

Doc. dr. Renato Lukač  
Gimnazija Murska Sobota

# **Numerične metode v fiziki**

Raziskovalni dnevi fizike  
Bled

22.9.2009

# Agenda

- uvod, zakaj in za kaj?
- umestitev MC v NM
- zgodovinski pregled
- generatorji slučajnih števil
- primeri uporabe
- diskusija





?



\$





# Zakaj numerične metode?

- teoretične rešitve odpovejo
- želimo preveriti veljavnost drugih pristopov
- bolj varni poskusi
- cenejši poskusi
- dodatne informacije
- povečana razumljivost

# Za kaj numerične metode?

- simulacije (paralelni računalniki)
- reševanje teoretičnih problemov
- dopolnjevanje poskusov
- obdelava podatkov
- most med:
  - modeli in teoretičnimi napovedmi
  - modeli in eksperimentalnimi rezultati

# Najbolj priljubljena področja

- reševanje enačb, linearna algebra
- interpolacija/ekstrapolacija
- integriranje/odvajanje
- **slučajna** števila, MC
- sortiranje
- diferencialne enačbe
- Fourierova transformacija

# Zgodovinski pregled MC

Comte de Buffon 1777:  $P=M/N=2 \cdot l/(\pi \cdot d)$

$$\pi \sim 2 \cdot l \cdot N/(M \cdot d)$$

N zelo velik

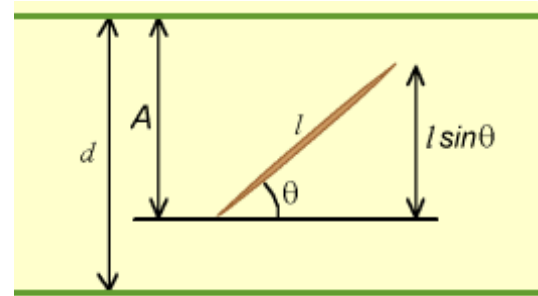
N .... število metov

M.... število zadetkov

l .... dolžina igle

d... širina traku;  $d \geq l$

$$\int_0^{\pi} \int_0^{l \sin \theta} \frac{1}{d\pi} dA d\theta$$



<http://www.mste.uiuc.edu/reese/buffon/bufjava.html>

<http://www.angelfire.com/wa/hurben/buff.html>

# Zgodovinski pregled MC

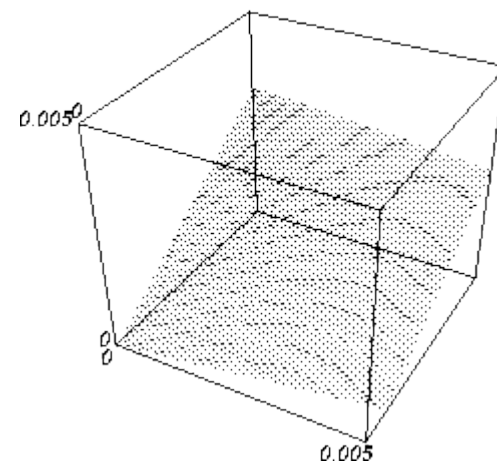
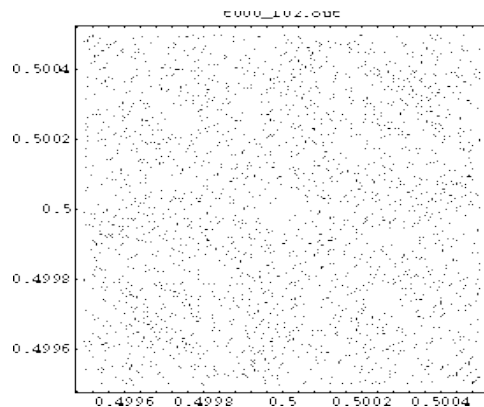
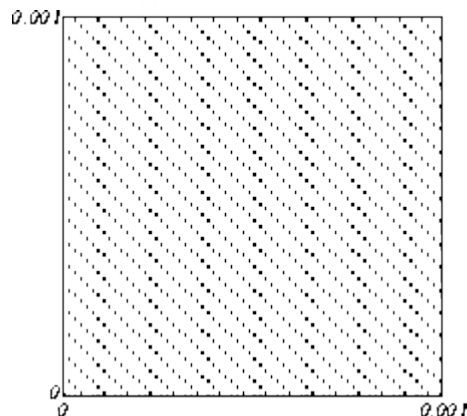
- 1886 Laplace;  $\pi$
- 1901 Lord Kelvin; integrali
- 1908 Gossett “Student”; korelacijski faktorji
- 1930 Fermi; numerični poskusi z nevroni
- 40. in 50. leta; Von Neumann, Fermi, Ulam, Metropolis

