

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 ÚTF MFF UK

Milan Předota

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

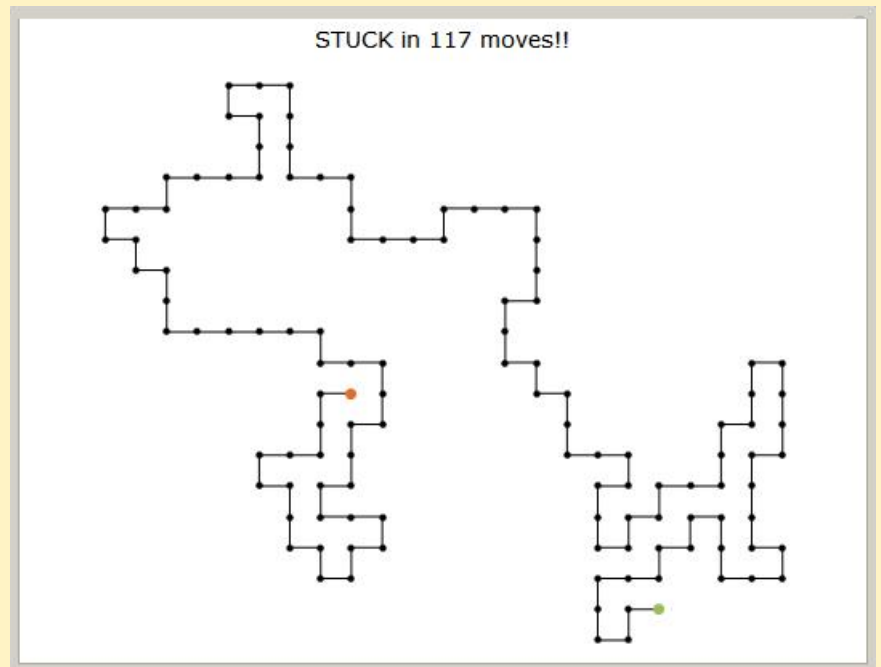
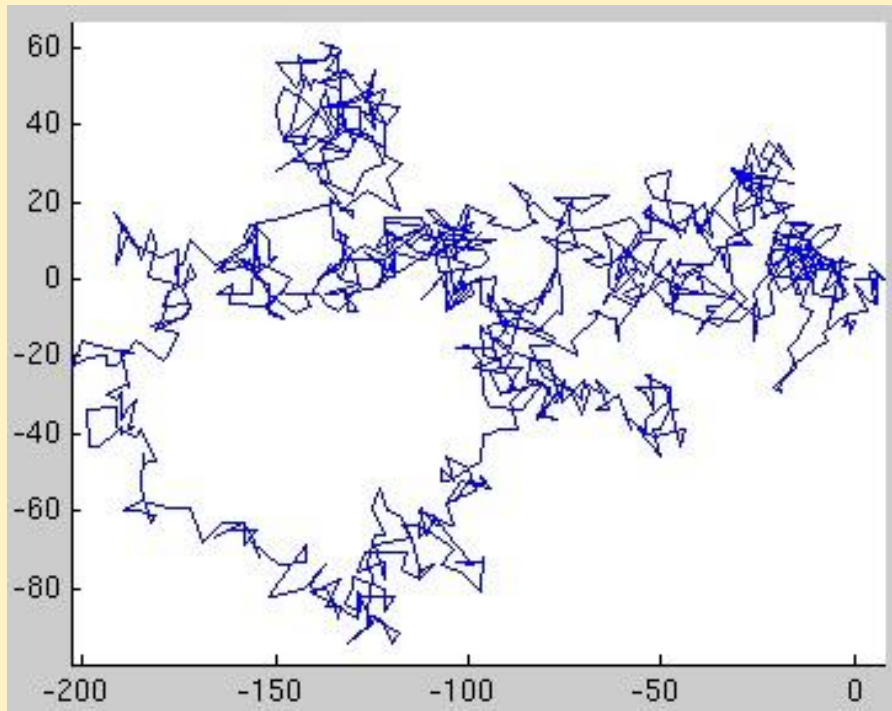
Simulační metoda založená na užití stochastických procesů a generace náhodných čísel.

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.

