

MONTE CARLO SIMULATIONS

NTIGKARIS ALEXANDROS

1. Hard discs

Συνοπτικά:

Δημιουργούμε μια διάταξη σωματιδίων εντός των ορίων ενός κουτιού, στα οποία προτείνουμε τυχαίες μετατοπίσεις.

Αρχικά, ορίζουμε τις παραμέτρους της προσομοίωσης: τον αριθμό των σωματιδίων, την πυκνότητα τους και την ακτίνα τους. Με αυτές τις παραμέτρους καλούμε την *hcr*.

hcr.m

Η συνάρτηση αρχικά ελέγχει αν ο αριθμός των σωματιδίων είναι τέλειο τετράγωνο. Σε περίπτωση που δεν είναι, επιστρέφει μηδενικές τιμές στα return values της. Υπολογίζει

μετά την απόσταση μεταξύ των κέντρων δυο σωματιδίων μέσω της σχέσης $\sqrt{\frac{2\pi r^2}{\sqrt{3} \cdot d}}$

με r : ακτίνα, d : πυκνότητα. Στην συνέχεια υπολογίζει μέσω της *sepDist* τις διαστάσεις του κουτιού Lx , Ly και μέσω της *linspace* δημιουργεί τα vectors των διαστάσεων x και y , το καθένα αποτελούμενο από $\sqrt{\text{particles}}$ σημεία. Τέλος με την συνάρτηση *meshgrid* επιστρέφει μια διάταξη δισδιάστατων συντεταγμένων οι οποίες ορίζουν τις θέσεις των κέντρων των σωματιδίων.

Δημιουργώντας λοιπόν την διάταξη που θα έχουν οι συντεταγμένες, καλούμε την συνάρτηση *plotConfig*.

PlotConfig.m

Η συνάρτηση δέχεται ως παραμέτρους τις συντεταγμένες, τις διαστάσεις του κουτιού και την ακτίνα των σωματιδίων. Ελέγχει αρχικά αν οι παράμετροι που έλαβε είναι τέσσερις. Ειδάλλως ορίζει default την ακτίνα 0.25. Έπειτα σχηματίζει το περίγραμμα του κουτιού με τις μεταβλητές *outlineX*, *outlineY* και για κάθε σωματίδιο το αναπαριστά με ένα κύκλο με ακτίνα που ορίζεται default από το πρόγραμμα ή τον χρήστη, μέσω μιας απλής συνάρτησης *plotCircle*.

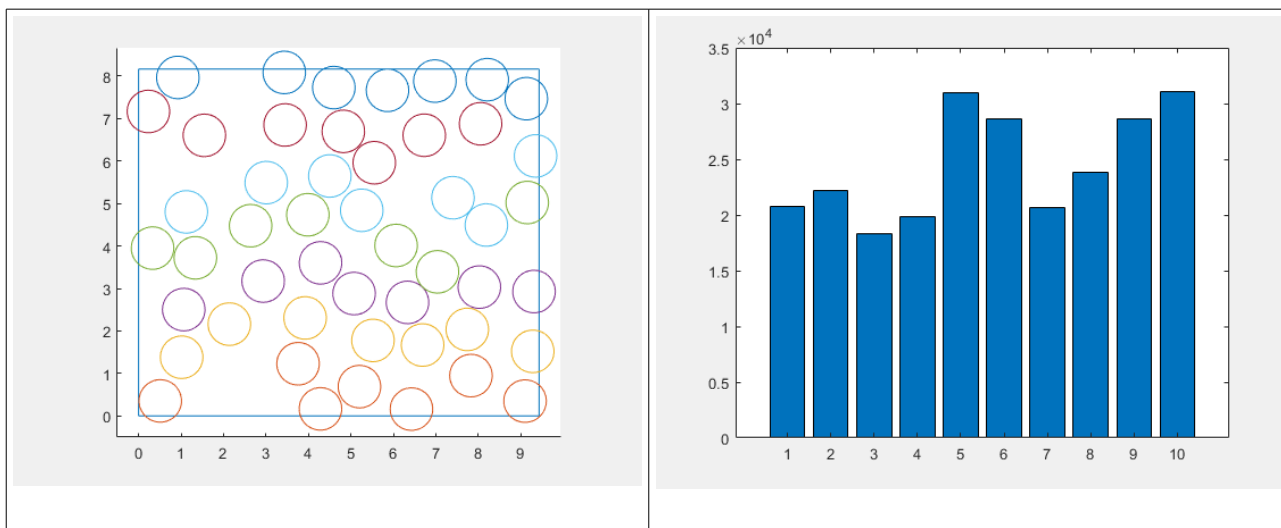
Αφού λοιπόν οπτικοποιήσουμε την αρχική διάταξη των σωματιδίων, ξεκινάμε την προσομοίωση. Ορίζουμε αρχικά τα βήματα, την μέγιστη μετατόπιση και την συχνότητα με την οποία θα εμφανίζονται οι μετακινήσεις των σωματιδίων στο σχήμα. Σε κάθε βήμα, για κάθε σωματίδιο προτείνουμε μια δισδιάστατη μετατόπιση r_{Trial} από την αρχική θέση *coords(:,part)* κατά $\text{rand}(2,1) \cdot 0.5$ περιορισμένη όμως από την μέγιστη επιτρεπτή μετακίνηση *maxDr*. Με την συνάρτηση *checkCollision* ελέγχουμε την διαφορά της νέας θέσης του σωματιδίου με τις θέσεις των υπολοίπων σωματιδίων και αν η νέα θέση του σωματιδίου θα συμπίπτει με την θέση ενός

