

Dr. Renato Lukač
Gimnazija Murska Sobota

Numerične metode v fiziki

Raziskovalni dnevi fizike
Bled

20.9.2011

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

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

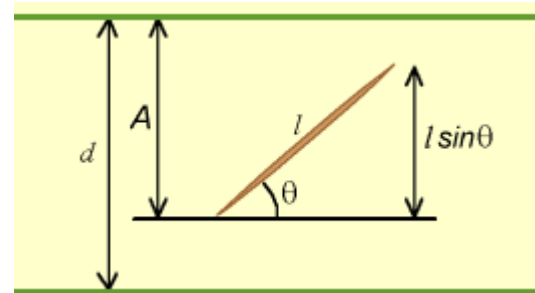
N število metov

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

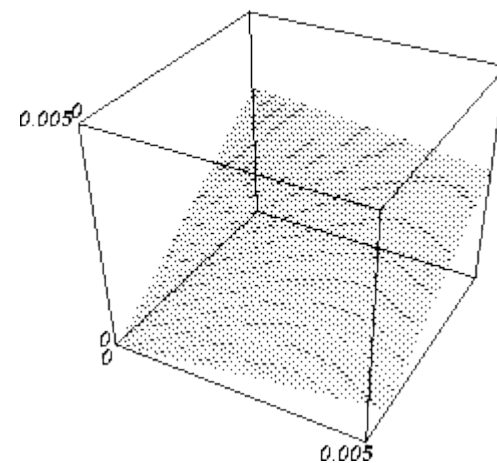
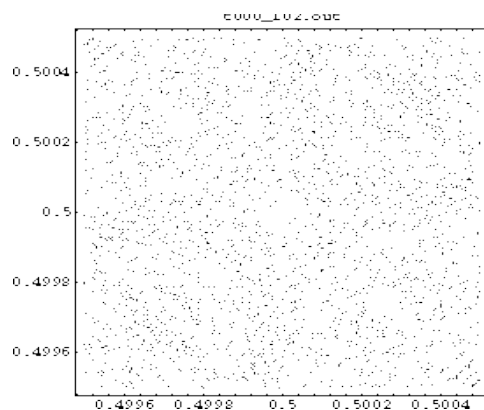
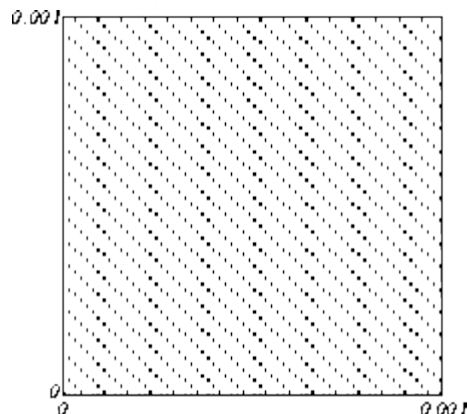
- 1886 Laplace; π
- 1901 Lord Kelvin; integrali
- 1908 Gossett “Student”; korelacijski faktorji
- 1930 Fermi; numerični poskusi z nevtroni
- 40. in 50. leta; Von Neumann, Fermi, Ulam, Metropolis

MC – slučajnost

- generator slučajnih števil:

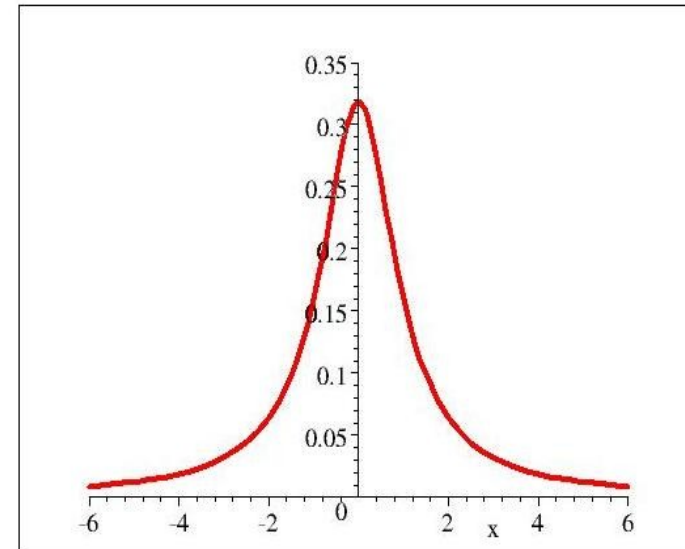
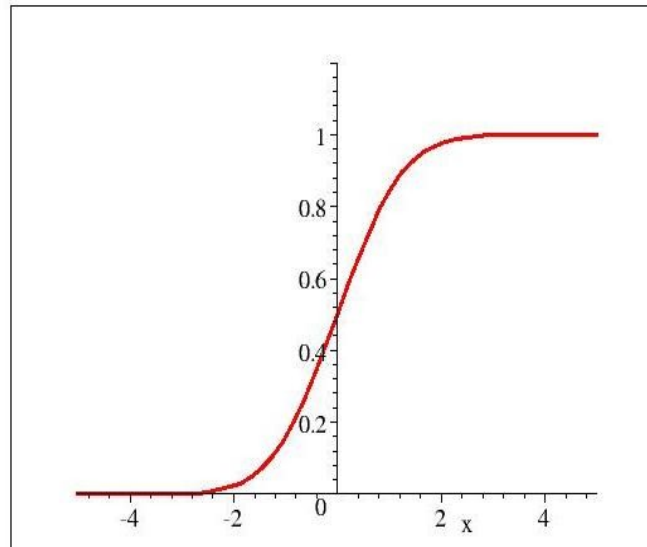
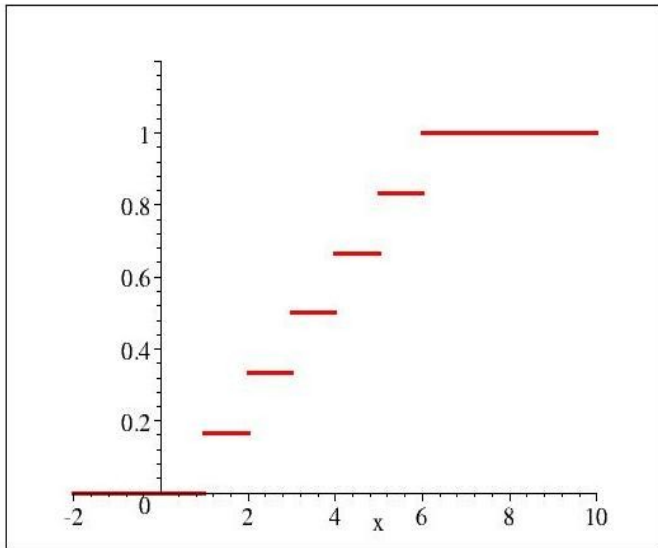
$$s_{n+1} = (a \cdot s_n + b) \bmod m$$

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.



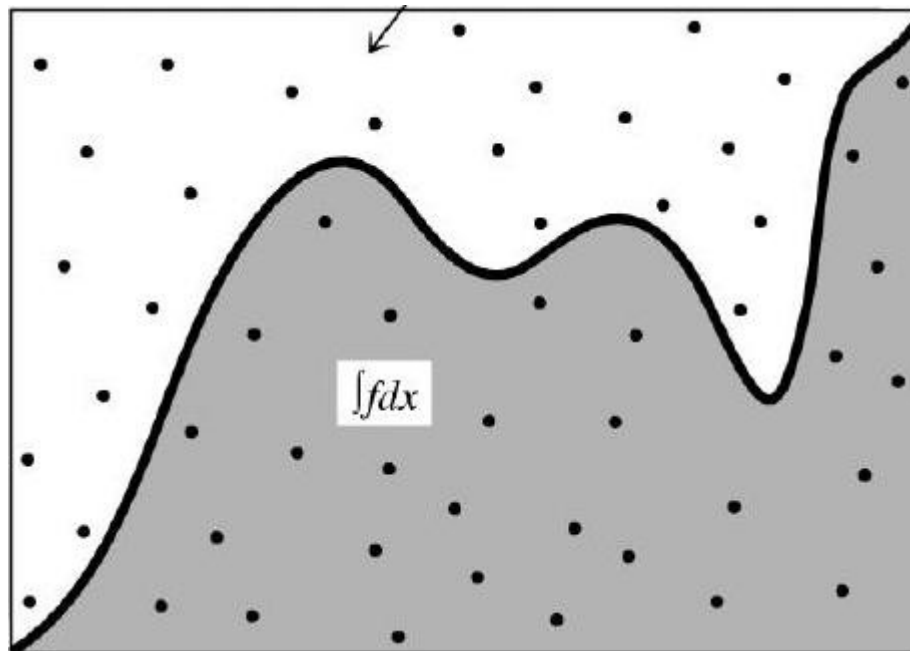
MC – slučajnost

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

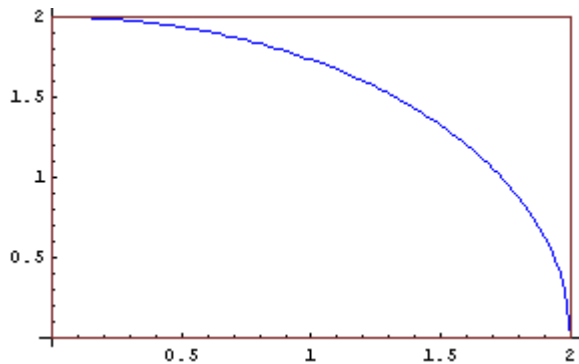


MC – integriranje

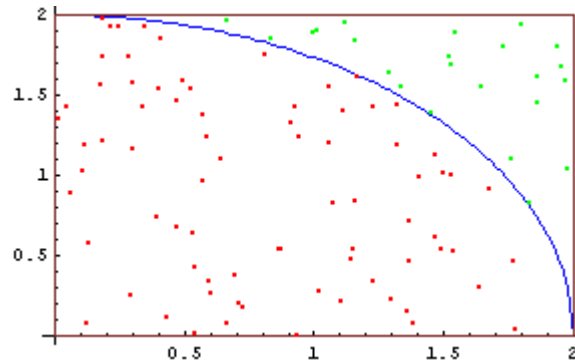
- ideja: število zadetkov sorazmerno s ploščino



