

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 UTF MFF UK**

Milan Předota

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

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** (Isingův model,...)
- d) Modelování vývoje na strukturální úrovni
- e) Výpočet kinetických koeficientů (KMC)
- f) etc.

Perkolace

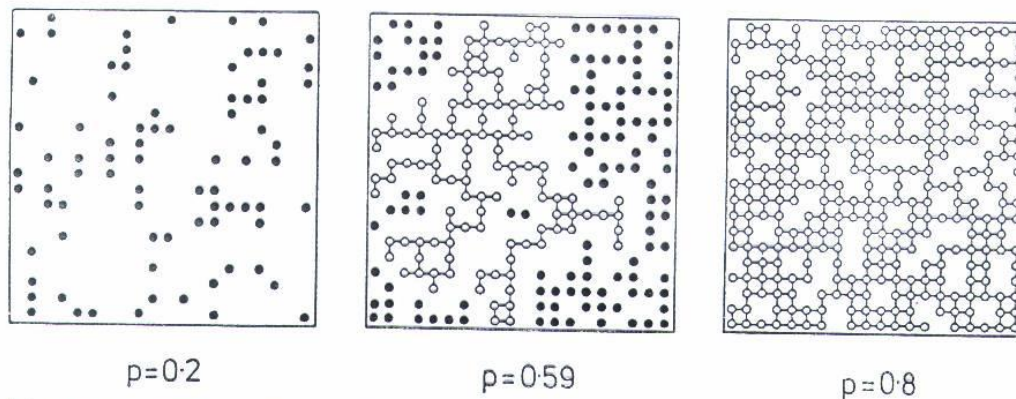


Fig. 1.16. Square lattice of size 20×20 . Sites have been randomly occupied with probability p ($p = 0.20, 0.59, 0.80$). Sites belonging to finite clusters are marked by full circles, while sites on the infinite cluster are marked by open circles

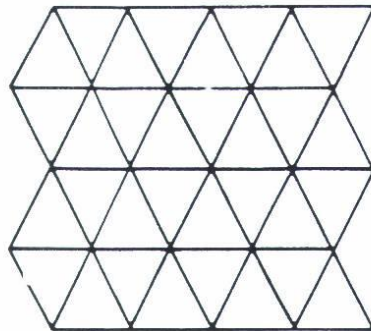
Různé typy:

- 1) uzlová (site)
- 2) vazbová (bond)

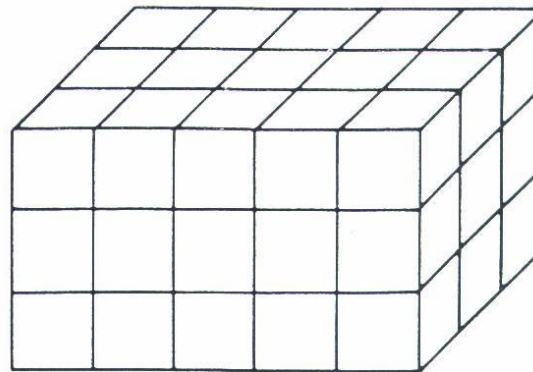
Prahy perkolace

Selected percolation thresholds for various lattices. 'Site' refers to site percolation and 'bond' to bond percolation. In all cases, only nearest neighbours form clusters, and no correlations are allowed between different sites or bonds. If the result is not exact (see text), the error probably affects only the last decimal.

Lattice	Site	Bond
Honeycomb	0.6962	0.65271
Square	0.592746	0.50000
Triangular	0.500000	0.34729
Diamond	0.43	0.388
Simple cubic	0.3116	0.2488
BCC	0.246	0.1803
FCC	0.198	0.119
$d = 4$ hypercubic	0.197	0.1601
$d = 5$ hypercubic	0.141	0.1182
$d = 6$ hypercubic	0.107	0.0942
$d = 7$ hypercubic	0.089	0.0787



(a)



(b)

