

SIMULACE VE FYZICE MNOHA ČÁSTIC

NNTMF021, 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 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 Mnohočásticové
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 SFMC1.

Přednášky MK na ÚTF

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

SIMULACE VE FYZICE MNOHA ČÁSTIC

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

POKROČILÉ SIMULACE VE FYZICE MNOHA ČÁSTIC

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

APLIKACE STATISTICKÉ FYZIKY I

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

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**
- **Realizace MD**
- **Měření termodynamických a strukturních veličin**
- **Simulace v různých souborech**

Pro zkoušku

Dvě úlohy

- ✓ jedna z MC
- ✓ jedna z MD

Pro zápočet

Účast na cvičeních

Úlohy

Geometrické Monte Carlo nebo
termodynamické Monte Carlo

Molekulární dynamika

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

MD úlohy zadány postupně na přednáškách doc. M. Předoty

Výpočetní možnosti

Váš notebook/PC

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

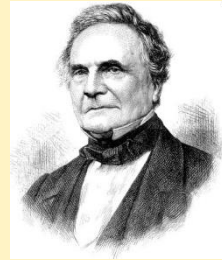
- Charles Babbage (1791-1871)

nápad sestavit programovatelný stroj

Analytical Engine 1837



1822 difference engine



- ENIAC 1942-1947, University Pennsylvania

18 000 elektronek !!!

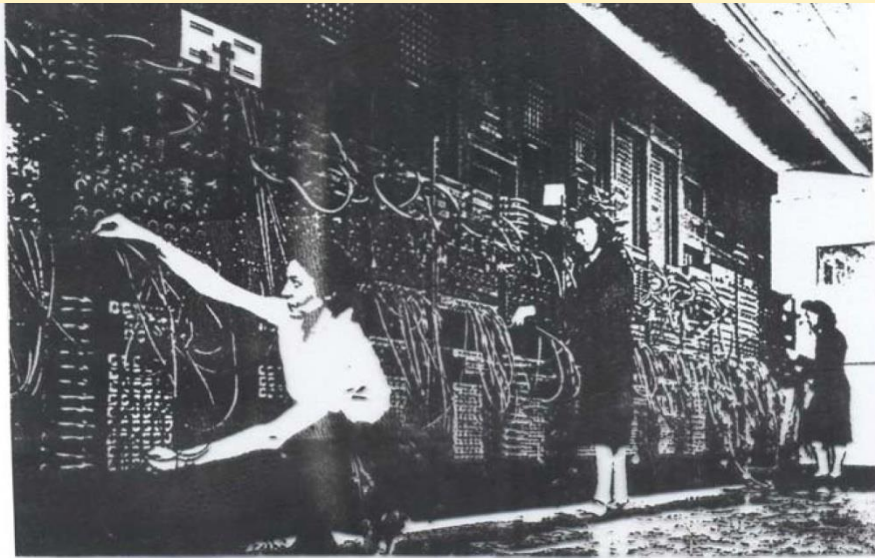


Fig. 1. Programming panels and cables of the Eniac. (Courtesy of N. Metropolis.)