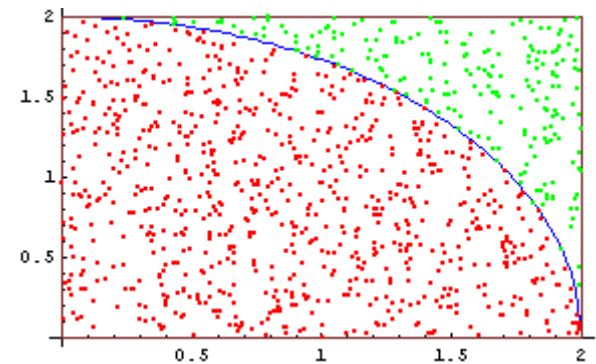
MC – integriranje



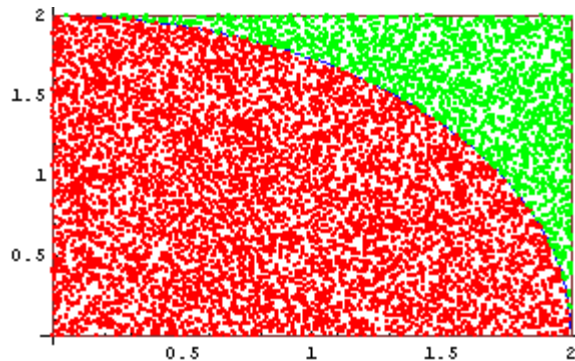
$n=0$



$n=100, S=3.08$



$n=1000, S=3.156$

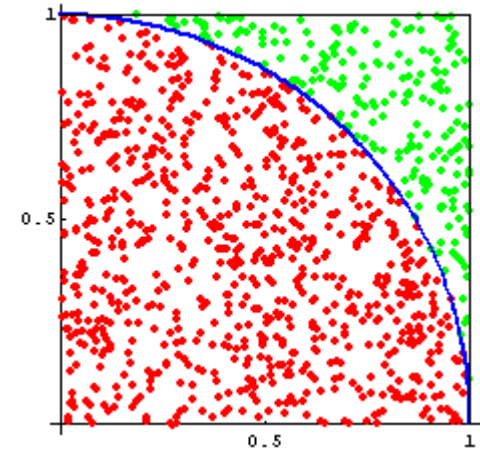
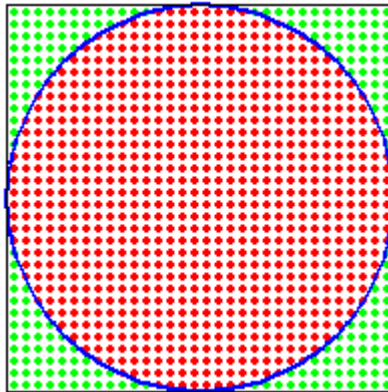
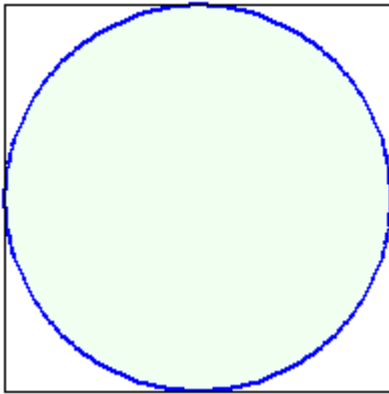