Perkolace pokračování

analytické metody

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

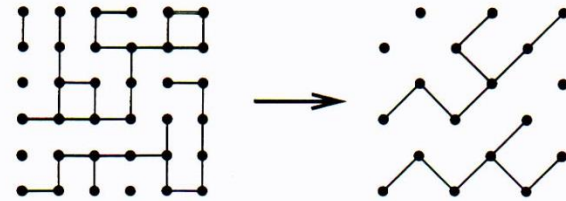
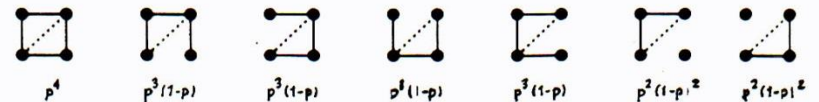
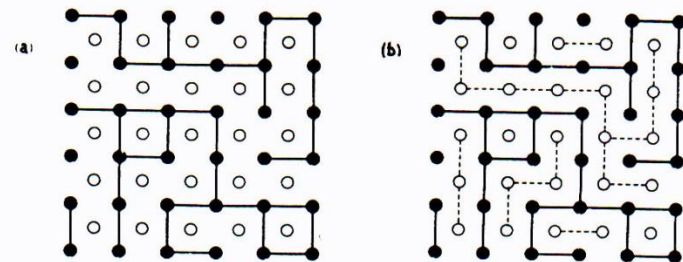


Illustration of the renormalization of the percolation problem on a square lattice. Bridges are erected on the new lattice along bonds that were connected by two bridges on the old.



The configurations of bridges around a square on the unrenormalized lattice that can give rise to a bridge along the dotted line on the renormalized lattice. Each configuration is labelled with the probability of its occurrence.

