

Simulace ve fyzice mnoha částic TMF021 – zkušební otázky 2022/23

1. Integrace metodou MC – prosté a preferenční vzorkování, centrální limitní věta a chyba metody MC, porovnání se standardní numerickou integrací. Generování pseudonáhodných čísel s obecným rozdělením.
2. Stochastické procesy, matice přechodu, Markovovy řetězce, detailní rovnováha, podmínka mikroskopické reverzibility, existence limitního rozdělení.
3. Realizace Monte Carlo kroku při kanonickém rozdělení (generování a přijetí zkušební konfigurace). Metropolisova a Barkerova metoda.
4. Užití MC pro geometrické problémy: náhodné procházky, jev perkolace (výpočet prahu, Hoshenův-Kopelmanův algoritmus), difúzí limitovaná agregace.
5. Termodynamické MC – ukázka na Isingově modelu; využití metody MC pro optimalizační úlohy, metoda žíhání.
6. Kinetické Monte Carlo, princip metody, BKL algoritmus, čas v KMC.
7. Celulární automaty (CA) – typy a definice CA, závislost počtu CA na dimenzi, příklady CA.
8. Verletův a Gearovy integrátory MD, volba integrátoru a integračního kroku.
9. Radiální distribuční funkce, vyjádření střední hodnoty veličiny (např. energie) pomocí integrálu párové funkce (např. potenciálu) a RDF, dlouhodobá korekce energie.
10. Teplota v MD, termostaty (přeškálování rychlostí, Berendsenův frikční, Andersenův).
11. Měření tlaku v MD/MC, MD simulace při konstantním tlaku; NPT soubor v MC.
12. Molekulární potenciály (intermolekulární a intramolekulární), kombinační pravidla.
13. Technické detaily MC – algoritmus pro výpočet změny energie, generování zkušebního posunutí, zlomek přijetí, dosah potenciálu vs. velikost systému, okrajové podmínky.
14. Neboltzmannovské vzorkování konfiguračního prostoru, metody pro efektivní vzorkování konfiguračního prostoru (principy metadynamiky, potenciálu střední síly, parallel tempering).