

# Simulations in Statistical Physics

Course for MSc physics students

János Kertész

Lecture 10

## Házi feladatok stat. fiz. szimulációból (2009)

A feladatokat C, C++, vagy FORTRAN valamelyik változata programnyelveken kell megoldani. Mellékelni kell a forráskódot és a megoldás helyességét igazoló eredményeket, grafikonok, és vagy táblázatok formájában, az utóbbiakat pdf formátumban. A megoldásokat 1 teljes héttel a vizsga előtt kell elküldeni Tibély Gergely email címére ([tibelyg@gmail.hu](mailto:tibelyg@gmail.hu)). Kérjük, hogy a programokat bőségesen kommentálják, az ábrák és a grafikonok legyenek jól érthető feliratokkal, magyarázatokkal ellátva. Képzeljék magukat a javító helyébe!

A feladat megoldása *egyéni* munka!

A házi feladat sikeres elkészítése az aláírás feltétele.

1) Írjon Hoshen – Kopelman programot az egyszerű köbös rács rácspont-perkolációs problémájára helikális határfeltétellel. Vizsgálja meg, hogyan függ a futási idő a rendszer két paraméterétől, a  $p$  betöltési valószínűségtől és a rendszer  $L$  lineáris méretétől. Először rögzített  $L$  mellett vizsgálja CPU időt  $p$  függvényében, majd néhány jellegzetes  $p$  értéknél tanulmányozza az  $L$ -függést. Értelmezze az eredményt!

2) Határozza meg az irányított kötésperkoláció kritikus pontját, és kritikus exponenseit a teljesen irányított négyzetrácson!

3) Írjon Wolff algoritmuson alapuló Monte Carlo programot a négyzetrácson értelmezett, külső tér mentes háromállapotú Potts modellre!  $\mathcal{H} = -K \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{\sigma_i \sigma_j}$   $\sigma \in (1,2,3)$  A kötés valószí-

nűsége:  $p_B = 1 - e^{-\beta K}$ . Határozza meg véges méret skálázással a kritikus hőmérsékletet és a korrelációs hossz exponensét!

4) A „hátizsák probléma”-nál rendelkezésünkre áll  $N$  db tárgy, az  $i$ -edik tömege  $m_i$ , értéke  $v_i$ . A hátizsák legfeljebb  $M$  tömeget tartalmazhat. Határozza meg egy alkalmas genetikus algoritmus segítségével, hogy ilyen feltétel mellett milyen pakolással érhető el a legnagyobb értékű zsákmány? Legyen  $N = 100$ ,  $M = 100$ ,  $m_i \in (0, 100)$  véletlen szám egyenletesen eloszlata, az érték pedig  $v_i = m_i + \zeta_i$  ahol  $\zeta_i \in (0, 10)$  véletlen szám. Mi lesz az átlagos értéksűrűség (egységnyi tömegre eső érték)? Hogyan változik ez a paraméterek változtatásával?

5) Véletlen bolyongást rácson (Pólya-féle bolyongás) a négyzetes eltávolodáson kívül jellemezni lehet a meglátogatott különböző rácspontok  $S(t)$  számával is. A bolyongások elméletéből ismert, hogy egy dimenzióban  $S(t) \sim \sqrt{t}$ .

A Watts-Stogatz kis-világ hálózati modell a következő: Adott egy  $N$  csúcsból álló gyűrű, amelyen első és másodsomszéd élek vannak. Az élek  $p$  hányadát véletlenszerűen átkötjük.

Vizsgáljuk a véletlen bolyongást ezen a hálózaton. Nyilván  $p = 0$ -ra a szokásos összefüggést kapjuk  $S(t)$ -re. Ha  $p \neq 0$  akkor hosszú időkre lineáris függést várunk. Ilyen esetben 0 közelében egy skálázó átcsapási jelenséget várunk, amit az  $S(t) = t^{1/2} f(tp^\alpha)$  kifejezéssel lehet leírni. Határozzuk meg  $\alpha$ -t! Ehhez igen nagy rendszerekre, kis  $p$ -értékekre lesz szükség. Próbáljuk meg az  $S(t)/\sqrt{t}$  mennyiséget egyetlen változó függvényében ábrázolni! Az ábrázolásnál legyen  $\alpha$  paraméter, és az a legjobb érték, aminél össze lehet skálázni a különböző görbéket.