$$p_c = \frac{\sqrt{5}-1}{2}$$



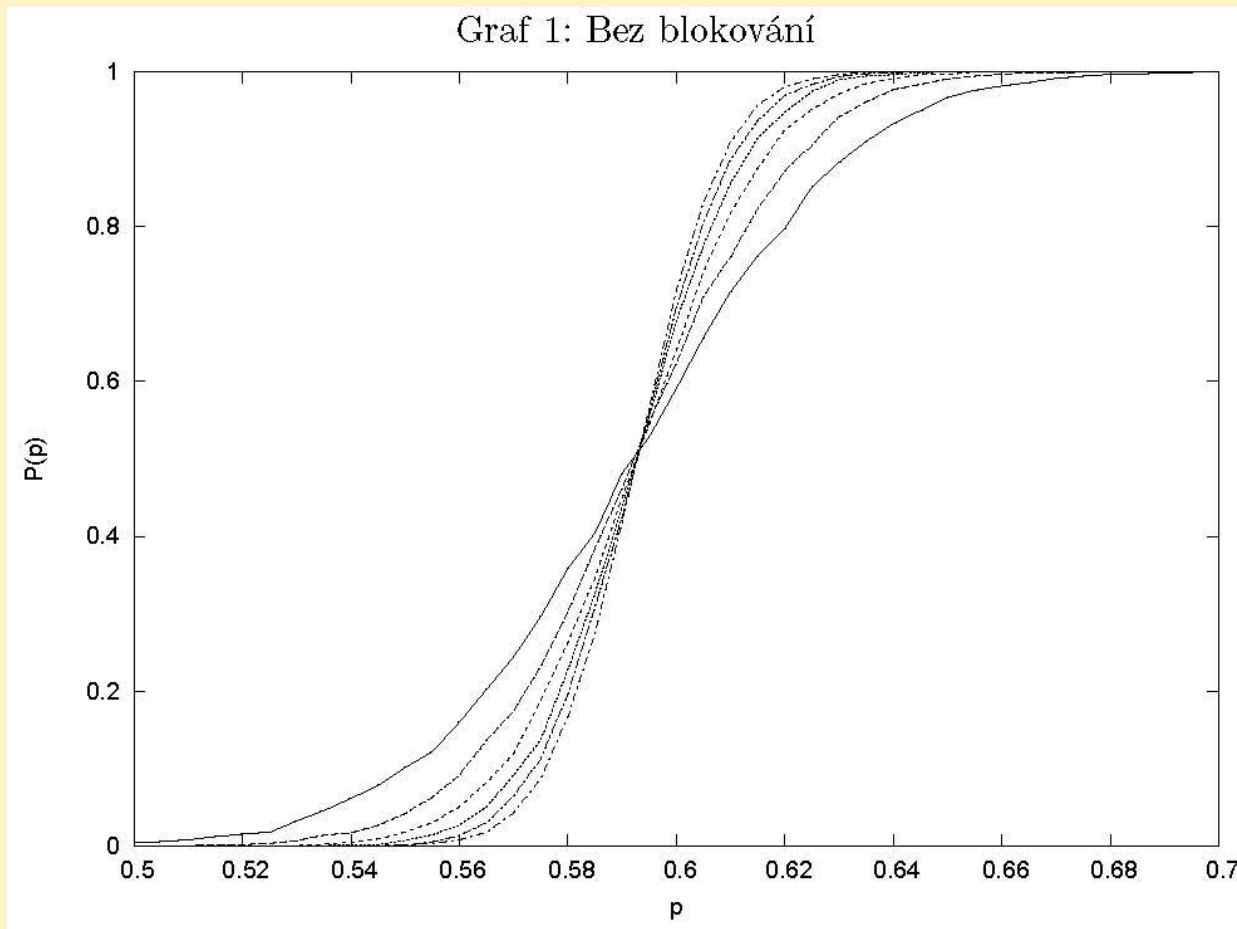
$$p_c = \frac{1}{2}$$

(a) The construction of the 'dual lattice' for the percolation problem on a square lattice. (b) We populate the dual lattice by building bridges between every pair of sites not separated by a bridge on the original lattice.



Approximations arising in the renormalization scheme we used for the decimation problem. The sites marked A and B, which are connected on the original lattice, become unconnected on renormalization. This effect has a tendency to decrease the average cluster size ξ . Also, correlations arise between the probabilities of adjacent bonds having bridges on them. The presence or absence of a bridge on the bond marked 1, for

Uzlová perkolace: pravděpodobnost existence spanning klastru vs. pravděpodobnost obsazení

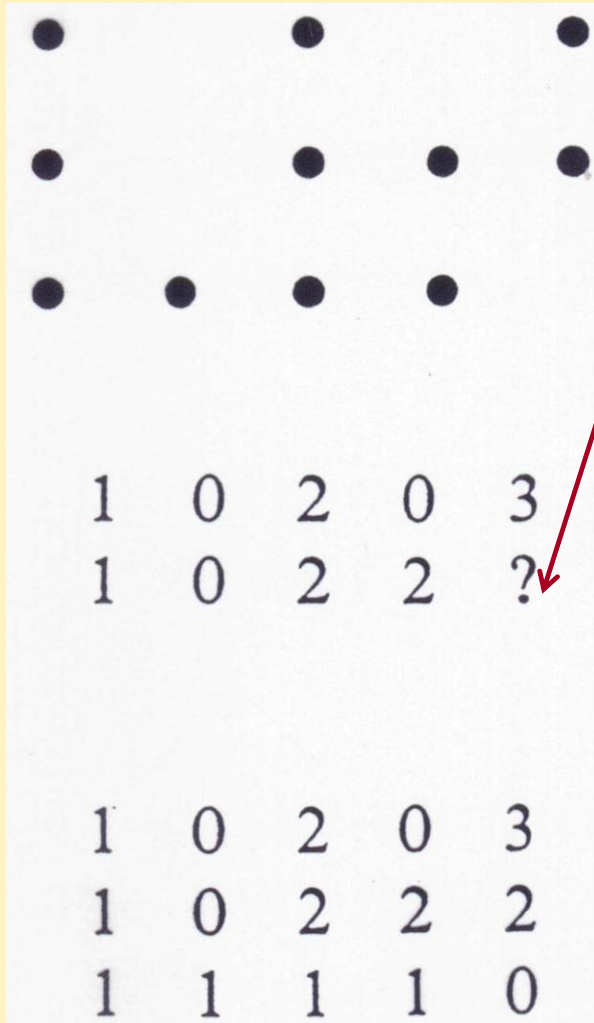


Hoshenův-Kopelmanův algoritmus

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.