$n=10.000, S=3.142$

http://www.student.nada.kth.se/~f93-jhu/phys_sim/montecarlo/PolygonArea.htm

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

Krog in π



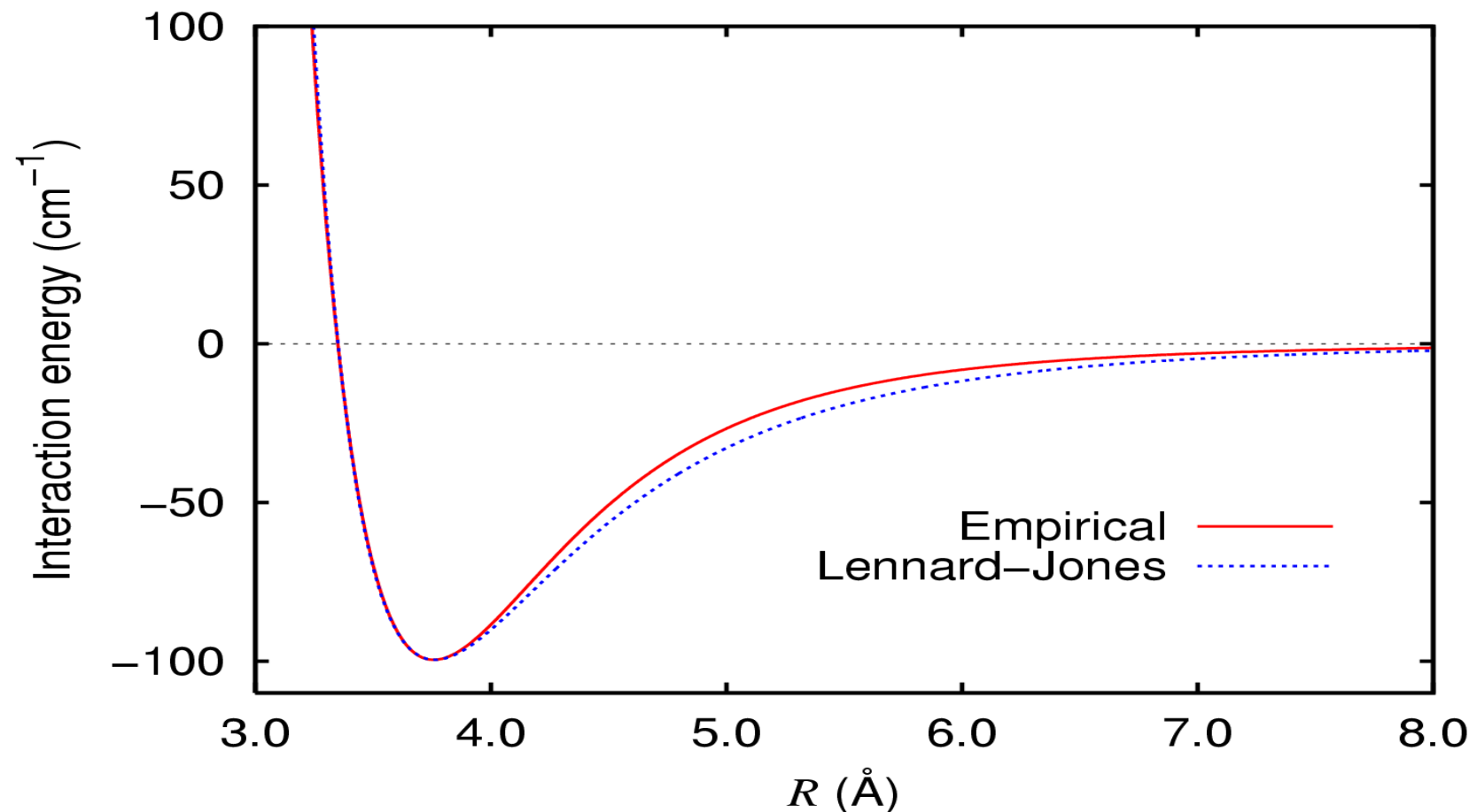
<http://polymer.bu.edu/java/java/montepi/montepiapplet.html>

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

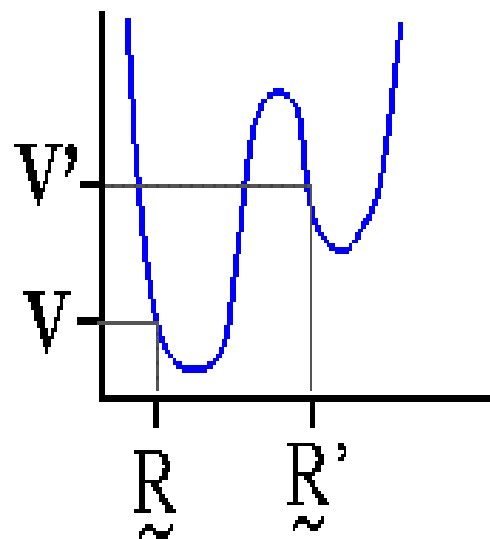
Lennard-Jones

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



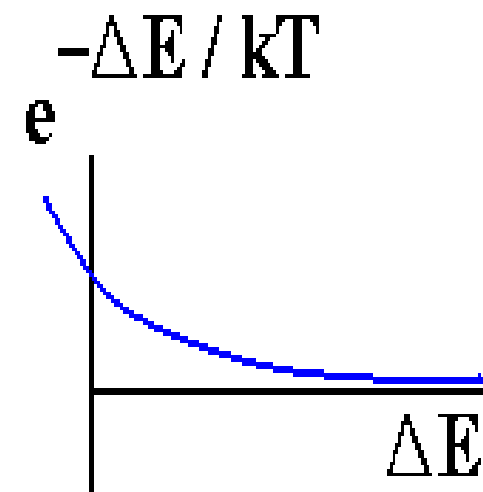
MC - Metropolis

MC compares energies. No forces calculated.