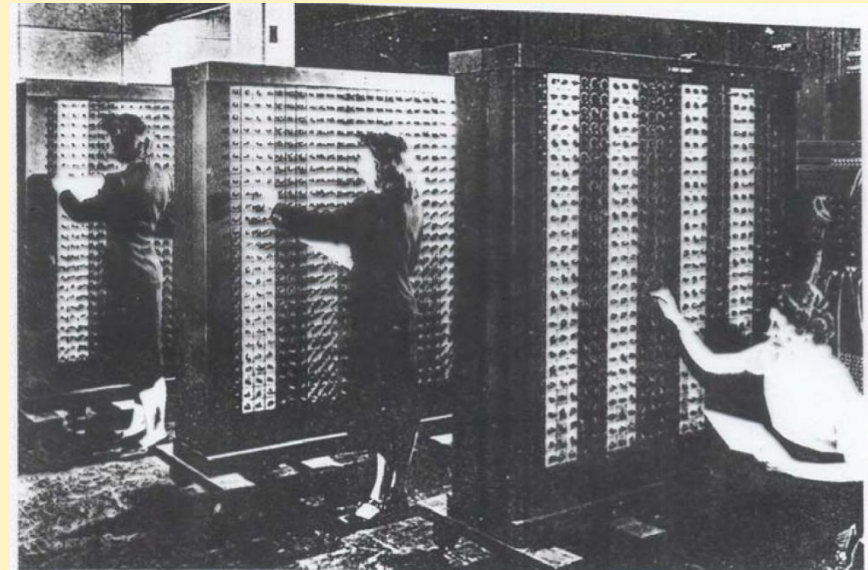


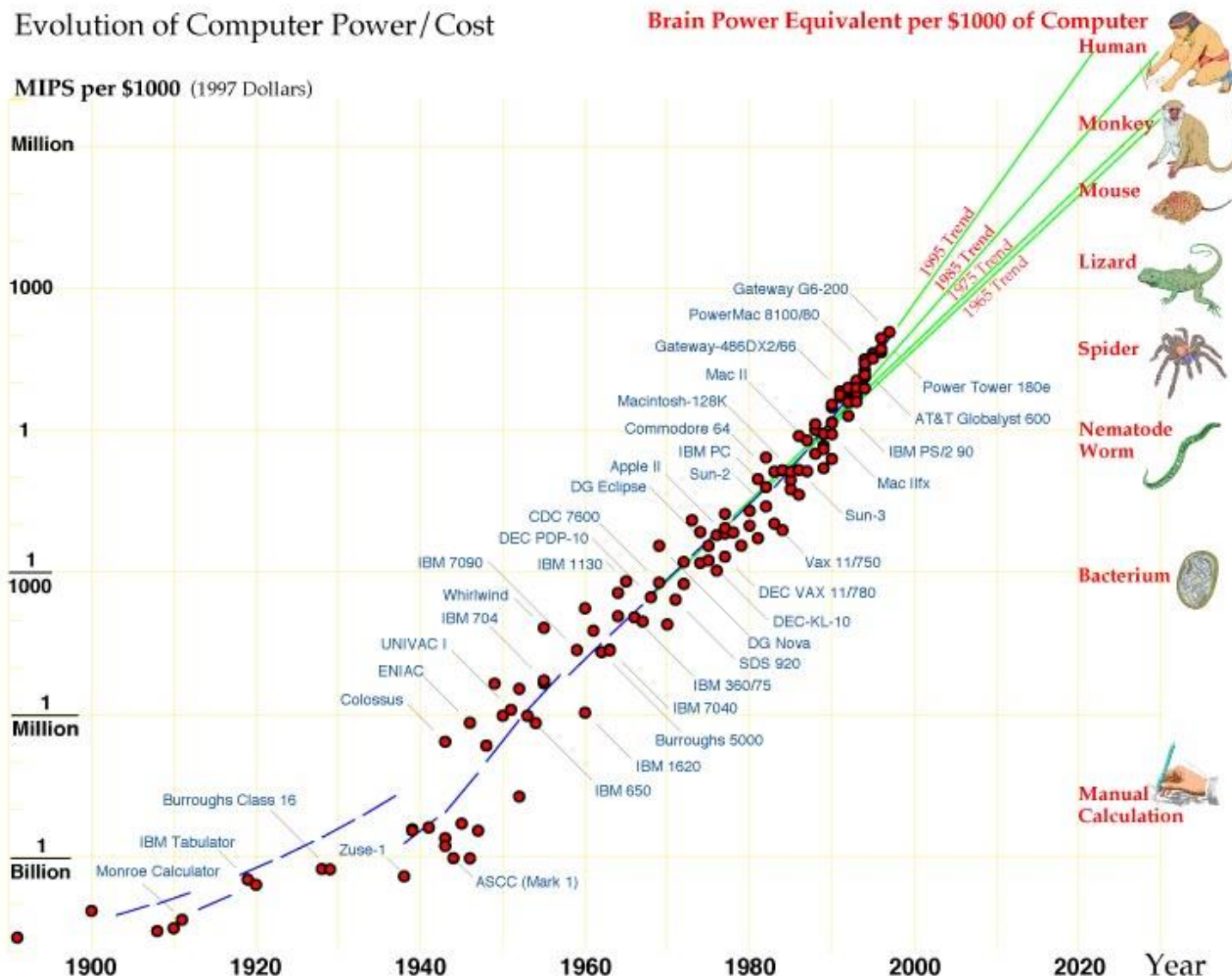
Fig. 2. Function tables of the Eniac. (Courtesy of N. Metropolis.)

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

Vývoj výkonnosti počítačů

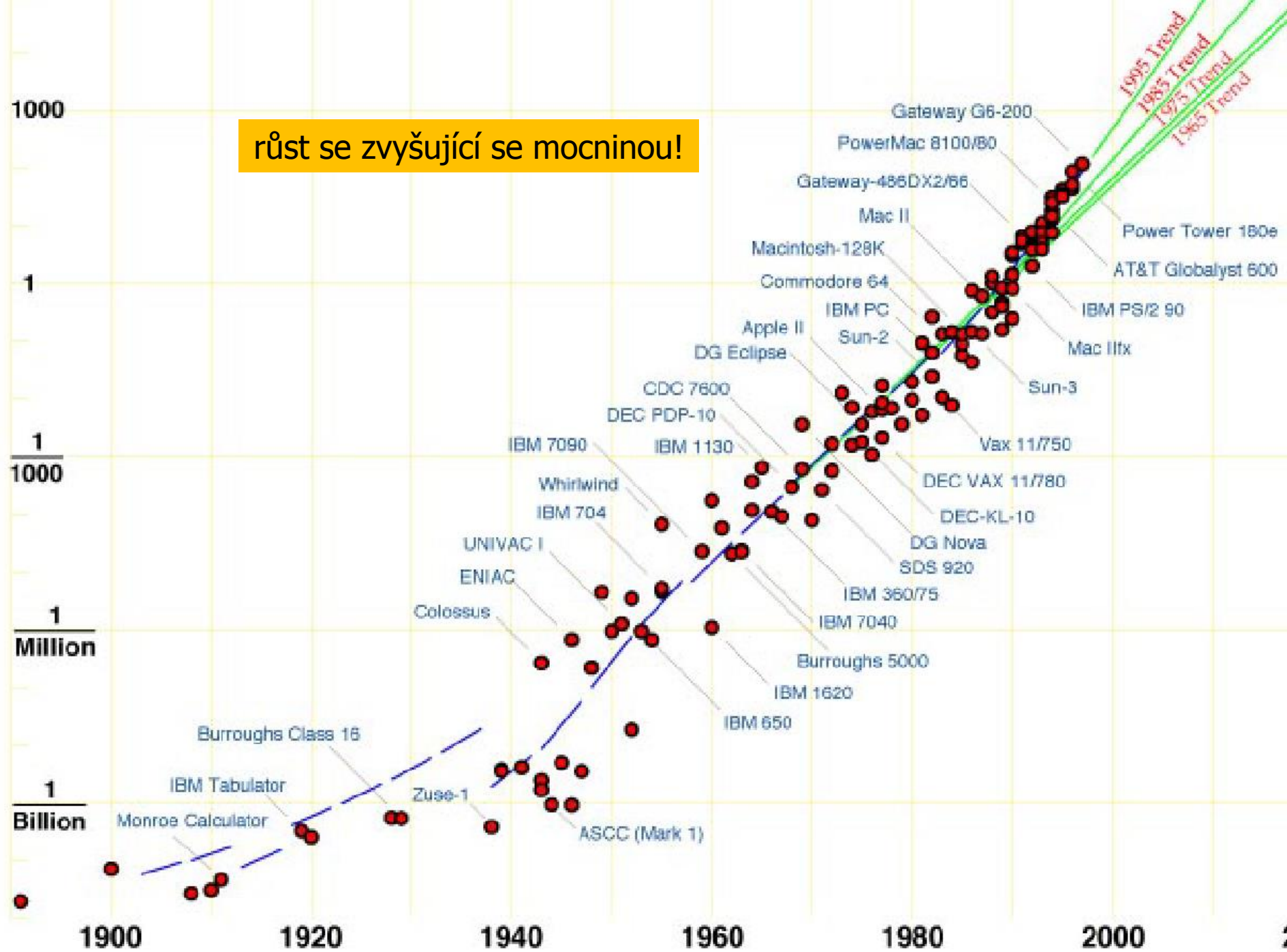
Evolution of Computer Power/Cost

MIPS per \$1000 (1997 Dollars)



<http://www.frc.ri.cmu.edu/~hpm/book98/fig.ch3/p060.html>

růst se zvyšující se mocninou!