# MC – slučajnost

- generator slučajnih števil:

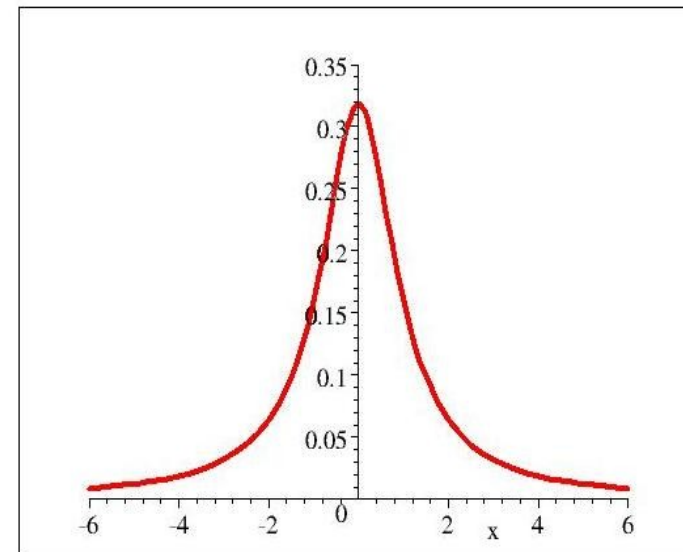
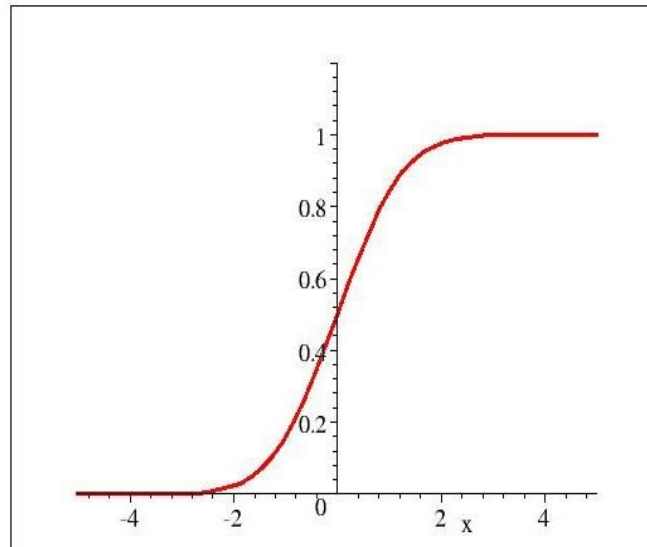
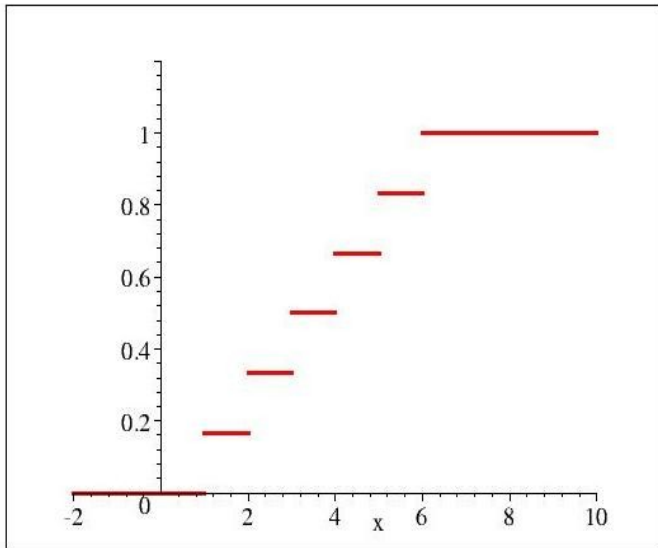
$$s_{n+1} = (a \cdot s_n + b) \bmod m$$

z vrednostmi na intervalu  $[0, m-1]$ . Zato, da bi zaporedje natančno določili, moramo podati še štiri ‘magična števila’:  $s_0$  – *seme* (začetna vredost),  $a$  – *množitelj*,  $b$  – *prirastek*,  $m$  – *modul*. Vsa štiri števila so naravna in prva tri so manjša od modula,  $a$  je večji od 1. Seveda izbira ni poljubna.