Náhodné procházky

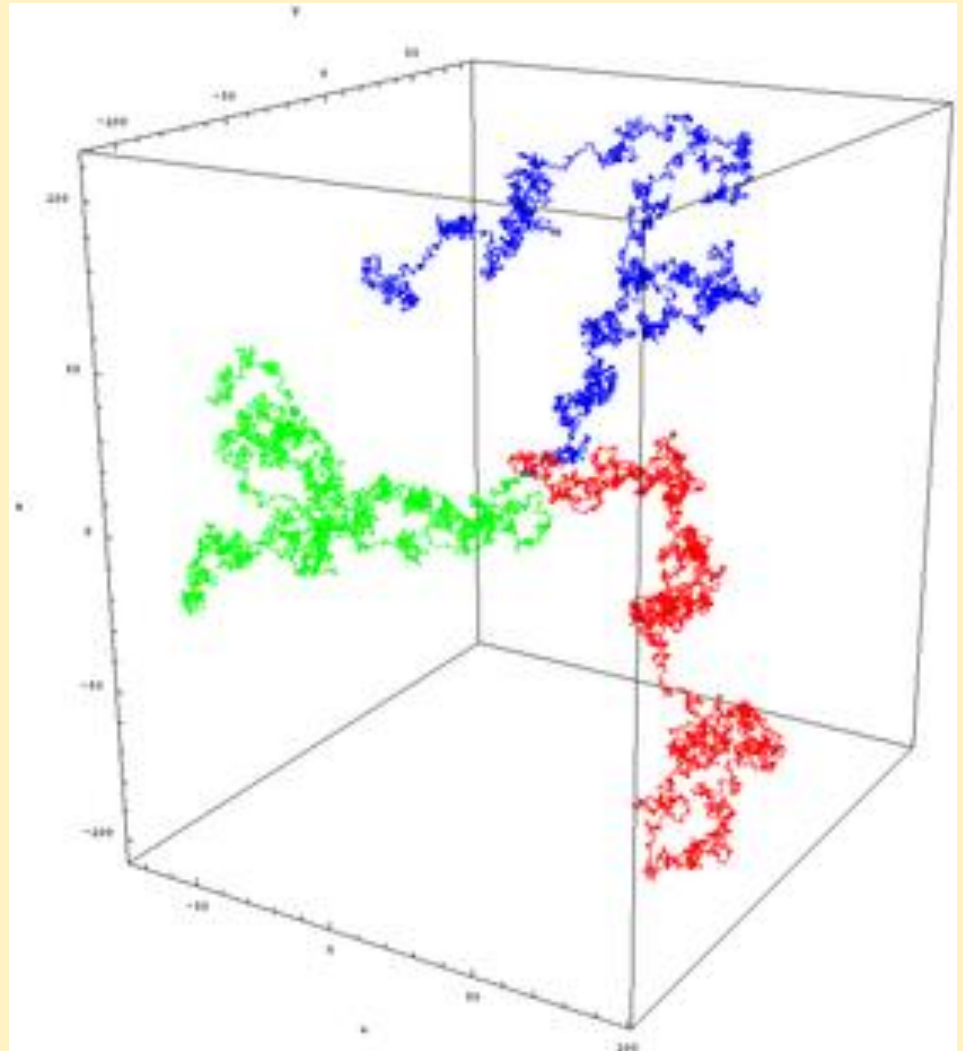
- prostá
- bez návratů
- samovyhýbající se (self-avoiding walk-SAW)