Srovnání výkonnosti počítače v navigačním modulu Apollo a iPhone 5

<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
(2014)

1.38 GHz

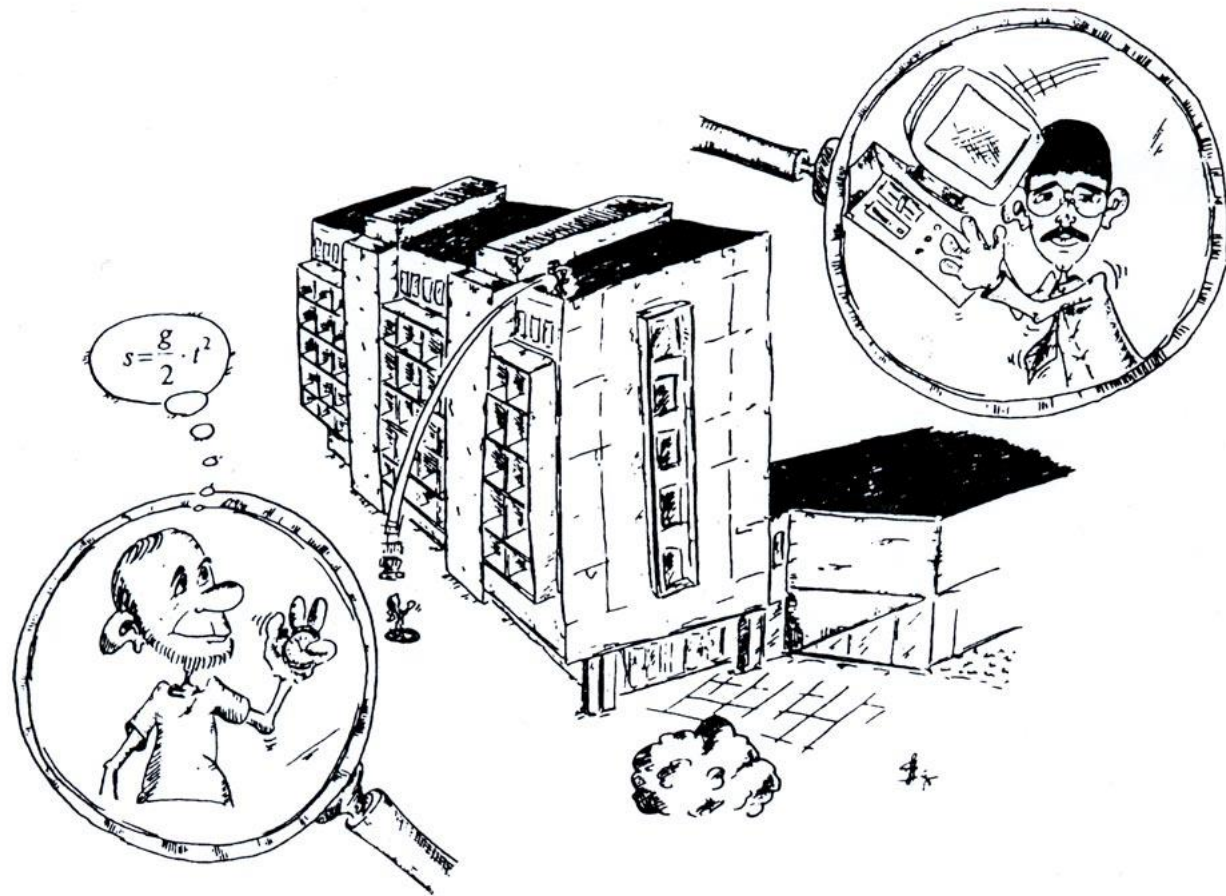
Úloha počítačových simulací



Úloha počítačových simulací



Experiment s počítačem

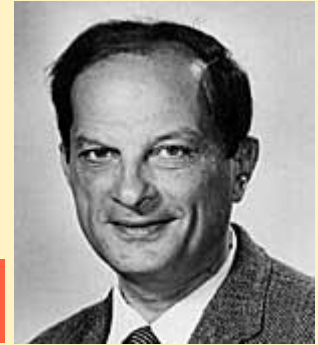


With this original answer to the question “How to measure the height of the building of the Institut für Physik in Chemnitz with a computer and a stop watch only?” the editors give a peculiar interpretation of the topic “Physics with a computer”.