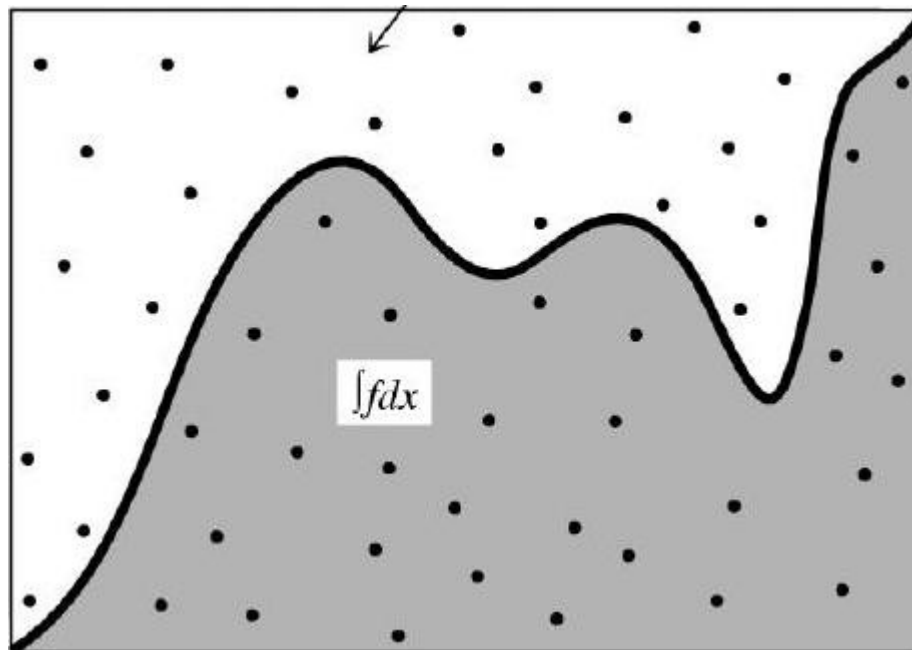
# MC – slučajnost

- porazdelitev navadno med 0 in 1
- poljubna porazdelitev
  - razteg + premik + ...

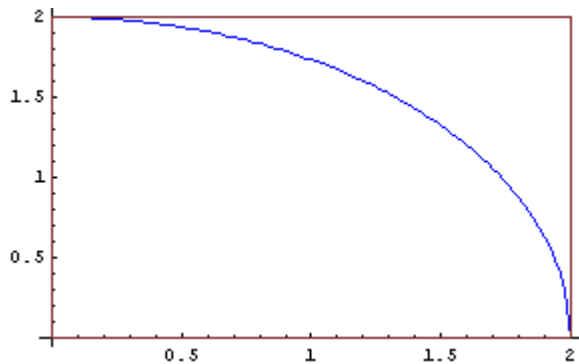


# MC – integriranje

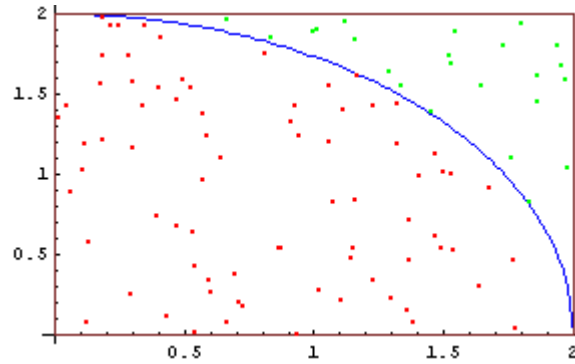
- ideja: število zadetkov sorazmerno s ploščino