6) Írjon Verlet algoritmusos molekuladinamika programot kétdimenziós rendszerre periodikus határfeltétellel! Legyen Lennard-Jones kölcsönhatás az  $m = 6.7 \times 10^{-23} \text{g}$  tömegű atomok között:  $U(r) = 4\varepsilon[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6]$ ,  $\varepsilon/k_B = 119.8 \text{ K}$  and  $\sigma = 3.405 \times 10^{-10} \text{ m}$ . A potenciált vágjuk le  $r_{\max} = 2.5 \sigma$ -nál. Legyen a részecskék száma  $N = 256$ .

$T^* = 0.5$  dimenziótlan hőmérsékleten,  $n^* = 0.7$  dimenziótlan részecskeszám-sűrűségnél mérje meg a sebesség-autokorrelációs függvényt! Használjon periodikus határfeltételt és csatoljon a rendszerhez Nosé-Hoover termosztátot, amit termalizálás után kapcsoljon ki!

7) Vizsgáljuk a következő, egyetlen részvény árfolyammozgásának magyarázatára alkotott modellt. A részvényt ügynökök akarják megvásárolni, akik kommunikálnak egymással és koalíciókat kötnek. Ezeket modellezzük a szereplők között létrejött véletlen kötésekkel. Ilyen módon ügynökök fürtjei, klaszterei jönnek létre. Feltesszük, hogy egy fürtön belül minden ügynök ugyanolyan piaci keresletet jelent: az  $i$ -edik ügynök járuléka  $\phi_i$  (ami lehet negatív is). Ha  $k$  fürt van, és az  $\alpha$ -ikban  $W_\alpha$ , akkor a  $\Delta x$  árváltozás, vagy hozam a  $\lambda$  a likviditási tényezővel:

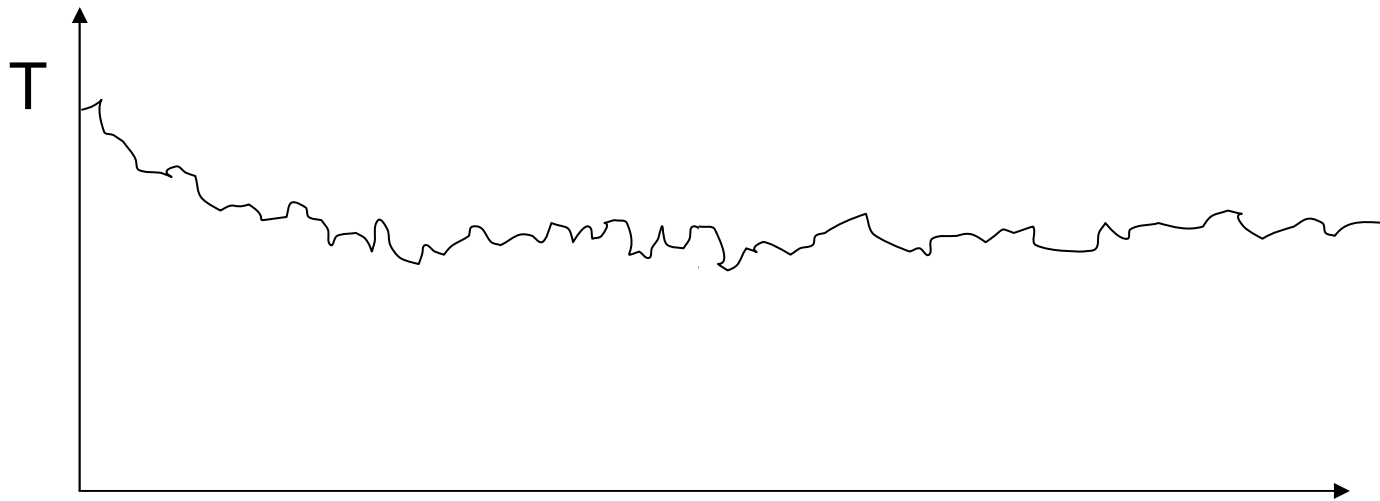
$$\Delta x = \frac{1}{\lambda} \sum_{\alpha=1}^k W_\alpha \phi_\alpha(t)$$

Feltesszük, hogy az ügynökök közötti kapcsolat valószínűsége  $p$ , függetlenül attól, hogy melyik párról van szó. Legyen  $p=1/N$ , ahol  $N=400$  az ügynökök száma. Határozza meg a hozam-eloszlást! Végezzen átlagolást a rendezetlenségre is (új fürtök generálása)!

## Molecular dynamics: Nosé-Hoover thermostat

Problem: In a closed system energy is conserved but  $T$  is given by the kinetic energy:

$$k_B T = \frac{1}{3N} \sum_i m v_i^2$$



The total energy is not distributed properly at the beginning



Solution: couple the system to a heat bath!