Experiment modelovaný na počítači

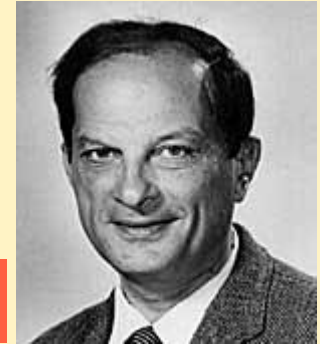
Stanisław Ulam (1909-1984)

Projekt Manhattan - jaderná puma a složitý pasiáns



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

$$A = (r^N, p^N)$$

Diskrétní modely

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

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

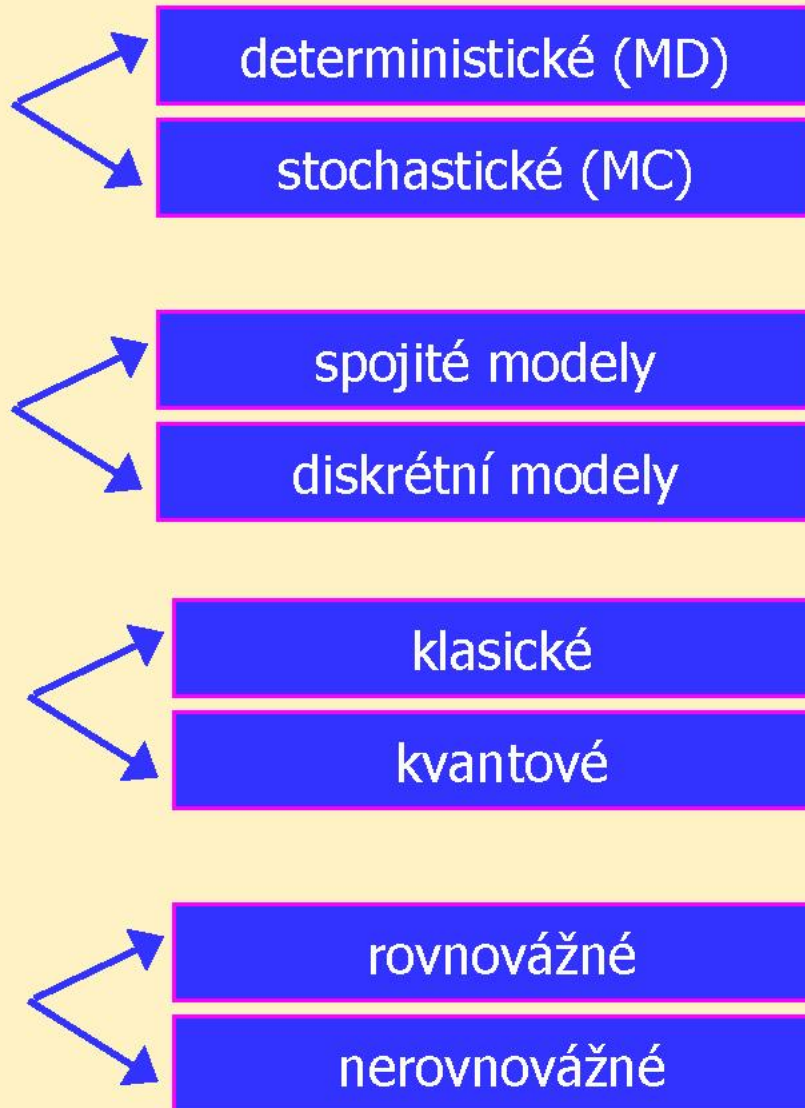
volná energie $F = - \frac{1}{\beta} \log[Z]$