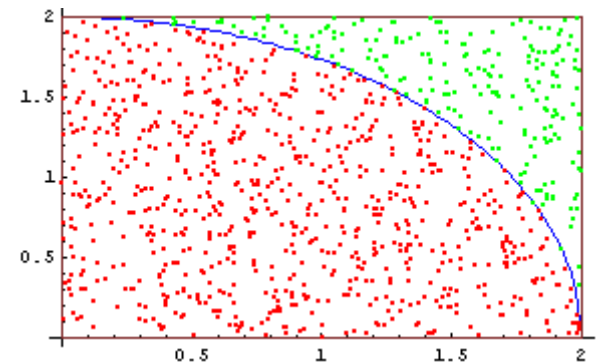
# MC – integriranje



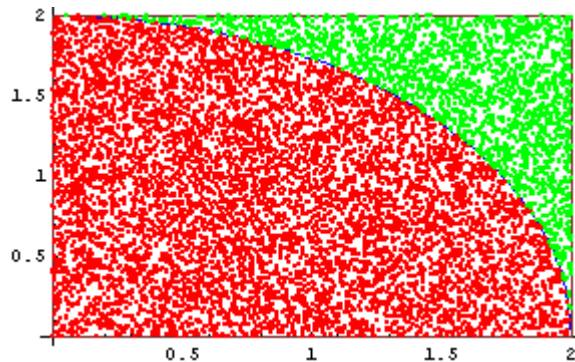
$n=0$



$n=100, S=3.08$



$n=1000, S=3.156$

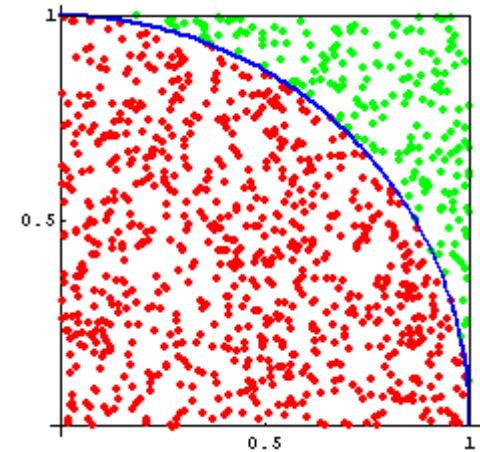
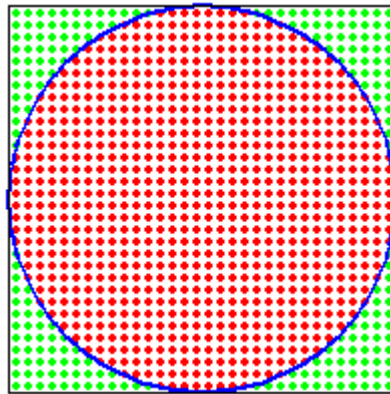
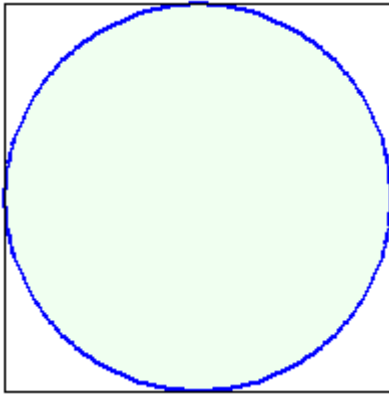


$n=10.000, S=3.142$

[http://www.student.nada.kth.se/~f93-jhu/phys\\_sim/montecarlo/PolygonArea.htm](http://www.student.nada.kth.se/~f93-jhu/phys_sim/montecarlo/PolygonArea.htm)

<http://www.particle.kth.se/~lindsey/JavaCourse/Book/Part1/Physics/Chapter07/MonteCarlo.html>

# Krog in $\pi$



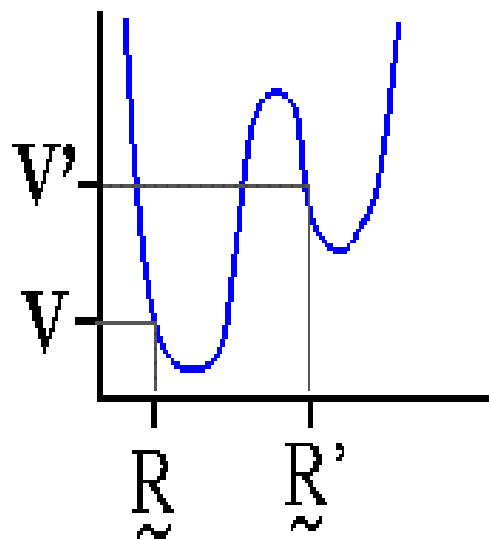
<http://polymer.bu.edu/java/java/montepi/montepiapp>

# MC - Metropolis

- prednosti in slabosti glede na MD  
<http://threeplusone.com/code/md.html>
- enostavni model za tekočino:
  - mreža
  - potencial (trdi, mehki, LJ, GB)
  - $T$  – vpliv na žreb
  - razni sistemi

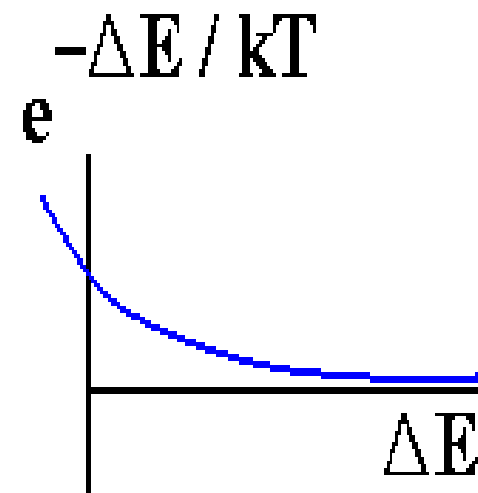
# MC - Metropolis

MC compares energies. No forces calculated.