άλλου σωματιδίου . Στην συνέχεια ελέγχουμε αν η μετατόπιση έχει θετική τιμή και βρίσκεται εντός των ορίων του κουτιού. Αν πληρούνται αυτές οι προϋποθέσεις, δεχόμαστε την μετατόπιση. Στο τέλος κάθε βήματος τροφοδοτούμε τις συντεταγμένες των σωματιδίων στην *histogram*.

histogram.m

Η *histogram* χωρίζεται από δύο if εντολές. Η πρώτη εκτελείται μόνο αν η *histogram* καλείται για πρώτη φορά. Στην πρώτη if, δημιουργεί το πλήθος των *bins* του ιστογράμματος και ελέγχει αν το πλήθος είναι τέλειο πολλαπλάσιο. Δημιουργεί επίσης δύο πίνακες, τους *histo* και *values*, με μήκος *bins*. Κατά την δεύτερη if, ελέγχουμε αν η τιμή που τροφοδοτούμε στην *histogram* είναι εντός του διαστήματος *range* και αναθέτουμε σε αυτήν το κατάλληλο index από το πλήθος των *bins*.

Κάθε *simFreq* βήματα εμφανίζουμε τις αλλαγές στην διάταξη. Αφού τελειώσει η προσομοίωση, δημιουργούμε το ιστόγραμμα των τιμών με την βοήθεια της *histogram*.



Τα σωματίδια κάνουν τυχαίες κινήσεις με τα κέντρα τους να μην ξεπερνάνε τα όρια του κουτιού.

2. Hard discs with PBC

Συνοπτικά:

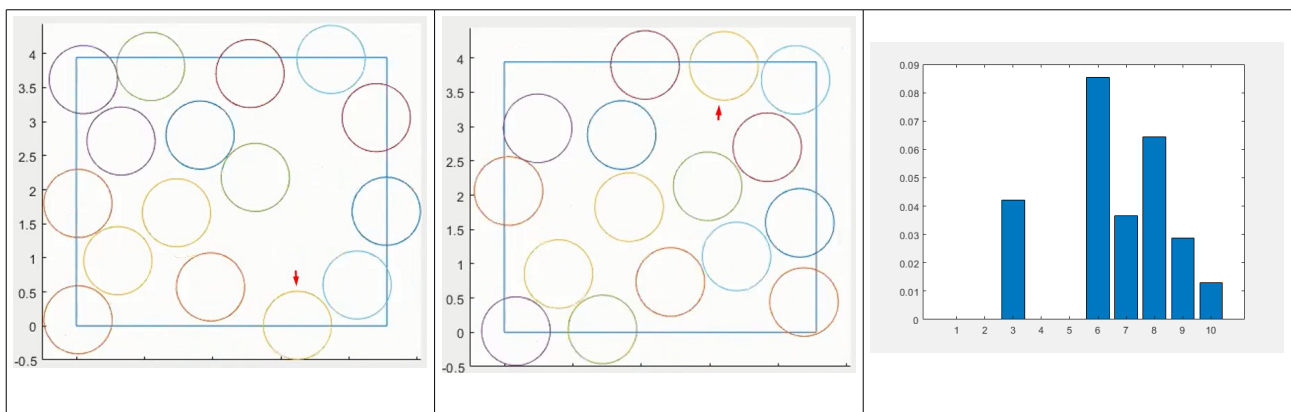
Δημιουργούμε μια διάταξη σωματιδίων στα οποία προτείνουμε τυχαίες μετατοπίσεις, με τα όρια του κουτιού να λειτουργούν βάσει περιοδικών οριακών συνθηκών, ομοιάζοντας ουσιαστικά χώρο απείρων διαστάσεων.

Το πρόγραμμα είναι παρόμοιο του **Hard discs** με την μόνη διαφορά ότι εδώ κάθε προτεινόμενη μετατόπιση σωματιδίου $rTrial$ διορθώνεται πρώτα ώστε να ακολουθεί περιοδικές οριακές συνθήκες και έπειτα ελέγχεται εάν είναι έγκυρη. Η διόρθωση αυτή γίνεται μέσω της *PBC*.