termodynamické relace jako derivace volné energie

Nevýhody a omezení

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

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

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

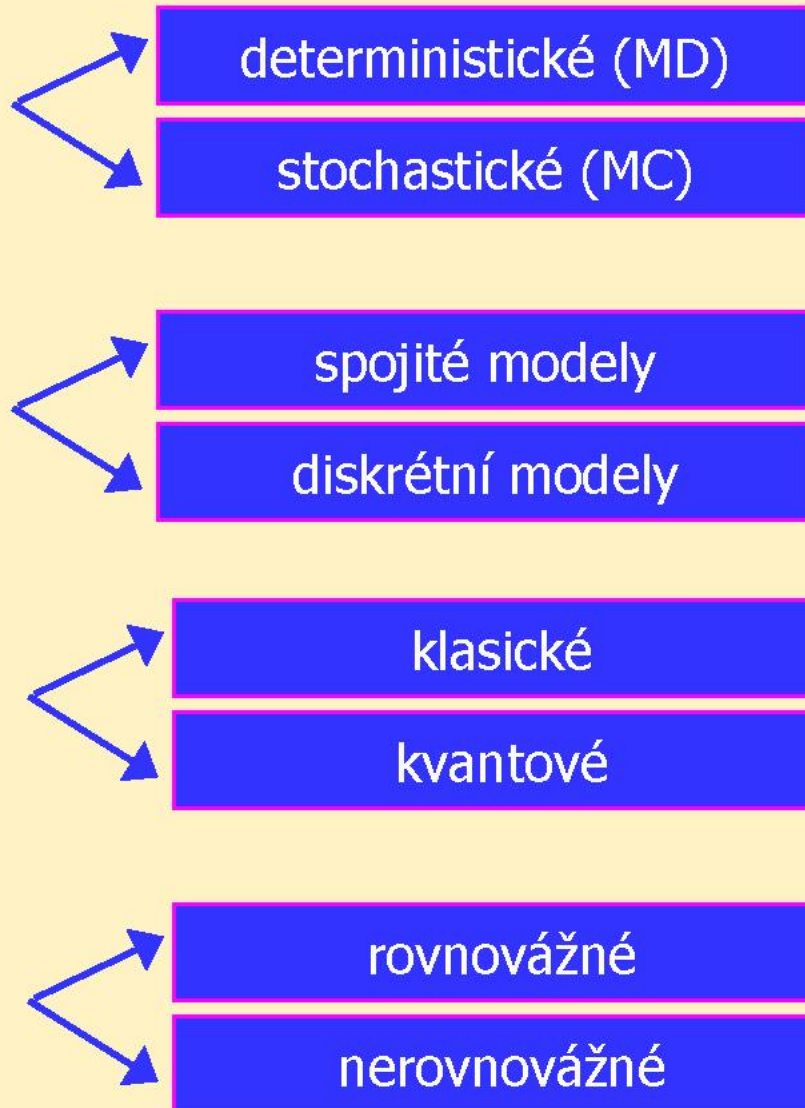
$$Z = \text{Tr} \exp(-H / k_B T)$$

střední hodnota

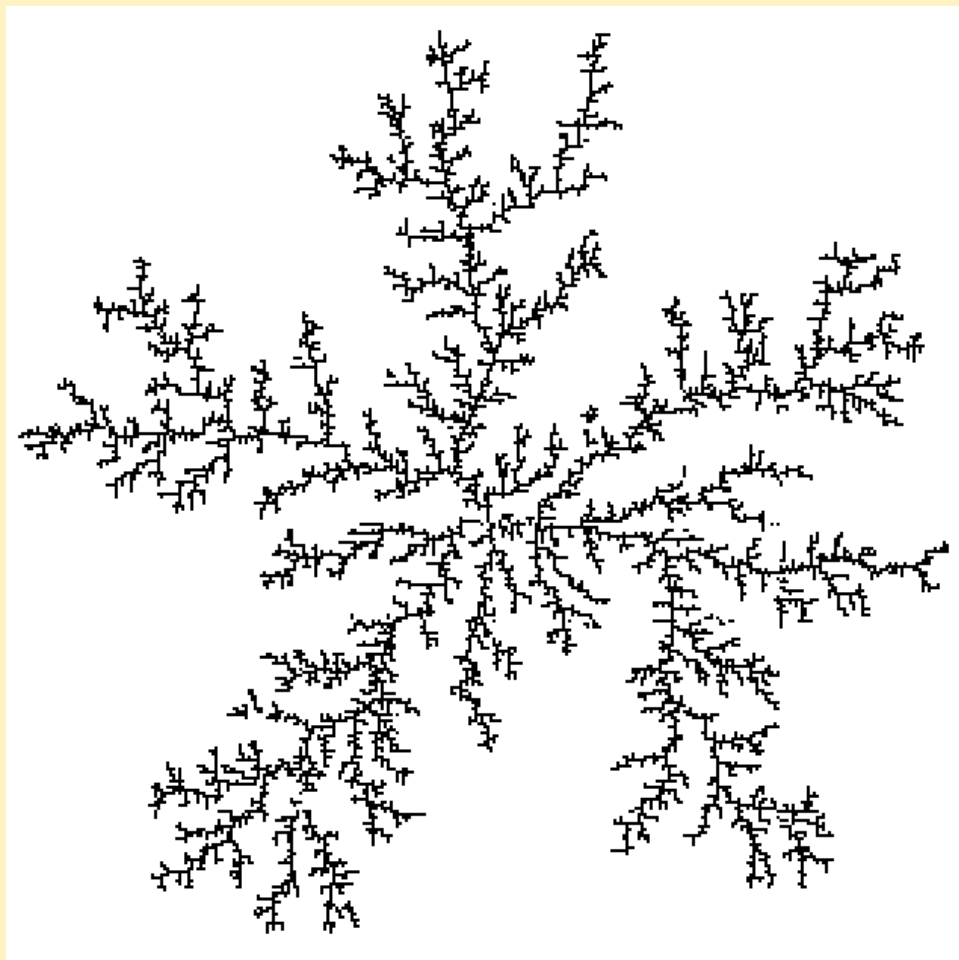
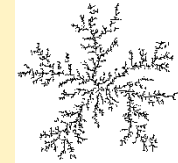
$$\langle X \rangle = \text{Tr} (X \rho)$$

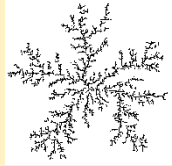
Výpočet „střední hodnoty“ pomocí MC

Klasifikace simulací



Fraktální objekty vzniklé růstem





Úloha DLA (diffusion limited agregation)

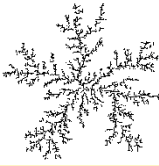
Fraktální dimenze vytvořeného klastru

Uvažujte čtvercovou mřížku v rovině. Vrcholy buď jsou nebo nejsou obsazeny molekulou.

Na začátku simulace je jen jedna molekula uprostřed mřížky. Jeden krok simulace popisuje difúzi molekuly z velké vzdálenosti až do okamžiku, kdy se usadí na povrchu vznikajícího 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.

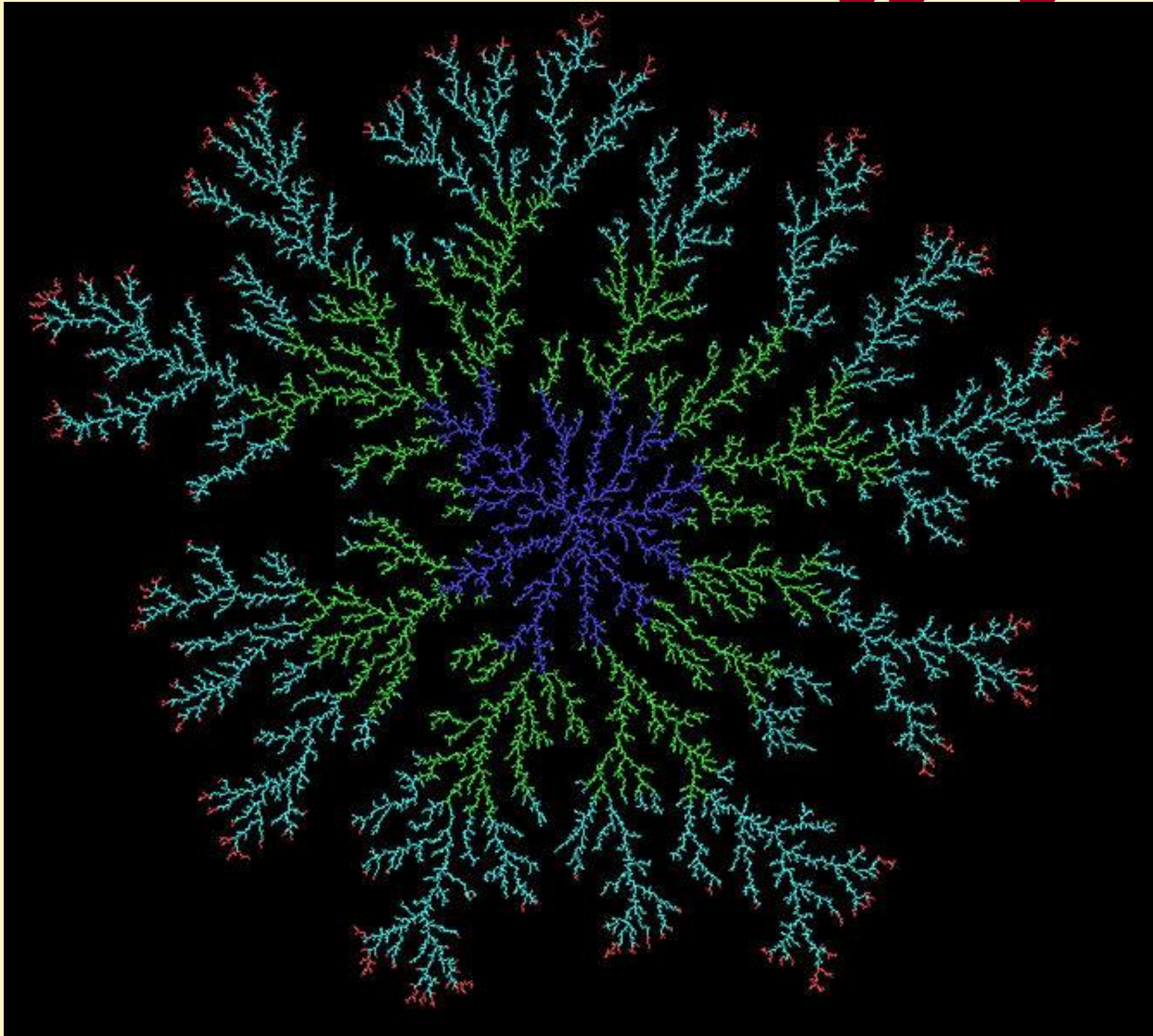
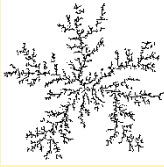
Tento krok se pak opakuje, až se vytvoří dostatečně veliký klastr. Určete fraktální dimenzi vytvořeného klastru.