A new degree of freedom coupled to every other one.

Coupling to heat baths has thermal inertia  $Q$ .

The diagram consists of a central rectangular box containing two equations. Above the box, the word "friction" has an arrow pointing to the  $\xi \dot{\vec{x}}_i$  term in the first equation. To the left of the box, the words "measured kinetic energy" have an arrow pointing to the  $\frac{1}{2} Q \dot{\xi}$  term in the second equation. To the right of the box, the words "desired kinetic energy" have an arrow pointing to the  $\frac{1}{2} N d k T$  term in the second equation.

$$\ddot{\vec{x}}_i = \frac{\vec{f}_i}{m_i} - \xi \dot{\vec{x}}_i$$
$$\frac{1}{2} Q \dot{\xi} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \dot{\vec{x}}_i^2 - \frac{1}{2} N d k T$$

Negative feedback: if  $T$  too low,  $\xi$  grows, if too high, it increases.  
The choice of  $Q$  has to compromise between slow convergence and spurious oscillations

A piston of mass  $W$  adapts the volume.

$$\ddot{\vec{x}}_i = \frac{\vec{f}_i}{m_i} - \frac{\dot{V}}{3V} \dot{\vec{x}}_i \quad \leftarrow \begin{array}{l} \text{additional} \\ \text{force} \end{array}$$
$$W\ddot{V} = \underbrace{\frac{1}{3V} \sum_{i=1}^N m_i \dot{\vec{x}}_i^2 + \frac{1}{3V} \sum_{i=1}^N \vec{f}_i \cdot \vec{x}_i}_{\text{instantaneous pressure } \mathcal{P}} - p$$

## Event driven MD

If the potential is very steep and short ranged, in extreme case:

hard sphere; the discrete time step methods do not work.

Instead, the collisions are considered as instantaneous events,

between them there is no interaction, particles fly freely.

No forces are calculated.

- Calculate the possible collisions between particles following their trajectories pair wise.
- \* Take the shortest collision time for the next event
- Obtain the velocities after the collision
- Calculate the new collision times
- Go to \*

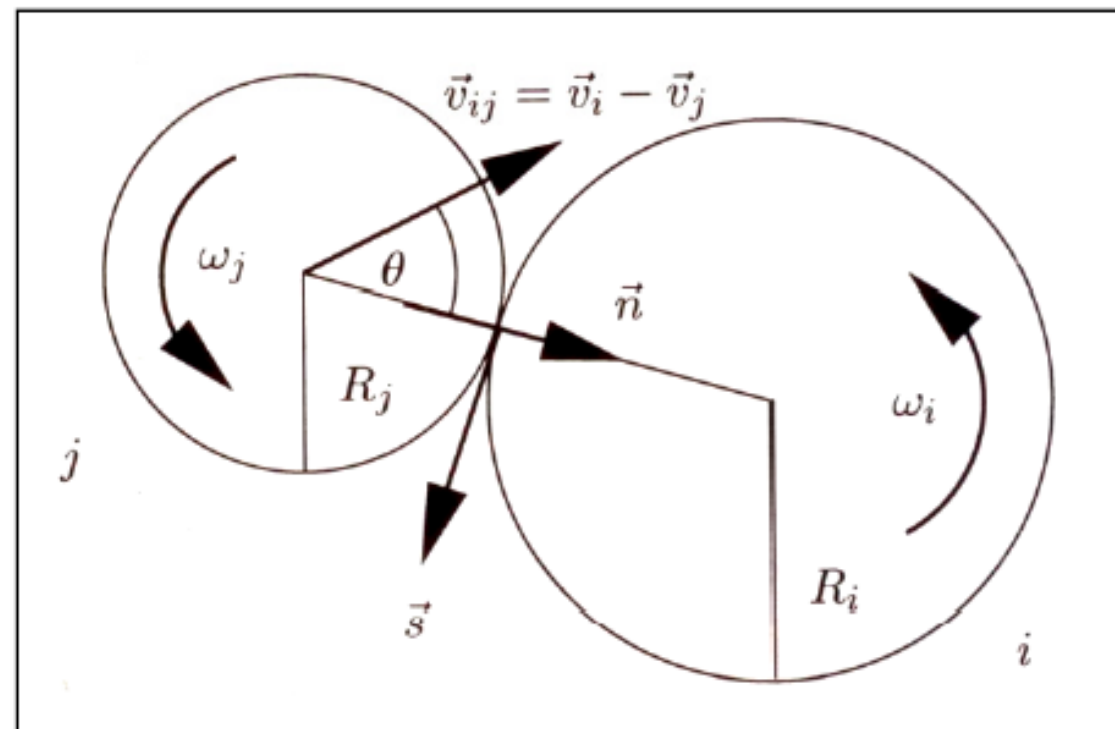
Consider (in 2d) the collision of two rigid disks  $i$  and  $j$ :