PBC.m

Δέχεται ως παραμέτρους μια μετατόπιση r και τα όρια του κουτιού Lx, Ly . Για κάθε διάσταση x και y της r , ελέγχει αν αυτή η διάσταση ξεφεύγει των ορίων του κουτιού δηλαδή παίρνει τιμές μεγαλύτερες του L , ή μικρότερες του μηδέν. Στην περίπτωση μεγαλύτερων τιμών μειώνει την μετατόπιση κατά L ενώ για αρνητική τιμή αυξάνει την μετατόπιση κατά L .

Η συνάρτηση ακτινικής κατανομής για ένα σύστημα ατομών μας εξηγεί πως η πυκνότητα μεταβάλλεται συναρτήσει της απόστασης μεταξύ σωματιδίων. Μπορούμε να μετρήσουμε έτσι την πιθανότητα να βρούμε ένα σωματίδιο σε απόσταση r σε σχέση με ένα σωματίδιο αναφοράς. Για να υπολογίσουμε λοιπόν την συνάρτηση ακτινικής κατανομής, χρειάζεται να υπολογίσουμε πρώτα όλες τις αποστάσεις μεταξύ των σωματιδίων και να τις τροφοδοτήσουμε στο ιστόγραμμα με κατάλληλες παραμέτρους.



Δύο στιγμιότυπα στα οποία φαίνεται ότι ο κιτρινωπός δίσκος στην κάτω δεξιά άκρη, υπερβαίνοντας το κέντρο του τα όρια του κουτιού, τοποθετείται στην αντίθετη μη κατειλημμένη πάνω δεξιά άκρη. Στην τρίτη στήλη έχουμε την συνάρτηση ακτινικής κατανομής για το συστήμά μας.

3. Lennard-Jones NVT

Συνοπτικά:

Σε ένα πλέγμα σωματιδίων σε δεδομένη θερμοκρασία, προσομοιώνουμε αλλαγές στο δυναμικό Lennard-Jones για μια συλλογή με σταθερό πλήθος, όγκο και θερμοκρασία.

Αρχικά ορίζουμε τις παραμέτρους: το πλήθος των σωματιδίων, την πυκνότητα, την θερμοκρασία και την μέγιστη επιτρεπτή μετατόπιση. Με την συνάρτηση *CubicGrid* δημιουργούμε το κυβικό πλέγμα των συντεταγμένων.

CubicGrid.m

Η συνάρτηση δημιουργεί αρχικά ένα πίνακα στον οποίο θα τοποθετήσει τις τρισδιάστατες συντεταγμένες των σωματιδίων. Ο όγκος του πλέγματος L^3 είναι ανάλογος της πυκνότητας και του πλήθους των σωματιδίων. Στην συνέχεια υπολογίζουμε την μέγιστη πλευρά $L0$ του ελάχιστου δυνατού κυβικού πλέγματος έτσι ώστε να χωράει όλο το πλήθος των σωματιδίων συν ελάχιστα παραπάνω στο πλέγμα. Τέλος δημιουργεί τις συντεταγμένες του κάθε σωματιδίου ομοιάζοντας τες με αυτές της κρυσταλλικής δομής hkl. Όταν κάποιες από τις τρεις διαστάσεις x, y, z των συντεταγμένων φτάσουν το όριο $L0$ που ορίζει ότι η διάσταση αυτή απασχολεί το μέγιστο επιτρεπτό πλήθος, τότε μεταβαίνει να γεμίσει με συντεταγμένες την επόμενη διάσταση.

Στην συνέχεια μέσω της συνάρτησης *LJPotential* υπολογίζουμε την αρχική ενέργεια του δυναμικού Lennard-Jones.

LJPotential.m

Υπολογίζουμε το πλήθος των σωματιδίων και για κάθε ξεχωριστό ζευγάρι σωματιδίων υπολογίζουμε το διάνυσμα της απόστασης μεταξύ δύο κέντρων. Διορθώνουμε την απόσταση με βάση τις περιοδικές οριακές συνθήκες και υπολογίζουμε την ενέργεια

$$\text{δυναμικού βάσει του τύπου } U(r) = 4 \left[\left(\frac{1}{r} \right)^{12} - \left(\frac{1}{r} \right)^6 \right]$$

Ξεκινάμε λοιπόν την προσομοίωση όπου σε κάθε βήμα, για κάθε σωματίδιο προτείνουμε μια τρισδιάστατη μετατόπιση $rTrial$, διορθώνουμε την τιμή της για περιοδικές οριακές συνθήκες και υπολογίζουμε την διαφορά της ενέργειας του δυναμικού λόγω της καινούργιας μετακίνησης. Τέλος με εκπλήρωση του κριτηρίου Metropolis, αποδεχόμαστε ή όχι τις αλλαγές. Το κριτήριο Metropolis είναι ένα πιθανοκρατικό κριτήριο για το οποίο αν ο παράγοντας Boltzmann $e^{-\beta E}$ ο οποίος είναι ταυτόσημος της στατιστικής πιθανότητας, υπερβαίνει μια τιμή, ικανοποιείται.

