlové perkolace pro danou mřížku. Pomocí výpočtu pravděpodobnosti existence perkolačního klastru (tj. spanning klastru) v závislosti na pravděpodobnosti p obsazení uzlu pro různé velikosti L mřížky odhadněte práh perkolace p_c .

Základní varianta: Uvažujte čtvercovou mřížku $L \times L$ pro $L = 16, 32, 64, 128 (\dots)$. Určete práh perkolace jako průsečík funkci pro různé velikosti.

Bonus . - Proveďte totéž pro trojúhelníkovou nebo šestiúhelníkovou mřížku.

I-2 Uzlová perkolace – rozdělení klastrů

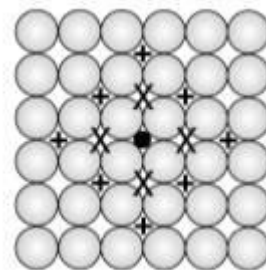
Úžitím Hoshen-Kopelmanova algoritmu spočtete rozdělení velikostí klastrů při uzlové perkolaci. Uvažujte čtvercovou mřížku $L \times L$ s $L = 64$, pro pravděpodobnosti p v okolí prahu perkolace. Vyneste střední hodnotu hmotnosti klastru (druhý moment rozdělení velikostí klastrů) jako funkci pravděpodobnosti p v okolí prahu perkolace.

I-3 * Perkolace uzlů s blokujícím okolím

Motivace: Při studiu difúze atomů Al na povrchu Al byl pozorován dramatický vliv přítomnosti kyslíkových nečistot, velmi malé množství vede k potlačení difúze [C. Polop et al. Surface Science **575** (2005) 89]. Je známo, že kyslíkové atomy O jsou (při studované teplotě) nepohyblivé a že Al-O interakce je krátko-dosahová a repulsivní. To vede při určité koncentraci kyslíku c_O ke vzniku kompaktní sítě blokováných uzlů, na nichž Al atomy nejsou pozorovány.

Simulujte situaci užitím následujícího modelu: na čtvercové mřížce se deponují nečistoty o koncentraci c_O (každá nečistota na jednom uzlu, tj. nemohou se deponovat na sebe). Krátko-dosahová repulsivní interakce se v nejhrubším přiblížení popíše blokováním (zakázáním) uzlů v nejbližším okolí (uzel obsazený nečistotou je též blokován). Určete práh perkolace pro koncentraci c_O , kdy dojde k perkolaci blokováných uzlů. Uvažujte dvě varianty (viz obr.) s 5 resp. s 13 blokovánými uzly. Poznámka: blokované uzly pocházející od různých nečistot se mohou překrývat.

Srovnajte získané výsledky s známou hodnotou prahu uzlové perkolace. Jak lze získané výsledky vysvětlit?



I-4 Srovnání typů náhodných procházek

Simulujte náhodnou procházku na dvou-dimenzionální čtvercové mřížce. Měřte 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, a udejte chyby získaných exponentů.

I-5 Náhodné procházky ve třech dimenzích

Simulujte náhodné procházky na tří-dimenzionální prosté kubické mřížce. Měřte závislost vzdálenosti počátečního a koncového bodu na počtu kroků pro dva typy procházek: prostá náhodná procházka a procházka bez protínání. Středuje přes více běhů. Srovnajte funkční závislosti pro oba typy procházek a diskutujte srovnání se situací ve dvou dimenzích.

I-6 Výpočet funkce v jedné dimenzi pomocí MC

Vykreslete funkci $I(x)$ danou integrálem $I(x) = \int_0^x \sin^2 \frac{1}{y} dy$ v intervalu od $x = -1$ do $x = 1$.

Úlohy k simulacím MC: II termodynamické problémy

II-1 Isingův model - 2D

Proveďte MC simulaci Isingova feromagnetu s nulovým magnetickým polem Metropolisovou metodou na čtvercové mřížce 20×20 s periodickými okrajovými podmínkami. Vyneste energii a magnetizaci jako funkci teploty. Soustředte se na oblast bifurkace v okolí kritické teploty. Opakujte výpočty pro systém 40×40 nebo větší a analyzujte závislost výsledků na velikosti systému. Návod: střeďte zvlášť obě větve magnetizace.

II-2 Isingův model – měrné teplo

Proveďte MC simulaci Isingova feromagnetu s nulovým magnetickým polem Metropolisovou metodou na čtvercové mřížce 20×20 s periodickými okrajovými podmínkami. Vyneste magnetizaci a měrné teplo jako funkci teploty. Odhadněte kritickou teplotu. Opakujte výpočet pro systém 40×40 nebo větší a analyzujte závislost výsledků na velikosti systému.

II-3 *Isingův model - 3D

[relativně obtížná úloha]

Napište program pro MC simulaci Isingova feromagnetu s nulovým magnetickým polem Metropolisovou metodou na kubické mřížce s periodickými okrajovými podmínkami. Monitorujte energii a celkovou magnetizaci. Proveďte termální cyklus: pomalý ohřev z nízké teploty na vysokou a zpátky. Všimněte si hystereze. Podaří se vám odhadnout teplotu a druh fázového přechodu?