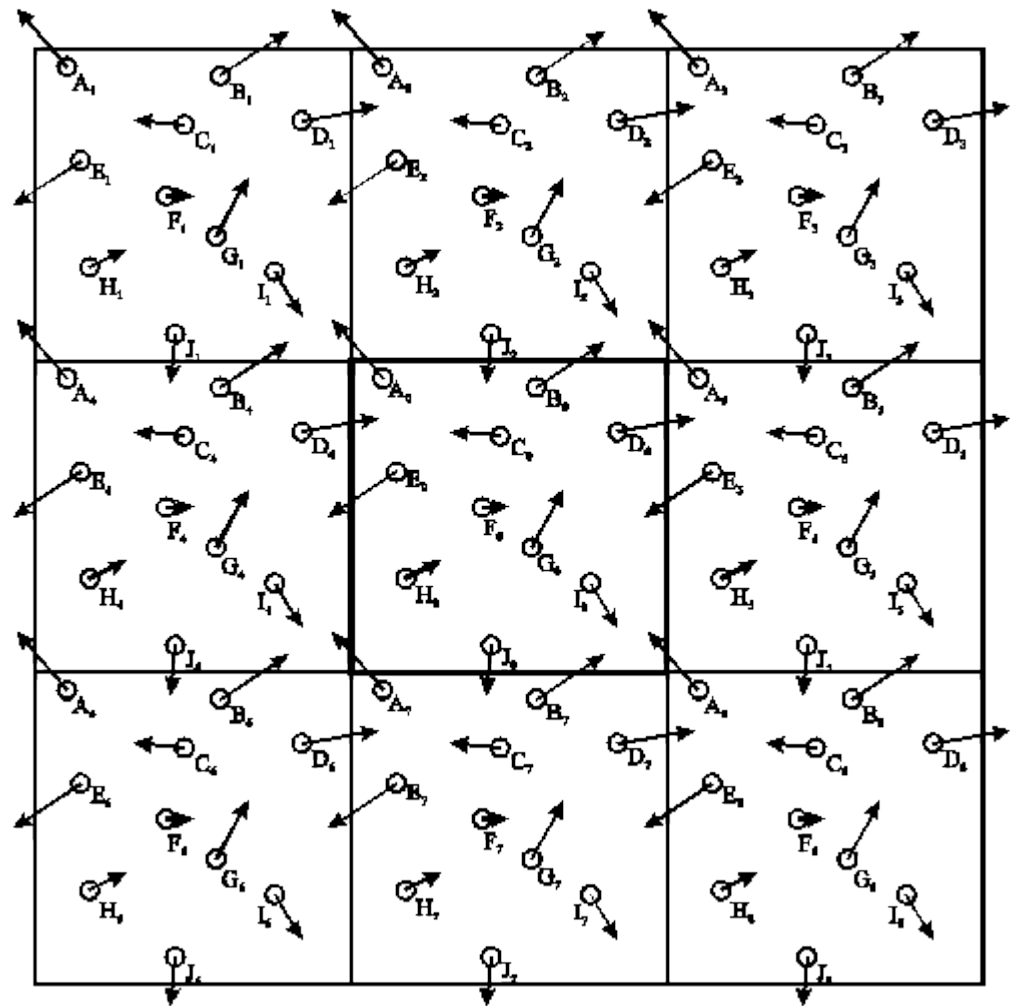
In equilibrium at T:

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

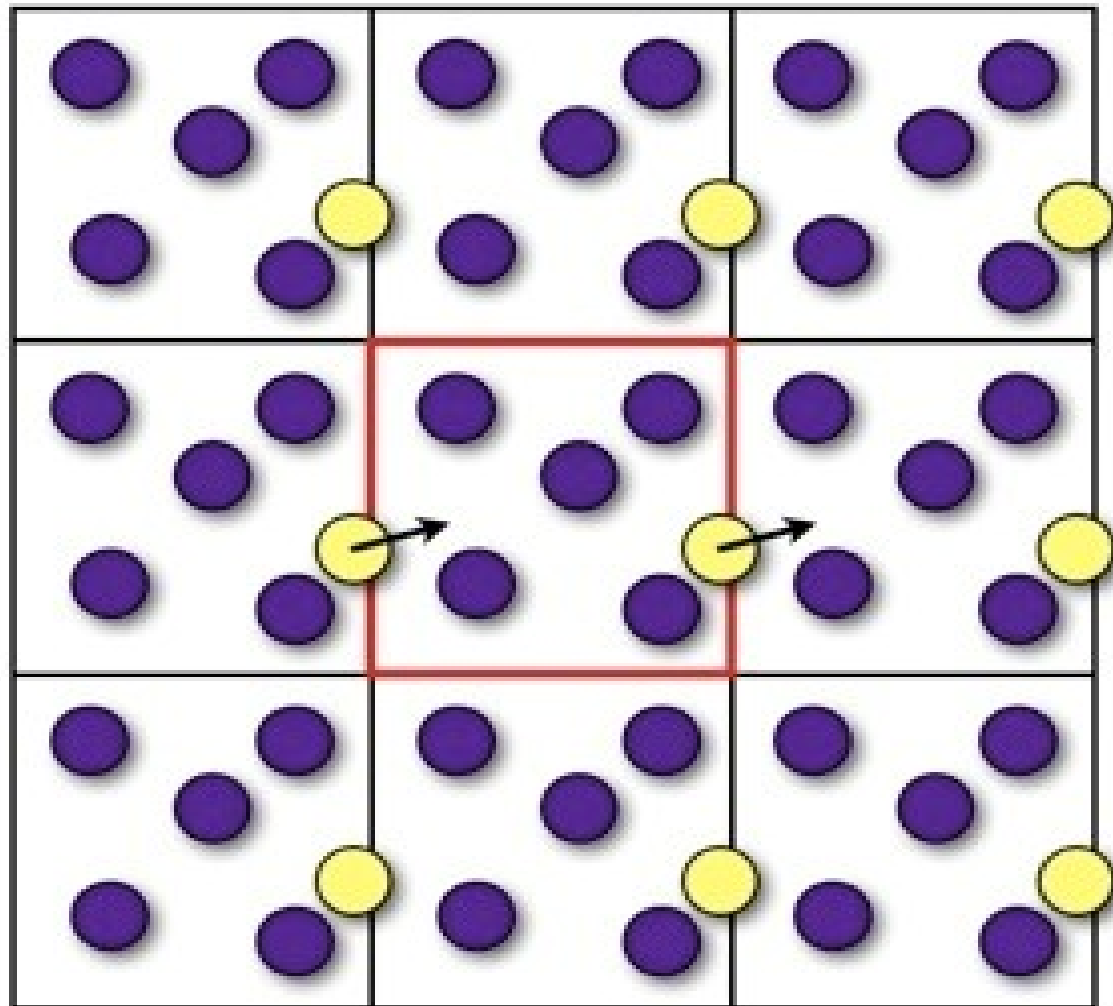


MC – Metropolis

- NIC
- PBC
- Rc_off
- optimizacija
koraka