Name ▲	Value
beta	0.5000
coords	3x100 double
density	0.8500
energy	-214.7271
L	4.9000
maxDr	0.1000
particles	100
steps	10000
temperature	2

Name ▲	Value
beta	0.5000
coords	3x100 double
dE	-0.2599
density	0.8500
energy	-451.3675
L	4.9000
maxDr	0.1000
part	100
particles	100
rTrial	[0.0604;-2.0790;0.7123]
step	10000

Ξεκινώντας με ενέργεια δυναμικού -214.72, μετά από 10000 επαναλήψεις καταλήξαμε σε ενέργεια -451.36

4. Lennard-Jones with NPT

Συνοπτικά:

Σε ένα πλέγμα σωματιδίων σε δεδομένη θερμοκρασία, προσομοιώνουμε αλλαγές στο δυναμικό Lennard-Jones για μια συλλογή με σταθερό πλήθος σωματιδίων και πίεση.

Όπως και στο **Lennard-Jones NVT**, δημιουργούμε ένα πλέγμα συντεταγμένων για τα σωματίδια μας και υπολογίζουμε την αρχική ενέργεια του δυναμικού. Μετά με χρήση της συνθήκης ($\text{rand}*(\text{particles}+1) + 1 < \text{particles}$) επιλέγουμε πιθανοκρατικά αν θα πραγματοποιήσουμε μια αλλαγή στην θέση των σωματιδίων ή μια αλλαγή στον όγκο. Η παραπάνω συνθήκη ευνοεί πιθανοκρατικά λίγο περισσότερο την μετατόπιση σωματιδίων παρά την αλλαγή στον όγκο. Η αλλαγή στην θέση πραγματοποιείται όπως παρουσιάστηκε και στο **Lennard-Jones NVT**.

Σε περίπτωση αλλαγής όγκου βρίσκουμε με την μέθοδο της λογαριθμικής αλλαγής στον όγκο βάσει της οποίας θα υπολογίσουμε την νέα πλευρά του όγκου, όπως εξηγείται και στο απόσπασμα **Frenkel & Smit 5.4.2**. Με την νέα τιμή αυτή, επανακαθορίζουμε την διάταξη των συντεταγμένων ώστε να ταιριάξουν πάνω στον καινούργιο όγκο του κύβου και υπολογίζουμε την νέα τιμή στην ενέργεια δυναμικού. Με χρήση ενός τροποποιημένου κριτηρίου Metropolis το οποίο είναι προσαρμοσμένο ώστε το ενεργειακό κομμάτι του εκθετικού να περιέχει και την αλλαγή στον όγκο, αποδεχόμαστε τις αλλαγές στην ενέργεια και τις συντεταγμένες. Στο τέλος της προσομοίωσης υπολογίζουμε την μέση τιμή της πλευράς του όγκου avgL η οποία οφείλει να είναι παραπλήσια της τελικής τιμής του L .

Name ▲	Value
avgL	0
beta	0.5000
coords	3x100 double
density	0.8500
energy	-214.7271
L	4.9000
maxDr	0.1000
maxDv	0.0100
particles	100
pressure	1
sampleCount	0

Name ▲	Value
avgL	5.0379
beta	0.5000
coords	3x100 double
dE	2.1978
density	0.8500
energy	-437.9263
eTrial	-413.8818
L	5.1198
InvTrial	4.8993
maxDr	0.1000
maxDv	0.0100