II-4 Tekutina s pravoúhlým potenciálem

Simulujte metodou MC tekutinu s pravoúhlým potenciálem v periodických okrajových podmínkách, průměr koulí zvolte $\sigma=1$, dosah atrakce $\lambda=1.5$, zlomek stěsnání $\eta=0.35$, teplotu $T^*=1.2$. Počítejte průměrnou energii a párovou korelační funkci. Extrapolujte hodnoty PCF v bodě nespojitosti potenciálu $g(\lambda^+)$, $g(\lambda^-)$.

II-5 Tekutina s trojúhelníkovým potenciálem

Simulujte metodou MC tekutinu s trojúhelníkovým potenciálem v periodických okrajových podmínkách, průměr koulí zvolte $\sigma=1$, dosah atrakce $\lambda=1.5$, zlomek stěsnání $\eta=0.35$, teplotu $T^*=1.2$. Počítejte průměrnou energii a párovou korelační funkci.

II-6 Tekutina tuhých koulí mezi zdmi

Simulujte tuhé koule v periodických okrajových podmínkách ve dvou rozměrech a neperiodických ve třetím rozměru rozměru. Počítejte hustotní profil – hustotu jako funkci polohy mezi zdmi. Zvolte zlomek stěsnání $\eta=0.35$ počítaný z celkového objemu. Extrapolujte kontaktní hodnotu hustotního profilu.

II-7 Tekutina tuhých koulí

Simulujte tuhé koule v periodických okrajových podmínkách. Počítejte párovou korelační funkci a extrapolujte její kontaktní hodnotu $g(\sigma^+)$. Vyneste do grafu závislost $1+4\eta g(\sigma^+)$ vs. η pro $\eta=0.20, 0.30, 0.35$ a 0.40 .

II-8 Směs tuhých koulí

Simulujte směs tuhých koulí v periodických okrajových podmínkách s $N_1=N_2$ a $\sigma_1/\sigma_2=2$. Počítejte párovou korelační funkci g_{11}, g_{12}, g_{22} pro $\eta=\pi/6V^*(N_1\sigma_1^3 + N_2\sigma_2^3)=0.30$.

II-9 Lennard-Jonesova tekutina

Simulujte metodou MC LJ potenciál při $T^*=0.8$ a $\rho^*=0.8$. Měřte průměrnou energii a párovou korelační funkci. Započítejte dlouhodobé korekce energie a simulaci proveďte pro různé hodnoty dosahu potenciálu (cutoff) $r_c=2.0 \sigma$, $r_c=2.5 \sigma$ a $r_c=3.0 \sigma$.

II-10 Relaxace Lennard-Jonesovy tekutiny

Zekvilibrujte LJ s cutoff= 2.5σ , $\rho^*=0.8$ při teplotě $T^*=1.2$. Tato konfigurace slouží jako počáteční pro následné studium relaxace systému do jiné teploty.

Úkolem je tedy začít s výše uvedenou počáteční konfigurací a provést krátké MC při teplotě $T^*=0.2$. Sledujte časový vývoj (relaxaci) okamžité energie k nové ustálené hodnotě a porovnejte výsledky pro různě velká zkušební posunutí, která poskytují různý zlomek přijetí. Mělo by být vidět, že zlomek přijetí kolem $1/3$ dává nejrychlejší relaxaci.

P.S. Vylepšení: Bylo by nejlepší začít z jedné vysokoteplotní konfigurace ($T^*=1.2$) a relaxaci zopakovat vždy několikrát s jinou sekvencí náhodných čísel, aby se mohl časový vývoj energie zprůměrovat přes několik realizací.

II-11 Susceptibilita pro 2D Isingův model

Proveďte MC simulaci Isingova feromagnetu s nulovým magnetickým polem Metropolisovou metodou na čtvercové mřížce s periodickými okrajovými podmínkami. Vyneste susceptibilitu a magnetizaci jako funkci teploty pro dvě velikosti systému 10×10 a 40×40 .

II-12 Kritická teplota 2D Isingova modelu pomocí kumulantů

Proveďte MC simulaci Isingova feromagnetu s nulovým magnetickým polem Metropolisovou metodou na čtvercové mřížce s periodickými okrajovými podmínkami. Odhadněte kritickou teplotu pomocí průsečíku kumulantů čtvrtého řádu.

II-13 * Kritická teplota 2D Isingova modelu z divergence specifického tepla

Proveďte MC simulaci Isingova feromagnetu s nulovým magnetickým polem Metropolisovou metodou na čtvercové mřížce s periodickými okrajovými podmínkami. Počítejte specifické teplo jako funkci teploty pro různé velikosti systému 10×10 až 80×80 . Určete teploty pro polohy maxim specifického tepla pro jednotlivé velikosti systému. Následně extrapolací pro nekonečný systém spočítejte kritickou teplotu.

Úlohy k simulacím MC: III nerovnovážné problémy

III-1 – Modelování růstu v 1+1 D

Simulujte růst sedimentu na rozhraní pomocí mřížkového modelu s relaxací do nejbližších sousedů. Měřte vývoj hrubosti rozhraní v závislosti na čase.