Náhodné procházky

těž pro tři dimenze

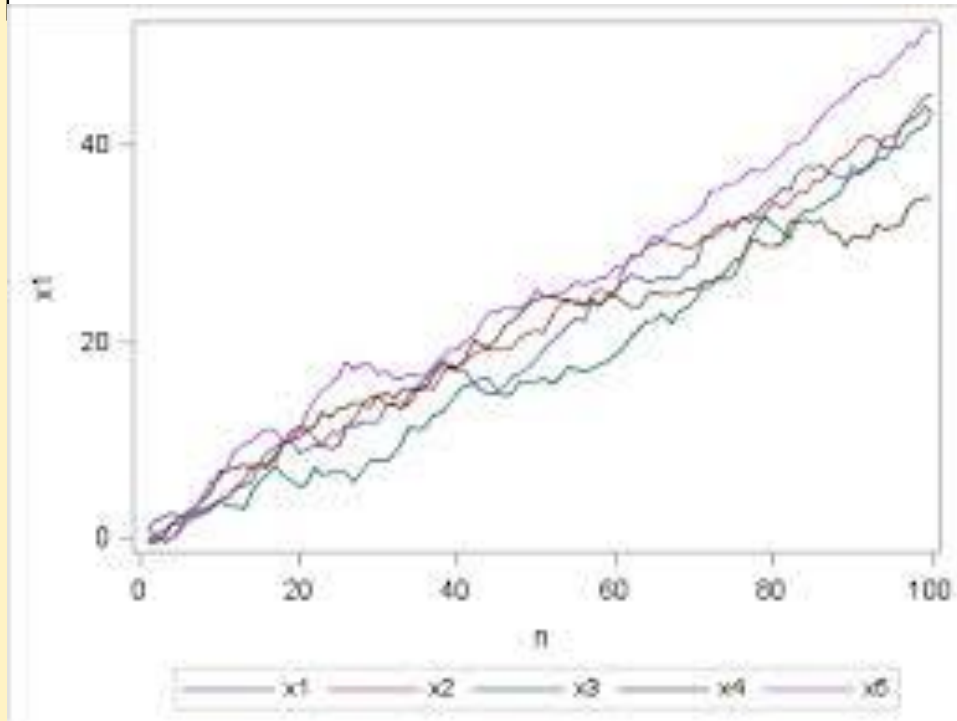
samovýbající se
self-avoiding walk (SAW) -
není omezení na délku



http://en.wikipedia.org/wiki/Random_walk#Gaussian_random_walk

Prostá náhodná procházka

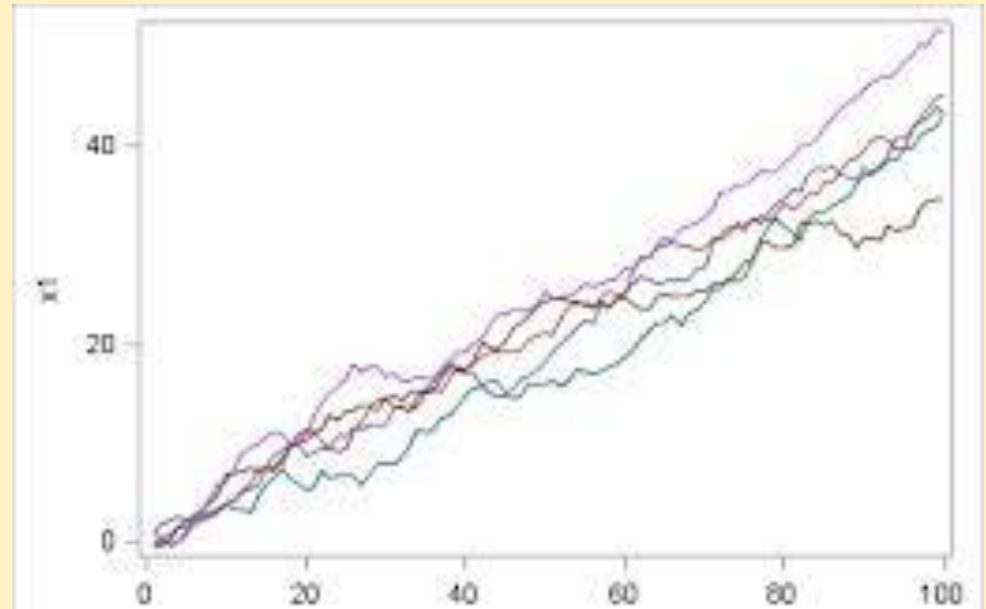
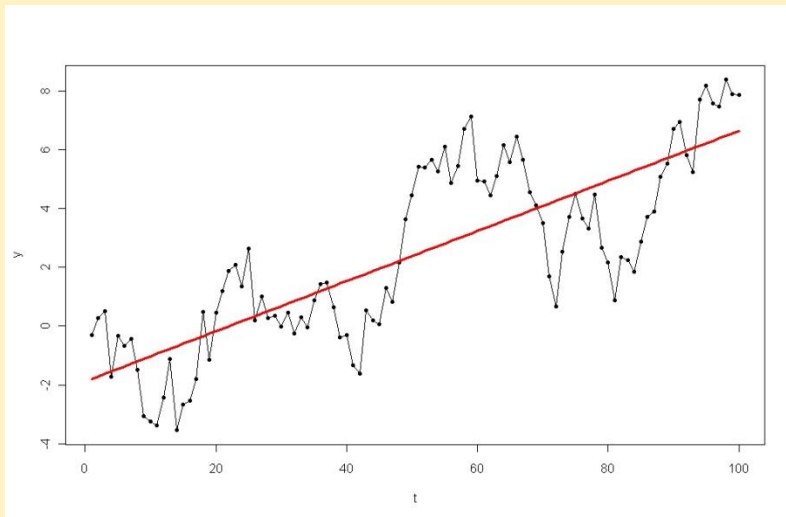
Začnete prostou náhodnou procházkou na dvou-dimenzionální čtvercové mřížce, tj. vybíráte náhodně pohyb jedním ze čtyř směrů. Měřte závislost vzdálenosti R od počátečního do koncového bodu na počtu kroků (čase) t pro n procházek. Např.