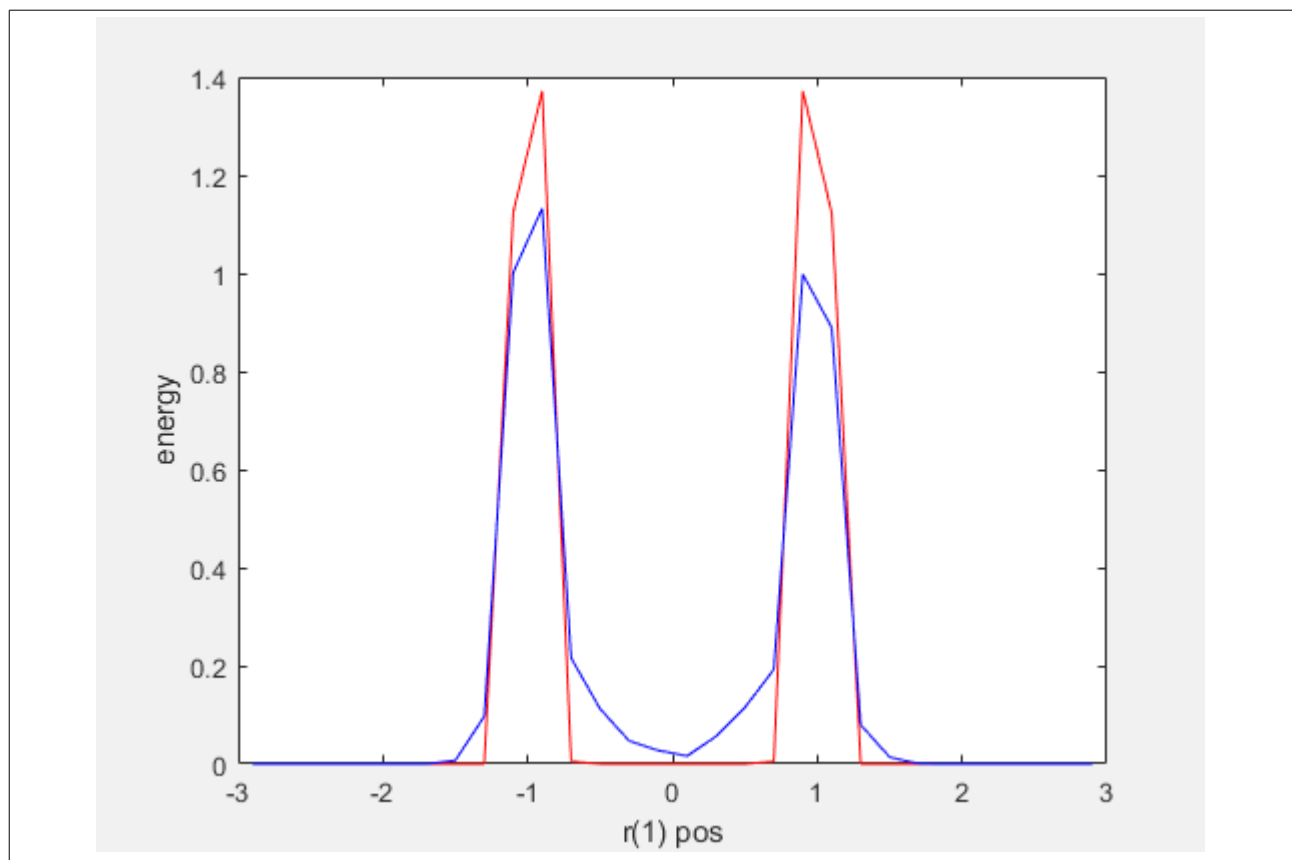
Ξεκινώντας με ενέργεια -214.72 και όγκο $(4.9)^3$, καταλήγουμε σε ενέργεια -437.92 και όγκο $(5.12)^3$

5. Parallel tempering

Συνοπτικά:

Δημιουργούμε δύο αντίγραφα του ίδιου συστήματος αλλά με διαφορετικές θερμοκρασίες και διαφορετικές ενέργειες. Χρησιμοποιώντας το κριτήριο Metropolis, επικοινωνούμε πληροφορίες για την θέση και την ενέργεια από το ένα αντίγραφο στο άλλο, με σκοπό το αντίγραφο με την χαμηλότερη ενέργεια που δεν μπορεί να υπερπηδήσει το τείχος δυναμικού, να λάβει πληροφορίες για το περιβάλλον του, ανεξάρτητα του αν είναι ικανό ή όχι να διασχίσει το δυναμικό.

Αρχικά ορίζουμε για το κάθε αντίγραφο σύστημα μια θέση r και μια τιμή ενέργειας e ορισμένη με βάση το δυναμικό που χρησιμοποιούμε. Στο πρώτο αντίγραφο θέτουμε την μικρότερη θερμοκρασία από τα δύο. Ξεκινώντας την προσομοίωση με την συνθήκη $rand < ExchangeFreq$ να ικανοποιείται περίπου τις μισές φορές, υπολογίζουμε την διαφορά στον παράγοντα Boltzmann και την διαφορά ενεργείας μεταξύ των δύο αντιγράφων. Εάν το κριτήριο Metropolis ικανοποιείται είτε πάντα είτε πιθανοκρατικά, τότε τα δύο αντίγραφα συστήματα θα ανταλλάξουν θέσεις και ενέργειες. Για κάθε σύστημα προτείνουμε μια αλλαγή στην θέση r και στην ενέργεια e . Αν η διαφορά μεταξύ νέας ενέργειας και παλιάς είναι μικρότερη, δηλαδή μικραίνει η πιθανότητα υπερπήδησης του δυναμικού, τότε αποδεχόμαστε ούτως ή άλλως τις αλλαγές. Ειδάλλως τις αποδεχόμαστε πιθανοκρατικά. Τέλος σχεδιάζουμε τις τροχιές των θέσεων για κάθε αντίγραφο και συγκρίνουμε την πειραματική καμπύλη Boltzmann με την θεωρητική.



Σύγκριση της πειραματικής (μπλε) με την θεωρητική (κόκκινη) καμπύλη Boltzmann.

6. Grand Canonical MC

Συνοπτικά:

Προσμοιώνουμε ένα πλέγμα σωματιδίων αερίου σε μεγαλοκανονική συλλογή έχοντας την δυνατότητα να αυξομειώσουμε το πλήθος των σωματιδίων καθώς και να τα μετατοπίσουμε.