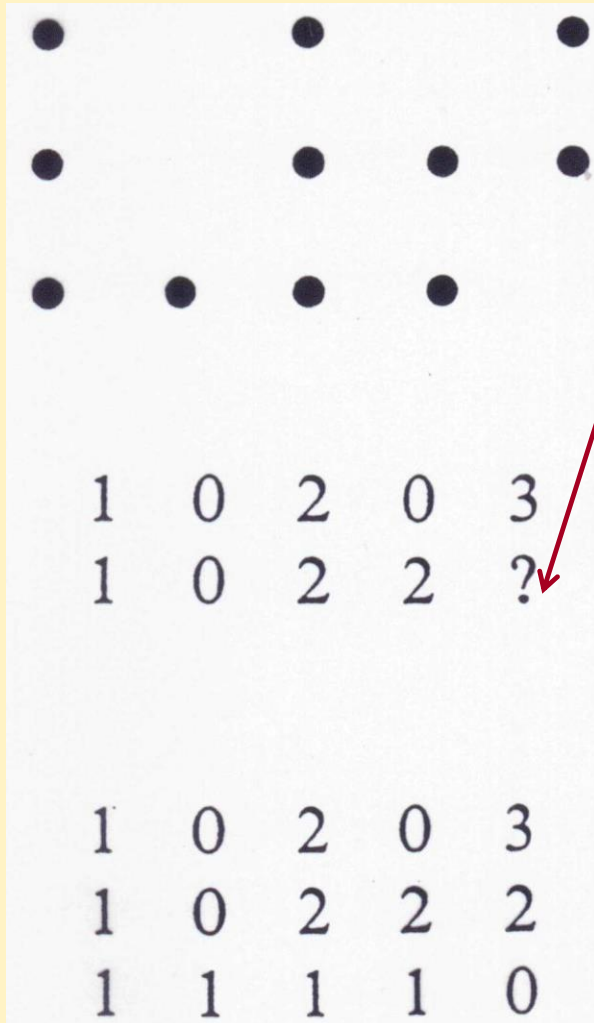
Konflikt při číslování vyřešíme

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



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.

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

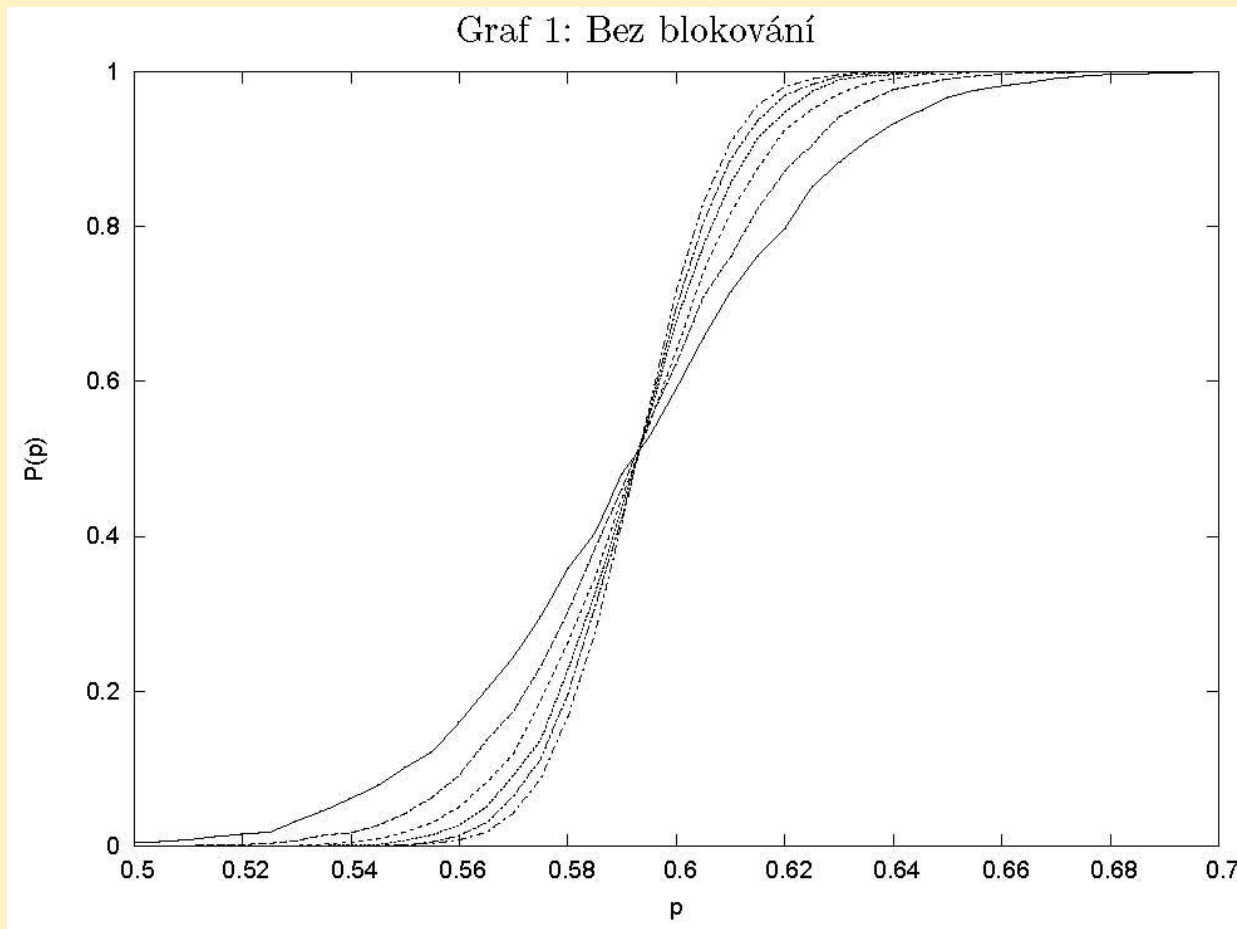
Určete práh perkolace jako průsečík funkcí pro různé velikosti.