- Algoritem

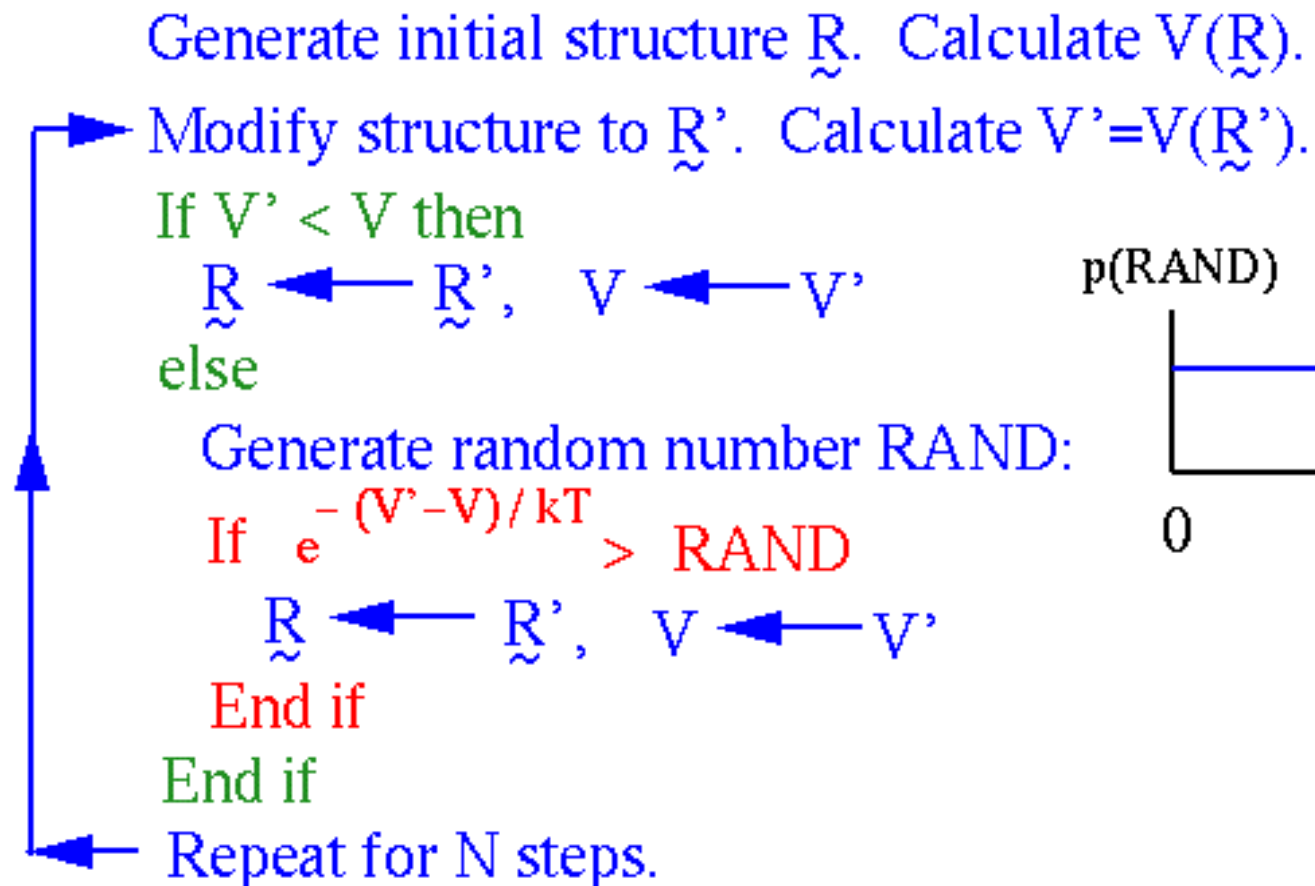


PBC



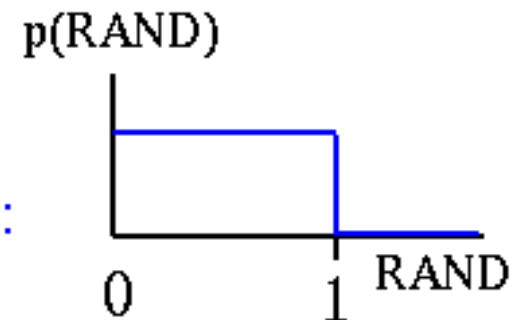
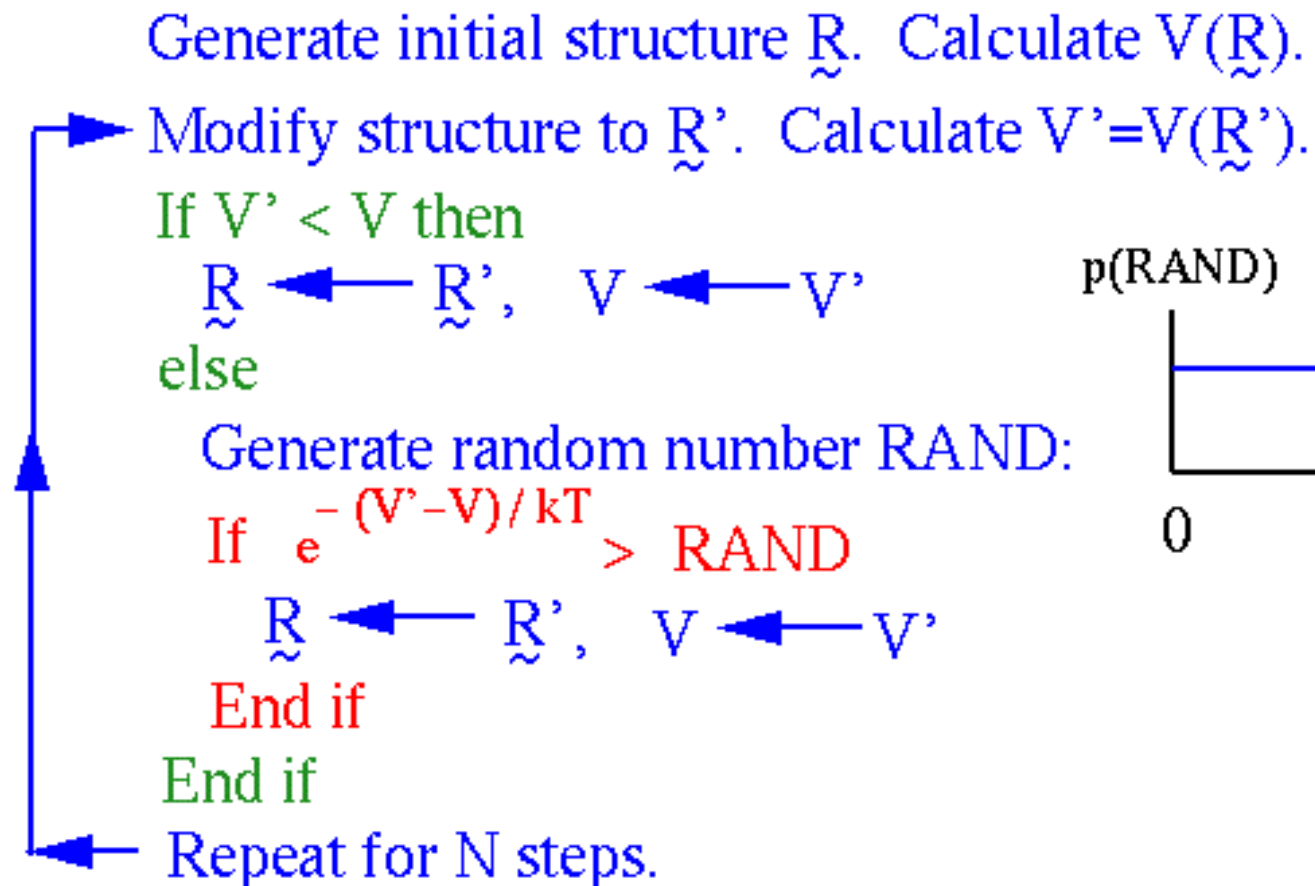
MC - Metropolis