In equilibrium at T:

$$\frac{p(E')}{p(E)} = e^{- (E' - E) / kT}$$



# MC - Metropolis

## Monte Carlo Algorithm

Generate initial structure  $\tilde{R}$ . Calculate  $V(\tilde{R})$ .

Modify structure to  $\tilde{R}'$ . Calculate  $V'=V(\tilde{R}')$ .

If  $V' < V$  then

$\tilde{R} \leftarrow \tilde{R}'$ ,  $V \leftarrow V'$

else

Generate random number RAND:

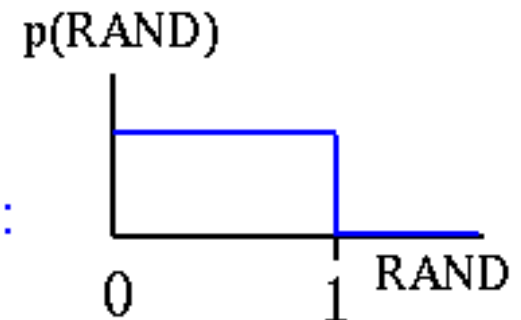
If  $e^{-(V'-V)/kT} > \text{RAND}$

$\tilde{R} \leftarrow \tilde{R}'$ ,  $V \leftarrow V'$

End if

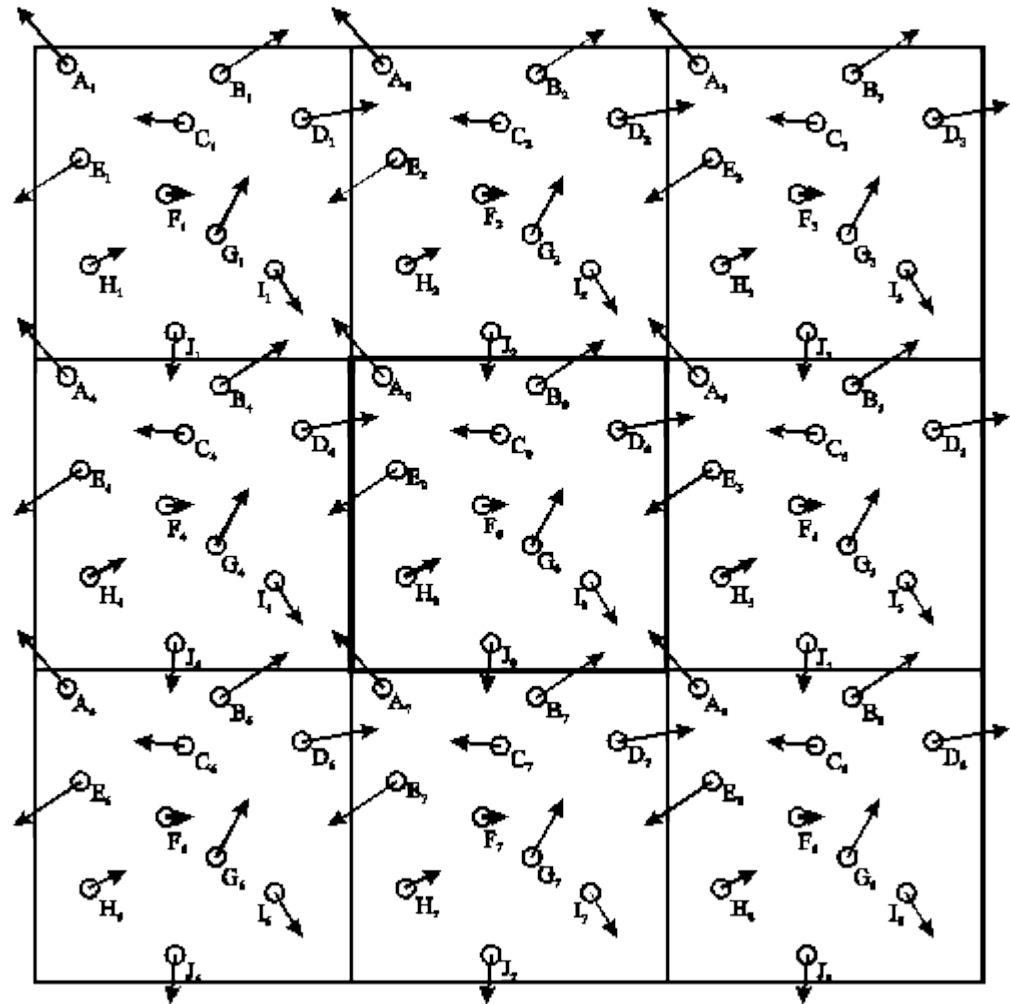
End if

Repeat for N steps.