Různé běhy následně vystředujte, pro každý krok tak dostanete střední hodnotu vzdálenosti $\langle R \rangle$. Vyneste vývoj $\langle R \rangle$ v závislost na čase t včetně indikace chyb, viz dále.

Náhodné procházky

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

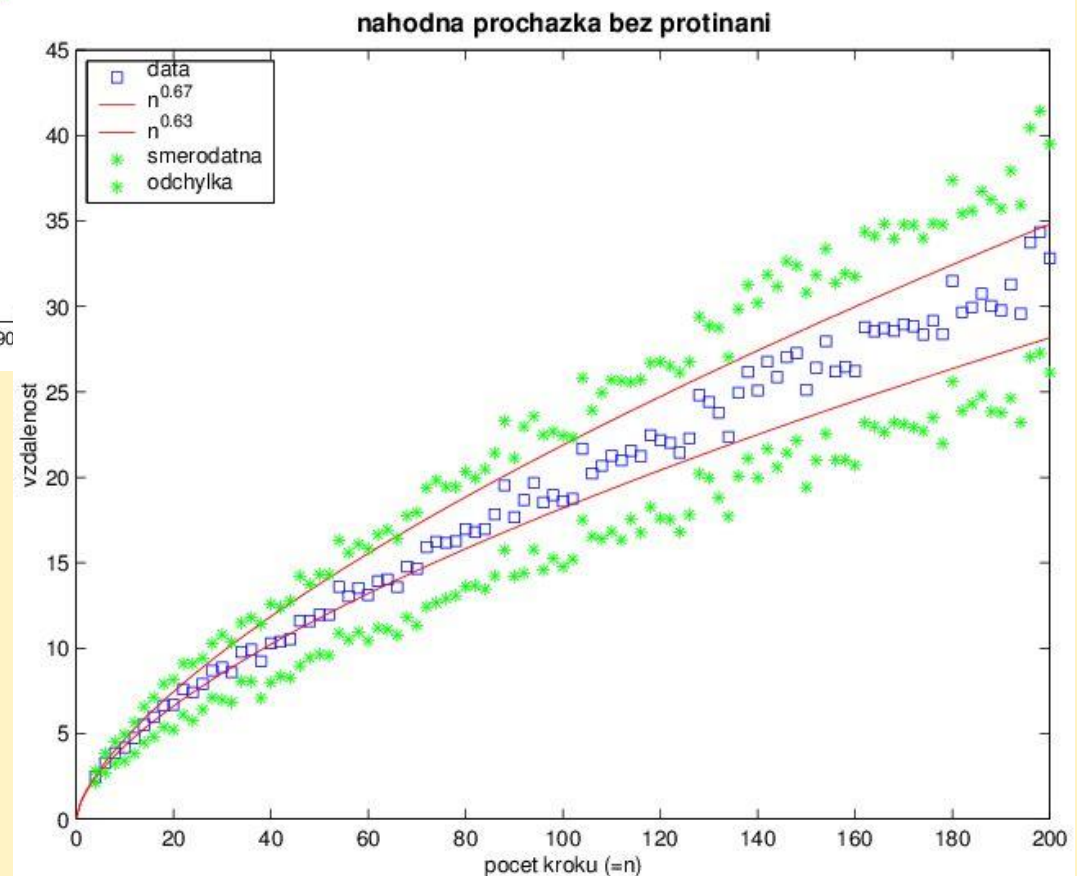
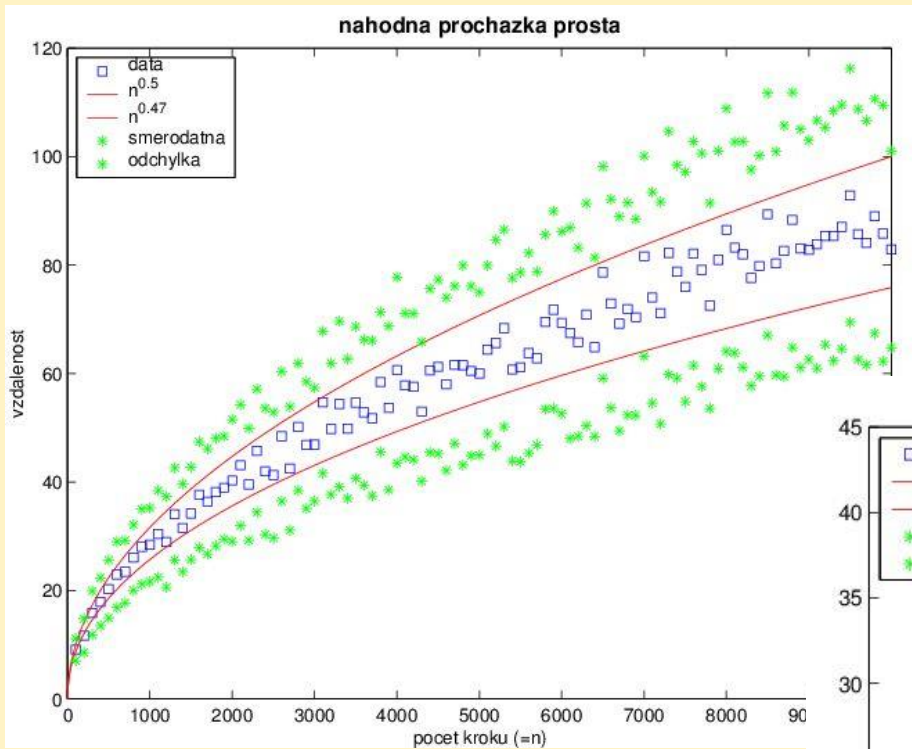