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

I-2 Uzlová perkolace – rozdělení klastrů

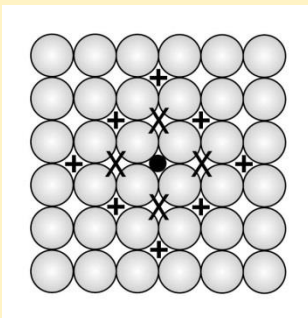
Užitím Hoshen-Kopelmanova algoritmu spočtete rozdělení velikostí klastrů při uzlové perkolaci. Uvažujte čtvercovou mřížku $L \times L$ s $L = 64$, pro pravděpodobnosti p v okolí prahu perkolace. Vyneste střední hodnotu hmotnosti klastru (druhý moment rozdělení velikostí klastrů) jako funkci pravděpodobnosti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

Uzlová perkolace: pravděpodobnost existence spanning klastru vs. pravděpodobnost obsazení

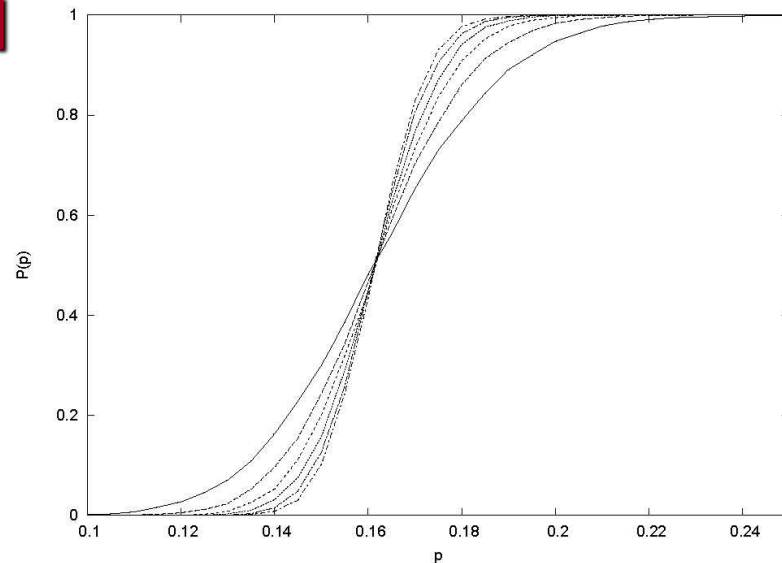


Perkolace blokujících uzlů

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