The „collision angle“  $\theta$  is the angle between

$$\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$$

and relative  
velocity

$$\vec{v}_{ij} = \vec{v}_i - \vec{v}_j$$



Calculate for each pair of particles (i,j) the time  $t_{ij}$  when the next collision will occur.

$$\begin{aligned} |\vec{r}_{ij}(t_{ij})| &= R_i + R_j \\ \Rightarrow |\vec{r}_{ij}(t_0) + \vec{v}_{ij}t_{ij}| &= R_i + R_j \end{aligned}$$

$t_0$  is the time at which the last collision occurred and we set  $r_{ij} = r_{ij}(t_0)$ .

$$\Rightarrow v_{ij}^2 t_{ij}^2 + 2(\vec{r}_{ij} \vec{v}_{ij}) t_{ij} + r_{ij}^2 - (R_i + R_j)^2 = 0$$

The time  $t_c$  when the next collision occurs in the system is then the minimum over all pairs (i,j):

$$t_c = \min_{ij} (t_{ij}) \quad \text{occurring for pair } (i_0, j_0).$$

Unfortunately the loop to calculate  $t_c$  is of order  $N^2$  but tricks due to Lubachevski (1992) allow to reduce this to order  $N \log(N)$ . Due to the global minimization the algorithm is neither parallelizable nor vectorizable. Once  $t_c$  has been determined one moves particles by:

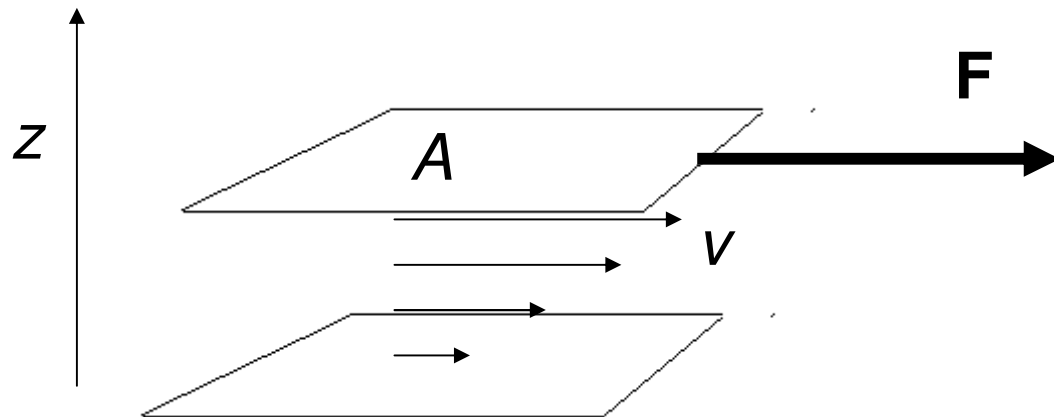
$$\vec{r}_i' = \vec{r}_i + \vec{v}_i t_c \quad \text{and} \quad \phi_i' = \phi_i + \omega_i t_c \quad \forall i$$

Then the collision between the pair  $(i_0, j_0)$  occurs.

## Non-equilibrium MD

Transport phenomena can be directly simulated and the transport coefficients measured according to the definitions.

Viscosity:



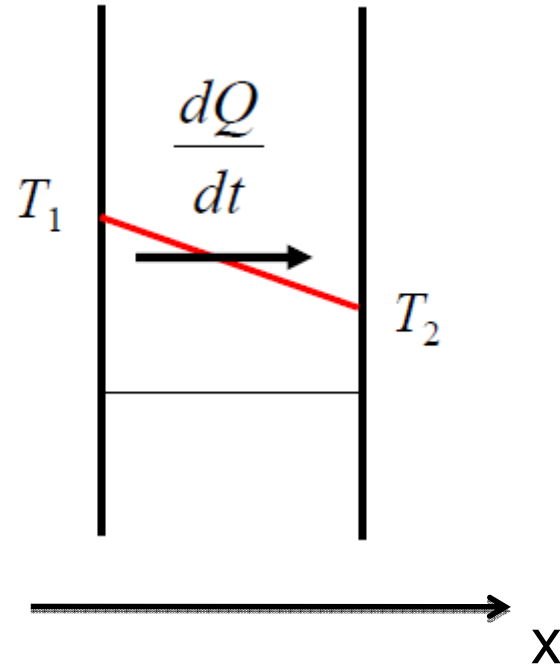
$$F = \eta A \frac{dv}{dz}$$

This can be achieved by using periodic boundary conditions in x and y directions + a bumpy surface of area  $A$  moved by different velocities in the z direction. The force can be measured by transferred momenta per unit time.