Αρχικά ορίζουμε τις παραμέτρους για την διάσταση του πλέγματος L , το μέγιστο πλήθος χωρητικότητας $maxpart$ και το πλήθος των σωματιδίων $particles$. Γεμίζουμε έπειτα τις L πρώτες σειρές της πρώτης στήλης με L σωματίδια. Δημιουργούμε επίσης ένα πίνακα $occupy$ και τον γεμίζουμε με τιμές 0 και 1 αν μια θέση του πλέγματος είναι κατειλημμένη ή όχι. Με την συνάρτηση *LatConfig* απεικονίζουμε την αρχική διάταξη των σωματιδίων.

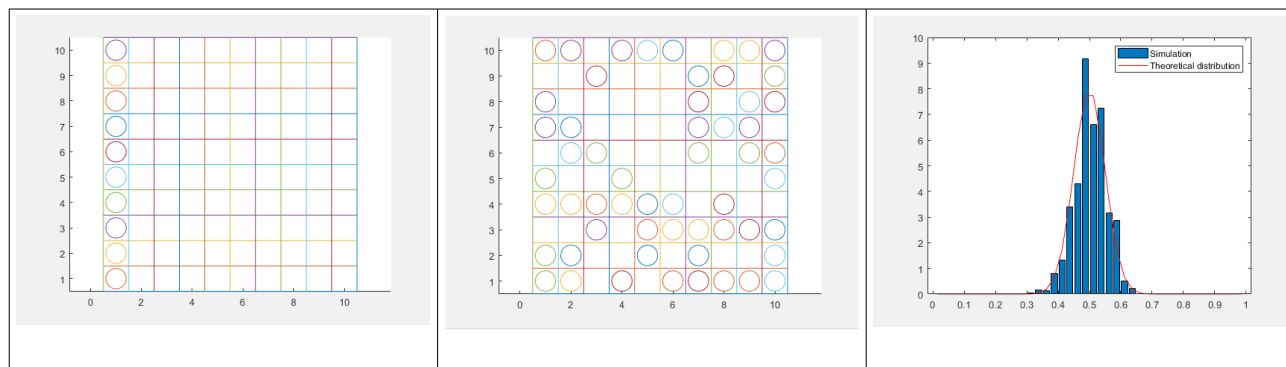
LatConfig.m

Η συνάρτηση ελέγχει εάν η συνάρτηση καλείται για πρώτη φορά ή όχι. Έπειτα δημιουργεί το πλέγμα με διαστάσεις L επί L και αναπαριστά με ένα κύκλο το κάθε σωματίδιο, με κέντρο που ορίζουν οι συντεταγμένες του.

Ξεκινώντας την προσομοίωση, η συνθήκη $rand < addremoveFrac$ όριζει ότι περίπου τις μισές φορές των επαναλήψεων θα πραγματοποιήσουμε πρόσθεση/αφαίρεση σωματιδίων, ενώ η $rand < 0.5$ όριζει ότι τις μισές των παραπάνω φορών να πραγματοποιείται πρόσθεση και τις άλλες μισές αφαίρεση σωματιδίου. Κατά την πρόσθεση, βρίσκουμε ένα τυχαίο ζευγάρι συντεταγμένων $xnew$ και $ynew$ και ελέγχουμε αν αυτή η θέση είναι ήδη κατειλημμένη. Αν δεν είναι, προσθέτουμε ένα καινούργιο σωματίδιο στο πλέγμα. Στην περίπτωση της αφαίρεσης, χρησιμοποιούμε την συνθήκη $rand < particles/maxpart$ η οποία ικανοποιείται πιθανοκρατικά μόνο εάν το πλέγμα δεν είναι πλήρως κατειλημμένο. Στην περίπτωση που ικανοποιηθεί, επιλέγουμε ένα τυχαίο σωματίδιο και το αφαιρούμε από το πλέγμα.

Μετά, εφόσον υπάρχουν σωματίδια στο πλέγμα, για $maxpart$ φορές επιλέγουμε ένα τυχαίο σωματίδιο και ένα τυχαίο ζευγάρι συντεταγμένων. Αν η τυχαία θέση αυτή είναι ελεύθερη τότε μετακινούμε το τυχαίο σωματίδιο στην θέση εκείνη. Στην συνέχεια τροφοδοτούμε τις τιμές μας στο *histogram* όπου τις κατανέμει σε *bins*.

Τελειώνοντας την προσομοίωση, υπολογίζουμε την μέση συγκέντρωση των σωματιδίων στο χώρο και σχεδιάζουμε το ιστόγραμμα σε σχέση με την θεωρητική κανονική κατανομή με μέση τιμή 0.5 και διασπορά 0.25.



Στην πρώτη εικόνα έχουμε την διάταξη του πλέγματος για $n=10$ σωματίδια, ενώ στην δεύτερη έχουμε την διάταξη στην λήξη της προσομοίωσης για $n=56$ σωματίδια. Τέλος στην τρίτη εικόνα έχουμε το ιστόγραμμα σε σχέση με την θεωρητική καμπύλη.