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

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

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

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 spojité systémy, nevhodná pro nespojité potenciály

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

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

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

Nebezpečný duch simulací



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

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

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

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	

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 požadujeme ocenění využití prostředků MetaCentra v publikacích uživatelů, nejlépe formou poděkování.

Metacentrum

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

Registrace:

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)

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.

Úlohy

a) Geometrické Monte Carlo

b) Termodynamické Monte Carlo

c) Molekulární dynamika

a) Geometrické MC

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

b) Termodynamické MC

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

Perkolace

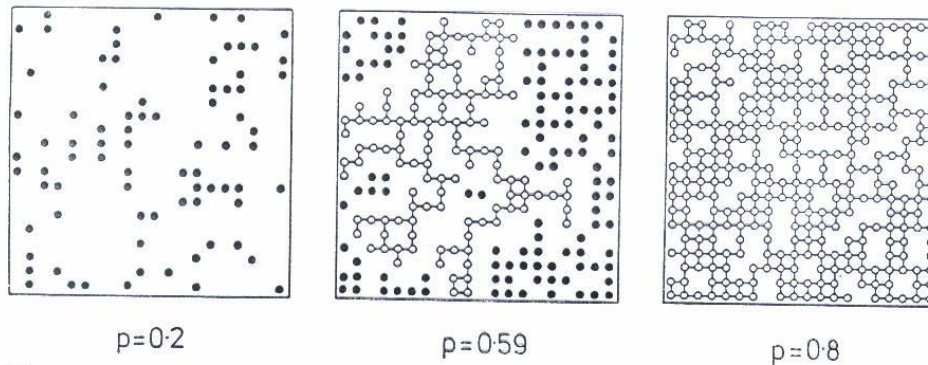


Fig. 1.16. Square lattice of size 20×20 . Sites have been randomly occupied with probability p ($p = 0.20, 0.59, 0.80$). Sites belonging to finite clusters are marked by full circles, while sites on the infinite cluster are marked by open circles

Introduction to percolation theory,
D. Stauffer and A. Aharony,
Taylor and Francis, Second Edition London 1992

Úlohy perkolace

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 $L = 16, 32, 64, 128$ (...).

Určete práh perkolace jako průsečík funkcí pro různé velikosti.

Bonus: Proved'te totéž pro trojúhelníkovou nebo šestiúhelníkovou mřížku.

Úlohy perkolace

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 funkcí pro různé velikosti.

Bonus: Proved'te totéž pro trojúhelníkovou nebo šestiúhelníkovou mřížku.

I-2 Uzlová perkolace – rozdělení klastrů

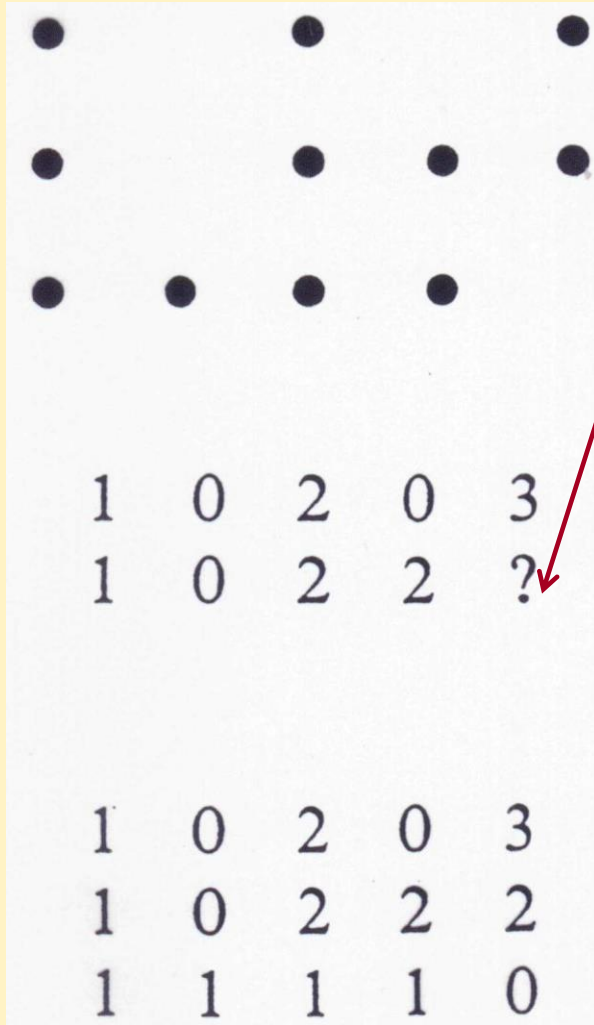
Užitím Hoshen-Kopelmanova algoritmu spočtete rozdělení velikostí klastrů při uzlové perkolaci. Uvažujte čtvercovou mřížku $L \times L$ s $L = 64$, pro pravděpodobnosti p v okolí prahu perkolace. Vyneste střední hodnotu hmotnosti klastru (druhý moment rozdělení velikostí klastrů) jako funkci pravděpodobnosti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