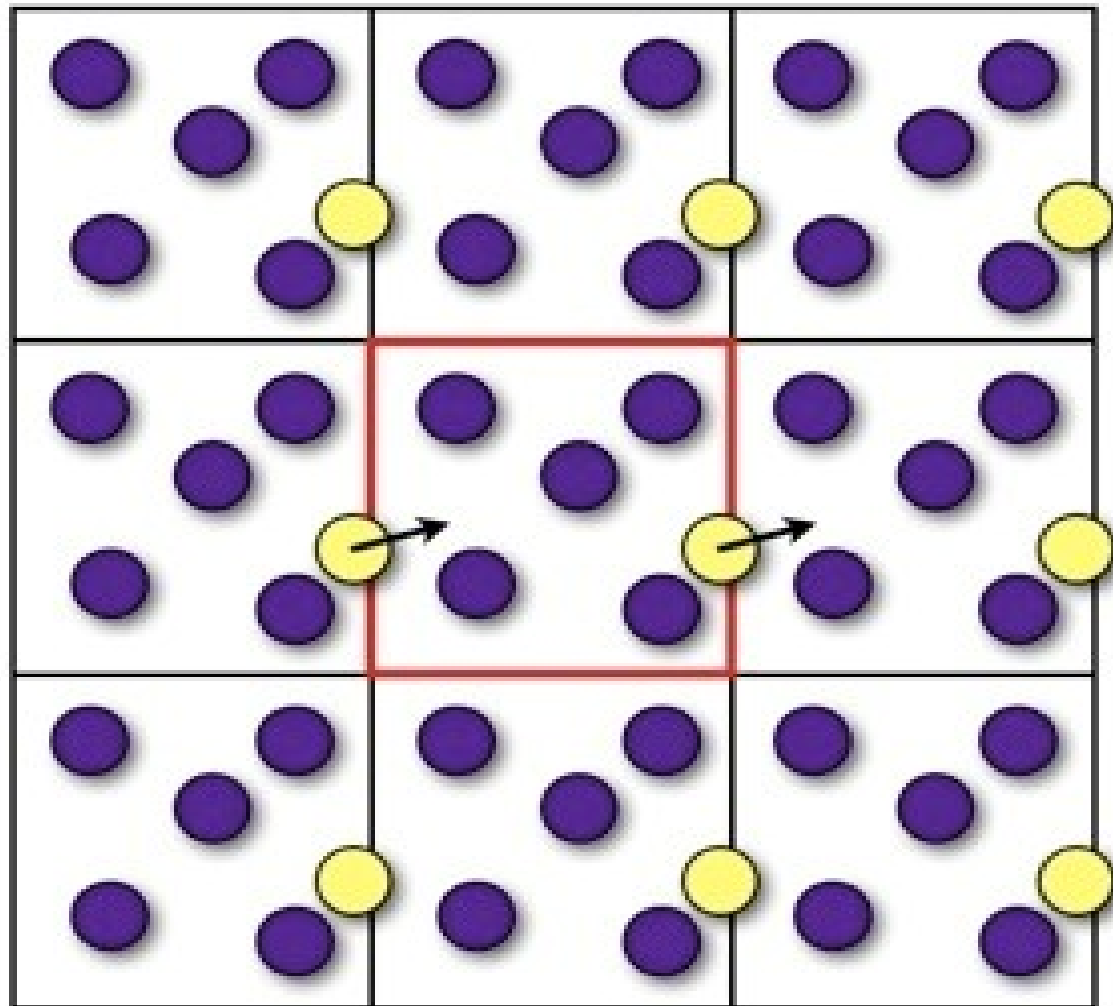


# MC – Metropolis

- NIC
- PBC
- Rc\_off
- optimizacija  
koraka
- Algoritem

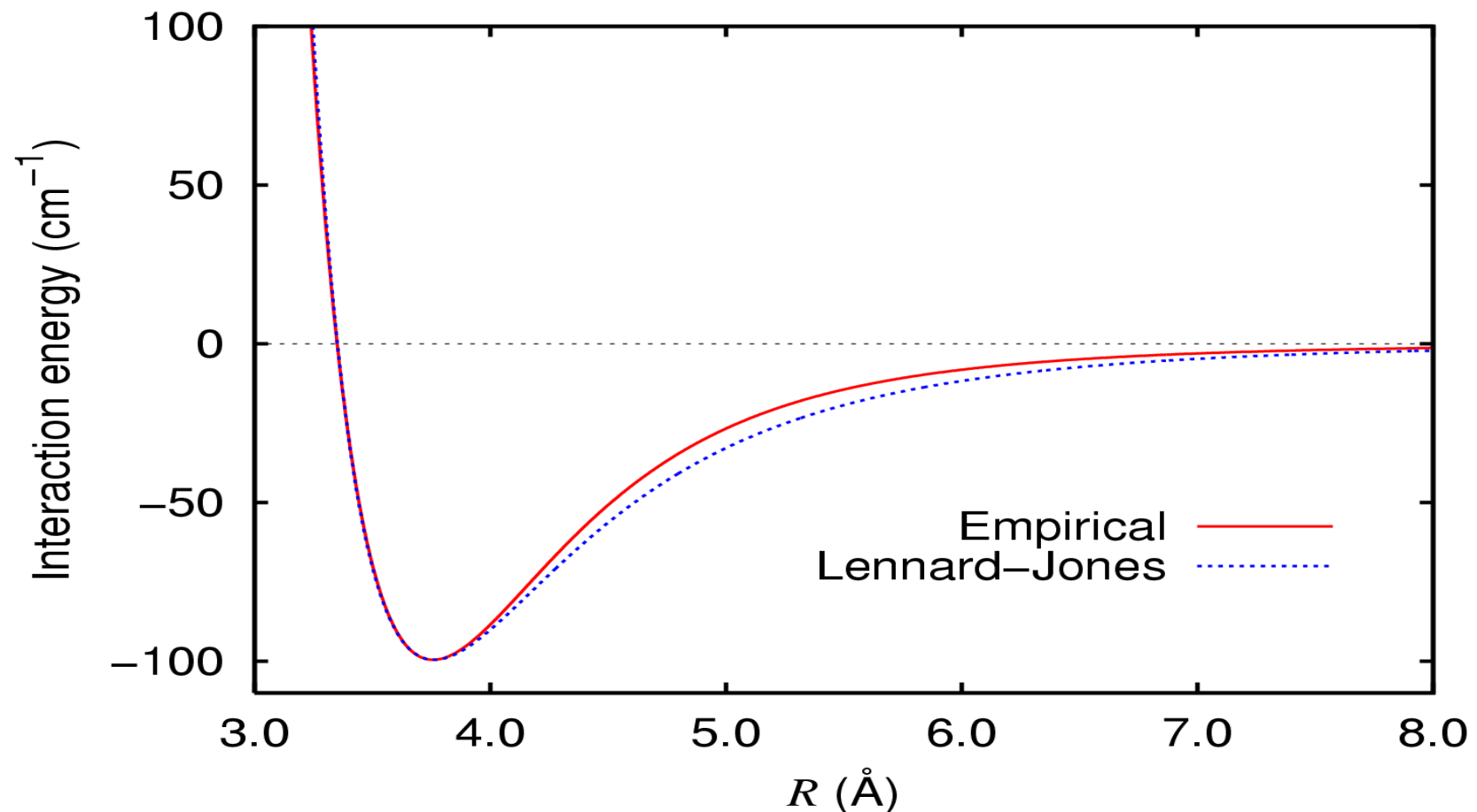


PBC

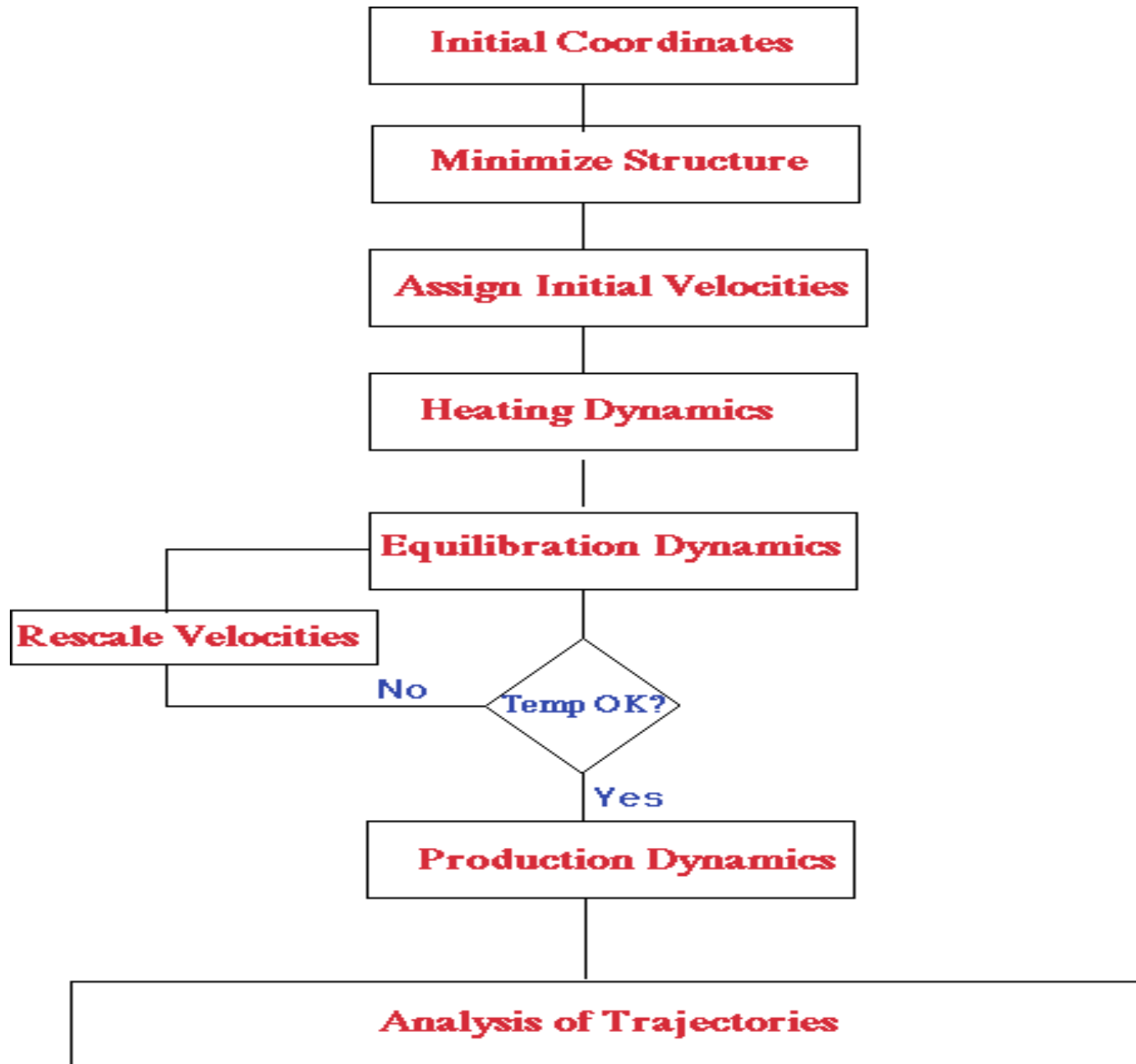


# Lennard-Jones

$$V(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$



# SIMULACIJA



# Še nekaj zanimivih MC simulacij

- Isingov model:

<http://www2.truman.edu/~velasco/ising.html>

[http://www.physics.buffalo.edu/gonsalves/ComPhys\\_1998/Java/Ising.html](http://www.physics.buffalo.edu/gonsalves/ComPhys_1998/Java/Ising.html)

<http://www.people.nnov.ru/fractal/perc/ising.htm>

- Fazni prehodi:

<http://www.people.nnov.ru/fractal/perc/contents.htm>

- Astrofizika:

<http://astro.u-strasbg.fr/~koppen/starpop/StarPop.html>

- Polimeri:

[http://sciencepark.etacude.com/simulations/mc/mc\\_applet.php](http://sciencepark.etacude.com/simulations/mc/mc_applet.php)

# Še nekaj zanimivih MC simulacij

- Finančni modeli:  
<http://www.mathfinance.wagner.com/PRODUCTS/RETIREMENT/RSP/primer.html>
- Sprehod pijanega mornarja:  
[http://www.chem.uoa.gr/Applets/AppletSailor/Appl\\_Sailor2.html](http://www.chem.uoa.gr/Applets/AppletSailor/Appl_Sailor2.html)
- “Chocolate Chip Simulation”:  
<http://mathdemos.gcsu.edu/mathdemos/cookiejava/CookieSim.html>