

Úlohy z MC simulací k přednášce NTMF024

pro rok 2021/2022

Úloha KH1: Modelování růstu krystalu pomocí kinetického Monte Carla

Uvažujte jednorozměrný model růstu krystalu na mřížce s periodickými okrajovými podmínkami, simulujte ho pomocí kinetického Monte Carla a studujte závislost hrubosti povrchu (podrobnosti viz poznámky na webu) na čase a nastavených rychlostních konstantách.

V každém místě mřížky je růst simulován změnami výšky sloupce krystalu (počet částic na sobě), přitom možné procesy jsou

1. depozice na první neobsazené místo v libovolném sloupci,
2. evaporace z vrcholu libovolného sloupce, který má nenulovou výšku,
3. migrace z vrcholu libovolného sloupce na sousední sloupec, pokud je sousední nižší nebo stejně vysoký.

Každý proces α je charakterizovaný svou rychlostí R_α (počet elementárních událostí daného procesu za sekundu), ale v průběhu růstu krystalu se mění počet elementárních událostí evaporace a migrace, které můžou nastat. Rychlosti R_α můžete pro jednoduchost uvažovat konstantní, nebo pro realističtější modely uvažovat různé rychlosti procesů podle počtu vazeb či teplotně závislé rychlostní konstanty. Podrobnosti o volbě teplotních závislostí viz např. článek M. Kotrly: *Numerical simulation in the theory of crystal growth*, Comp. Phys. Comm. 97 (1996) 82.

Úloha KH2: Využití metody Monte Carlo na problém obchodního cestujícího

Uvažujte problém obchodního cestujícího v rovině, buď s náhodně rozmístěnými městy a Euklidovskými vzdálenostmi mezi nimi, nebo s předem zadanými souřadnicemi měst a jejich vzdáleností. Pomocí metody Monte Carlo v analogii s řešením problémů ve statistické fyzice, kdy zavádíme uměle teplotu, kterou postupně snižujeme (simulace žíhání), naleznete přibližné řešení optimalizační úlohy spočívající v hledání nejkratší uzavřené cesty procházející všemi městy. Roli energie v Boltzmannovském faktoru hraje délka cesty (viz poznámky k přednášce).

Porovnejte výsledky simulací pro různé volby testovací permutace, například

1. transpozice dvou náhodných měst v každém kroku,
2. transpozice dvou měst, z nichž jedno volíme např. postupně a druhé náhodně,
3. otočení směru části cesty mezi dvěma náhodně vybranými městy,
4. otočení směru části cesty mezi dvěma městy, z nichž jedno volíme např. postupně a druhé náhodně.

Případně můžete proces ještě zefektivnit volbou druhého města "poblíž" prvního, což se doporučuje především ke konci simulace při nižších teplotách, kdy jsou větší změny téměř s jistotou odmítnuté. Podrobnosti implementace můžete nalézt např. v článku V. Černého: *Thermodynamical Approach to the Traveling Salesman Problem: An Efficient Simulation Algorithm*, J. Optim. Theory and Appl. 45 (1985) 41.