Hoshenův-Kopelmanův algoritmus

J. Hoshen R. Kopelman, Phys. Rev. B 14 (1976) 3428

Počítáme počet klastrů po řádcích.

Konflikt při číslování vyřešíme



Hoshenův-Kopelmanův algoritmus

J. Hoshen R. Kopelman, Phys. Rev. B 14 (1976) 3428

Počítáme počet klastrů po řádcích.

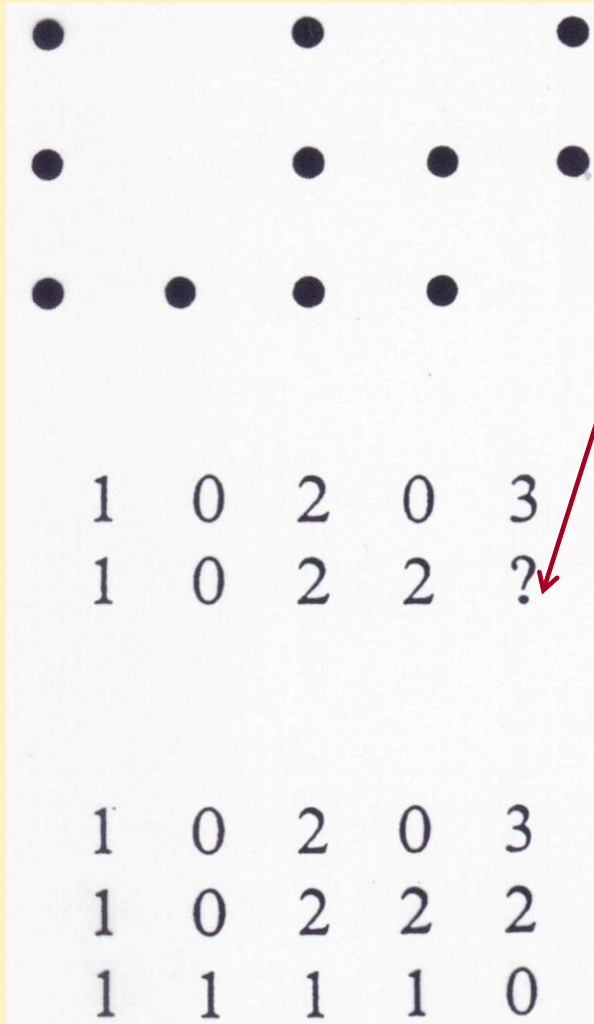
Konflikt při číslování vyřešíme

zavedením další proměnné -
značky pro postupné číslování
klastrů.

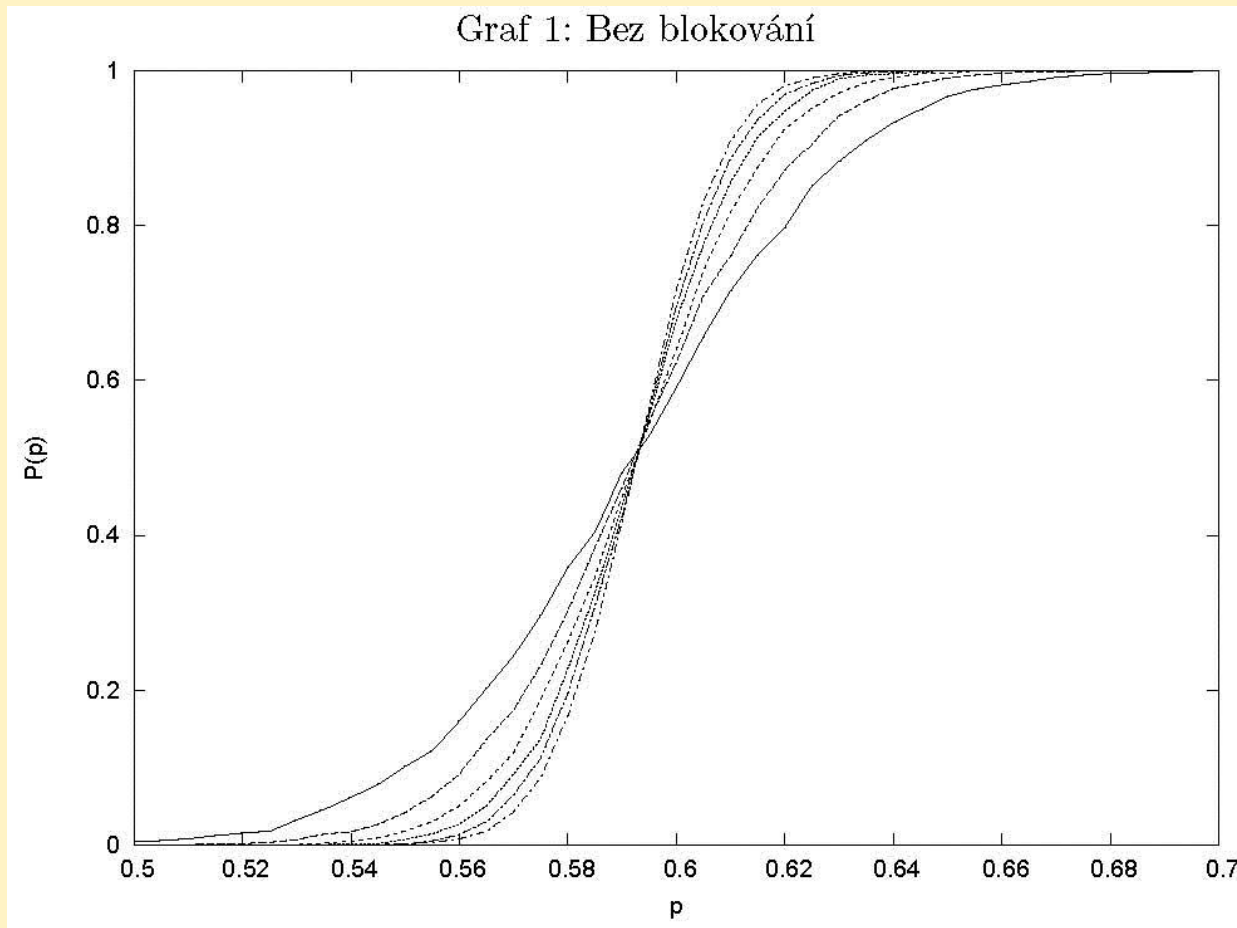
$$N(3) = 2 \quad N(2) = 1 \quad N(1) = 1$$