7. Grand Canonical Activity Based

Συνοπτικά:

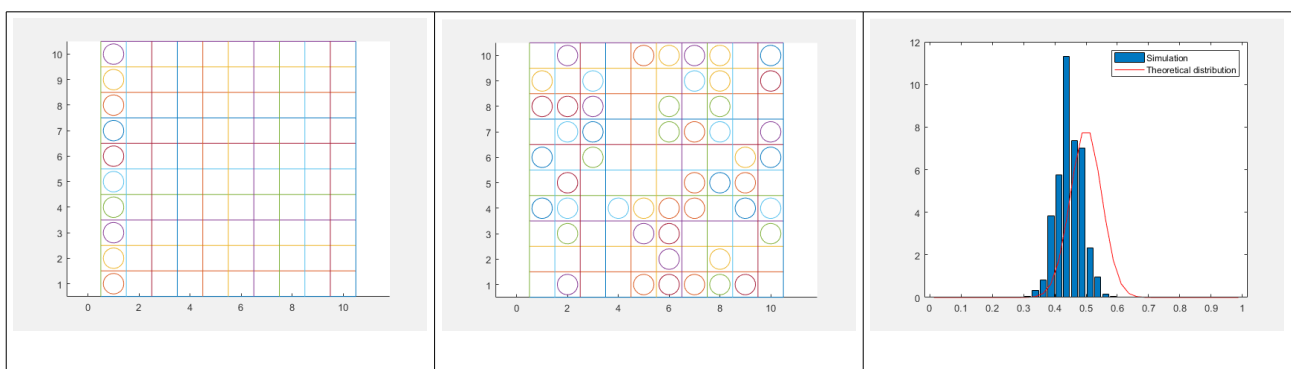
Προσμοιώνουμε ένα πλέγμα σωματιδίων αερίου σε μεγαλοκανονική συλλογή έχοντας την δυνατότητα να αυξομειώσουμε το πλήθος των σωματιδίων μέσω ενός κριτηρίου εξαρτώμενο από το χημικό δυναμικό, καθώς και να τα μετατοπίσουμε.

Η διαδικασία είναι η ίδια με την **Grand Canonical MC**, με την διαφορά ότι κατά την πρόσθεση ενός σωματιδίου, ελέγχουμε πρώτα αν πληρείται το κριτήριο $rand < fugacity * maxpart / (particles + 1)$ και στην περίπτωση αφαίρεσης, το κριτήριο $rand < particles / (maxpart * fugacity)$. Ως $fugacity$ έχουμε ορίσει τον όρο $e^{\mu/T}$ όπου μ το χημικό δυναμικό και T η θερμοκρασία. Προσθέτοντας τους δεξιούς όρους των δύο κριτηρίων εύκολα καταλήγουμε στον λόγο

$$\frac{N}{N+1} \simeq 0.99 \text{ που εκφράζει ότι το πλήθος των σωματιδίων είναι πρακτικά σταθερό αλλά με την}$$

έννοια ότι τα σωματίδια πρακτικά προσθέτονται ή αφαιρούνται από μια δεξαμενή σωματιδίων, στην οποία μπορεί να διοχετευτεί μέχρι και όλο το σύνολο των σωματιδίων.

Μετά την λήξη των επαναλήψεων, δημιουργούμε το ιστόγραμμα.



Στην πρώτη εικόνα έχουμε την διάταξη του πλέγματος για $n=10$ σωματίδια, ενώ στην δεύτερη έχουμε την διάταξη στην λήξη της προσομοίωσης για $n=43$ σωματίδια. Τέλος στην τρίτη εικόνα έχουμε το ιστόγραμμα σε σχέση με την θεωρητική καμπύλη, το οποίο λόγω της προσθήκης της $fugacity$, το κέντρο της κατανομής μετακινείται προς τα αριστερά και αποκλίνει από την θεωρητική.

8. Grand Canonical Ising Model

Συνοπτικά:

Προσμοιώνουμε ένα πλέγμα σωματιδίων αερίου σε μεγαλοκανονική συλλογή έχοντας την δυνατότητα να αυξομειώσουμε το πλήθος των σωματιδίων μέσω ενός κριτηρίου εξαρτώμενο από το χημικό δυναμικό, καθώς και να τα μετατοπίσουμε. Για κάθε προσθήκη, αφαίρεση ή μετακίνηση σωματιδίου, λαμβάνουμε υπόψη και την αλλαγή στο άθροισμα των αλληλεπιδράσεων των σωματιδίων ως προς την συνολική ενέργεια του πλέγματος.

