

NEKATERE NOVEJŠE METODE PRI SIMULACIJAH MONTE CARLO V STATISTIČNI FIZIKI

TOMAŽ MERTELJ

Fakulteta za matematiko in fiziko
Univerza v Ljubljani

PACS: 05.10.-a, 05.10.Ln

V članku so na kratko opisane nekatere najbolj pogoste metode, ki jih uporabljamo pri simulacijah Monte Carlo v statistični fiziki. Najstarejši Metropolisov algoritem je osnova, iz katere izhajajo vsi novejši algoritmi. Med novejšimi algoritmi so opisani le tisti bolj univerzalni. Njihov cilj je izboljšati ergodičnost pri simulacijah v sistemih, kjer ima energija več lokalnih minimumov.

SOME NEW METHODS FOR MONTE CARLO SIMULATIONS IN STATISTICAL PHYSICS

Some most widespread methods which are used in Monte Carlo simulations in statistical physics are briefly described. The oldest Metropolis algorithm is a foundation for all newer algorithms. Here we present only the most universal ones. Their common goal is to improve ergodicity of simulations in systems where there are several local minima of the energy.

Uvod

Prodor računalniške tehnologije v vse pore našega življenja se kaže tudi v znanosti. Tako so računalniške simulacije postale pomembno orodje pri raziskavah tudi v fiziki, kemiji, biokemiji in na mnogih drugih področjih. Ena od družin simulacij, ki jih pogosto srečamo v statistični fiziki, temelji na uporabi zaporedij naključnih števil. Simulacije iz te družine se zato imenujejo po mestu Monte Carlo, ki je med drugim znano tudi po igrah na srečo.

Uporaba simulacij Monte Carlo v statistični fiziki sega že na sam začetek dobe digitalnih računalnikov, ko je Metropolis s sodelavci odkril učinkovit algoritem zanje [1]. Metropolisov algoritem, ki je zelo enostaven, a ima v nekaterih primerih težave z ergodičnostjo, so kasneje mnogi avtorji nadgradili na različne načine. Osnovne ideje nekaterih od teh nadgradenj bom predstavil v tem članku, za podrobnejši pregled z bolj popolnim seznamom literature pa priporočam pregledni članek [2].