For heat conduction we start from the corresponding transport equation (Fourier law):

$$H = \frac{dQ}{dt} = -\lambda A \frac{dT}{dx}$$

where  $H$  is the heat flux,  $T$  the temperature,  $A$  the area and  $\lambda$  is the heat conductivity



While it is possible to calculate the transport coefficients directly it is often useful to use fluctuation dissipation theorem and calculate them from equilibrium averages.



How to calculate transport coefficients from equilibrium ?

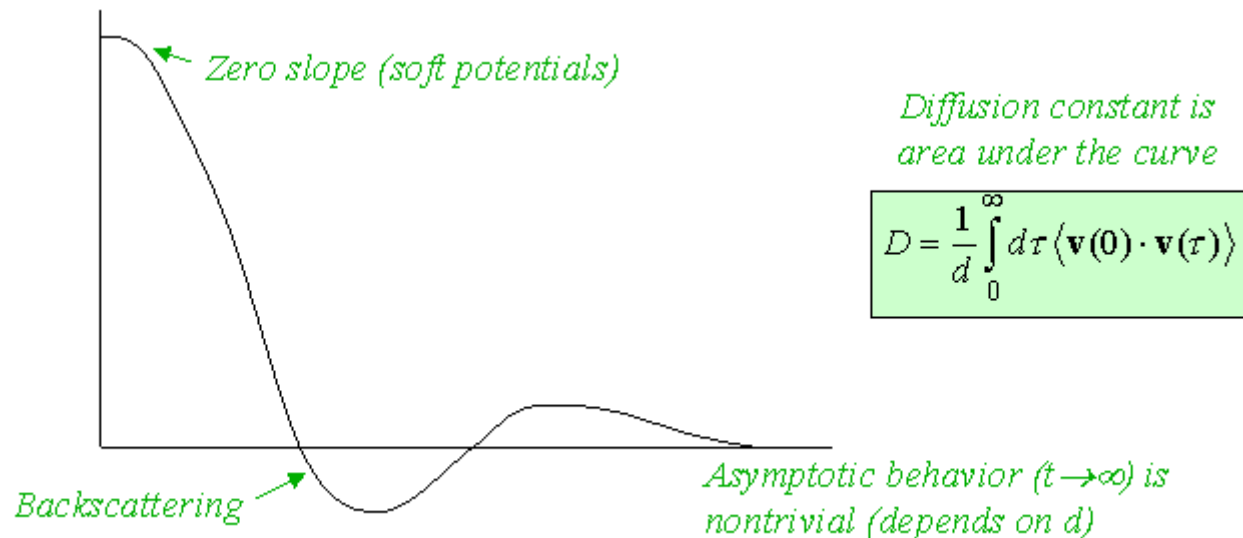
Kubo formula  $\rightarrow$

transport coeff  $\sim$  time integral of current-current correlation fn

$$D = \frac{1}{3} \int_0^{\infty} \langle \mathbf{v}(0) \mathbf{v}(t) \rangle dt$$

Here  $\langle \rangle$  means equilibrium average, which in practice is carried out over all particles and many initial times  $t'$ , since


$$\langle \mathbf{v}(0) \mathbf{v}(t) \rangle = \langle \mathbf{v}(t') \mathbf{v}(t'+t) \rangle$$



Viscosity:

$$\eta = \frac{1}{VkT} \int_0^{\infty} dt \langle \sigma^{xy}(t) \sigma^{xy}(0) \rangle$$

Stress tensor


$$\sigma^{xy} = \sum_{i=1}^N \left[ m_i v_i^x v_i^y + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} x_{ij} f_y(r_{ij}) \right]$$

Heat conductivity:

$$\lambda_T = \frac{1}{VkT^2} \int_0^{\infty} dt \langle q(t) q(0) \rangle$$

$$q = \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^N \left[ \frac{1}{2} m_i v_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} u(r_{ij}) \right]$$