Různé běhy je třeba vystředovat a pak závislost fitovat.

Určit exponent α v $R \sim t^\alpha$.

příklad řešení

p. Psíkal



Chyby při měření náhodné procházky

V daném kroku náhodné procházky určete směrodatnou odchylku $\Delta(n)$ měřené střední hodnotu vzdálenosti polohy částice v závislosti na počtu běhu n .

Vykreslete odchylky $\Delta(n)$ - error bars – pro vybrané body procházky.

V **gnuplotu** lze použít speciální příkaz:
plot "Graph_Data.dat" using 1:2:3 with yerrorlines
Chyba je v třetím sloupci souboru
"Graph_Data.dat"

Náhodné procházky v 2D

Simulujte a analyzujte různé typy náhodných procházek na dvou-dimenzionální čtvercové mřížce. Určete závislost vzdálenosti počátečního a koncového bodu na počtu kroků pro tyto typy procházek: prostá náhodná procházka (výběr ze čtyř směrů), procházka bez okamžitých návratů (výběr ze tří směrů) a jako volitelný bonus i procházka bez protínání.

Cíl: Porovnejte naměřené exponenty včetně odhadu chyby jejich měření.

Postupuje podle následujícího:

Cíl úlohy srovnání exponentů

Odhad exponentů:

Vyneste funkci $\langle R(t) \rangle$ v log-log měřítku a určete exponenty časové závislosti τ^α pro jednotlivé typy procházek (prostá procházka a procházka bez okamžitých návratů). Udejte chyby získaných exponentů.

Bonus: samovyhýbající se procházka

Provedte podobný výpočet pro procházku bez protínání (self-avoiding walk SAW) a srovnejte vývoj s předchozími typy procházek.

Minimálním cílem je ukázat, že SAW má jiný exponent – u SAW se lze omezit na menší počet kroků.