Výsledek po přečíslování:

1	0	1	0	1
1	0	1	1	1
1	1	1	1	0

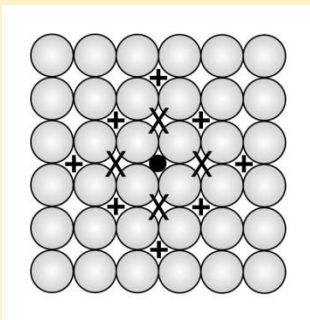


Pravděpodobnost existence spanning klastru vs. pravděpodobnost obsazení

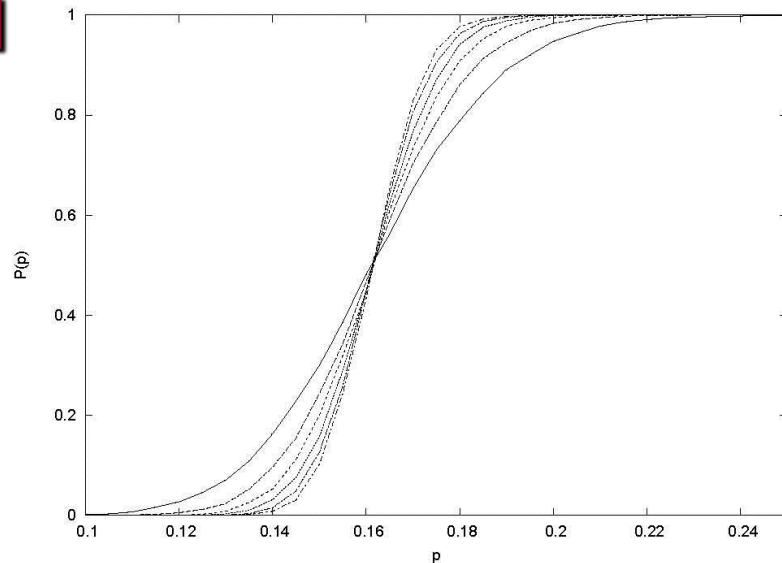


Perkolace blokujících uzlů

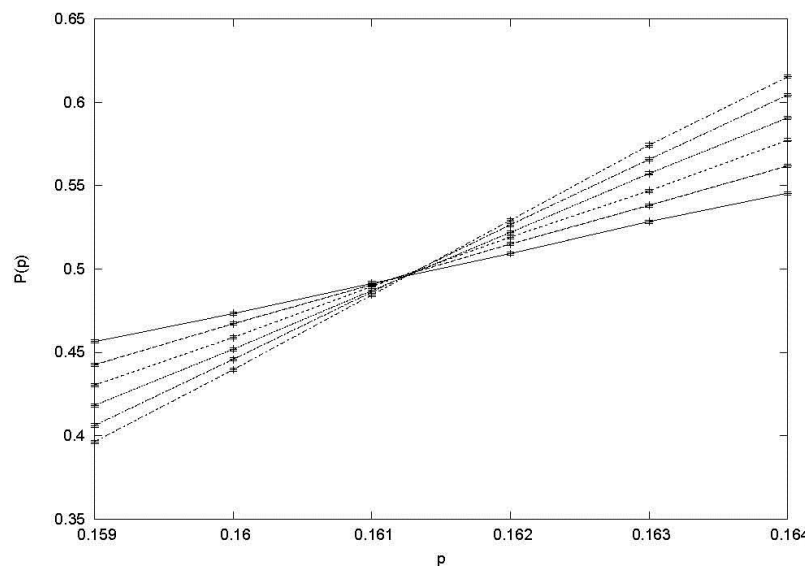
Simulujte s užitím následujícího modelu: na čtvercové mřížce se deponují nečistoty s koncentrací c_0 (každá nečistota na jednom uzlu, tj. nemohou se deponovat na sebe). Krátko-dosahová repulsivní interakce se popíše blokováním (zakázáním) uzlů v nejbližším okolí. Určete práh perkolace pro koncentraci c_0 , kdy dojde k perkolaci blokováných uzlů.



Graf 3: Pět blokováných uzlů



Graf 4: Pět blokováných uzlů — detail



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 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

Úloha o náhodných procházkách

I-4 Srovnání typů náhodných procházek

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.). Udejte chyby získaných exponentů.

Souhrn

- Charakteristika simulací
- Výpočetní možnosti
- Úloha o perkolaci

Presentace bude na:

Pod stránce přednášky

Simulace ve fyzice mnoha částic

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

pod položkou

Presentace v úvodní přednášce