Monte Carlo Algorithm

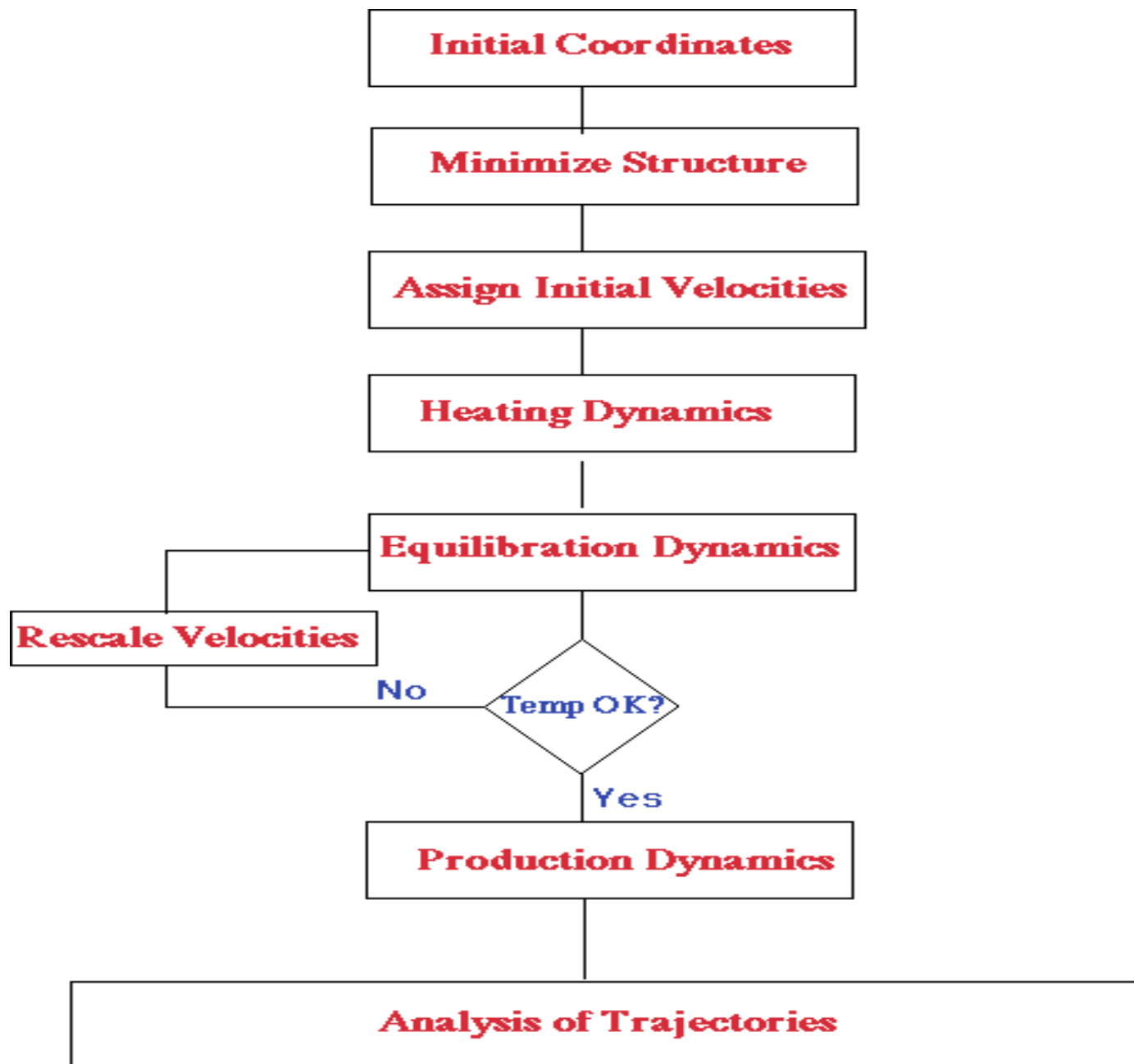


MC - Metropolis

Monte Carlo Algorithm



MD 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.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

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/App1_Sailor2.html

- “Chocolate Chip Simulation”:

<http://www.mathdemos.org/mathdemos/cookiejava/CookieSim.html>