Ορίζουμε τις αρχικές παραμέτρους και γεμίζουμε το πλέγμα πλήρως με σωματίδια. Αμέσως μετά υπολογίζουμε την συνολική ενέργεια του πλέγματος αθροίζοντας τις αλληλεπιδράσεις κάθε κυψελίδας με τις γειτονικές της, χρησιμοποιώντας την συνάρτηση *neighbor*. Για παράδειγμα, μια μη κατειλημμένη κυψελίδα δεν θα έχει αλληλεπιδράσεις, άρα θα παίρνει τιμή 0. Αντιθέτως, μια κατειλημμένη κυψελίδα με τρεις γειτονικές κατειλημμένες κυψελίδες, θα παίρνει τιμή 3.

neighbor.m

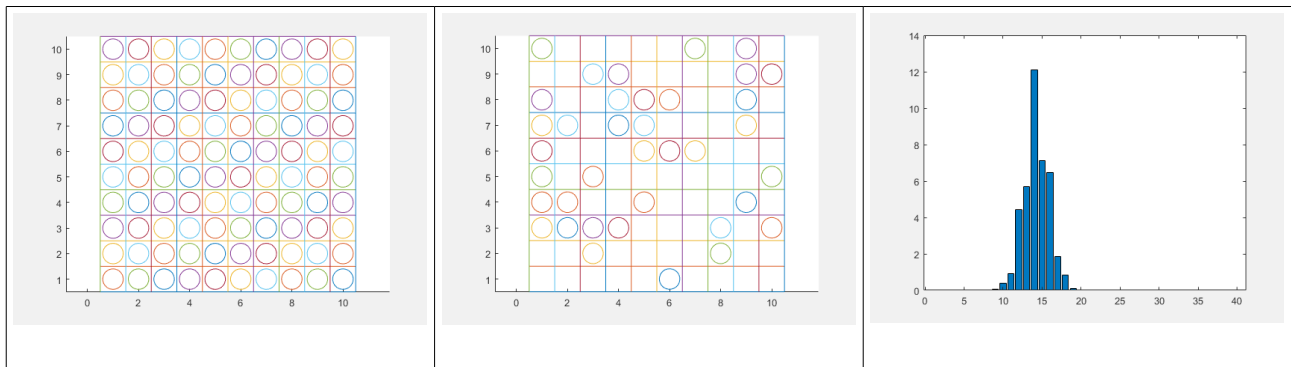
Η συνάρτηση δέχεται τις συντεταγμένες *xpart*, *ypart* ενός σημείου του πλέγματος και με βάση τις περιοδικές οριακές συνθήκες προσπαθεί να βρει τι τιμές έχουν τα *x*, *y* πάνω, κάτω, δεξιά και αριστερά του σημείου *xpart*, *ypart*. Στο τέλος αθροίζει τις τιμές *occupy* του κάθε συγγενεύοντος κουτιού κατειλημμένου ή όχι.

Στην συνέχεια, αναπαριστούμε το πλήρως κατειλημμένο πλέγμα και θέτουμε τις παραμέτρους της *histogram* καθώς και την αρχικοποίηση της μέσης συγκέντρωσης.

Ξεκινώντας την προσομοίωση, για κάθε επαναληπτικό βήμα, θα τρέχουμε από *addremoveSteps* επαναλήψεις επιχειρώντας τις μισές φορές να προσθέσουμε ένα σωματίδιο στο πλέγμα, και τις άλλες μισές να αφαιρέσουμε κάποιο σωματίδιο. Η διαδικασία πρόσθεσης και αφαίρεσης είναι η ίδια με την **Grand Canonical Activity Based**, με την μόνη διαφορά ότι κατά την πρόσθεση/αφαίρεση ενός σωματιδίου, υπολογίζουμε την διαφορά που προκύπτει στην ενέργεια των αλληλεπιδράσεων. Μια προσθήκη σωματιδίου προσθέτει επιπλέον παράγοντες αλληλεπίδρασης στην συνολική ενέργεια πλέγματος, ενώ μια αφαίρεση αφαιρεί παράγοντες αλληλεπίδρασης.

Στο πέρας των *addremoveSteps* επαναλήψεων, προσπαθούμε πάλι όπως στην **Grand Canonical Activity Based** να μετακινήσουμε ένα τυχαίο σωματίδιο σε μια τυχαία μη κατειλημμένη κυψελίδα. Υπολογίζοντας όμως την διαφορά μεταξύ καινούργιας ενέργειας και παλιάς, αποφασίζουμε πιθανοκρατικά με χρήση κριτηρίου Metropolis αν θα επικυρώσουμε την μετακίνηση ή όχι.

Στο τέλος κάθε βήματος, τροφοδοτούμε τις νέες τιμές στην *histogram* και τελικά υπολογίζουμε την μέση συγκέντρωση και σχεδιάζουμε το ιστόγραμμα των τιμών.



Στην πρώτη εικόνα έχουμε την διάταξη του πλέγματος για $n=\text{maxpart}(100)$ σωματίδια, ενώ στην δεύτερη έχουμε την διάταξη στην λήξη της προσομοίωσης για $n=37$ σωματίδια. Τέλος στην τρίτη εικόνα έχουμε το ιστόγραμμα το οποίο παρουσιάζει μια ασυμμετρία του κέντρου του ως προς τα αριστερά.

10. Grand Canonical MC Parallel Tempering

Συνοπτικά:

Δημιουργούμε πολλαπλά αντίγραφα του ίδιου συστήματος, αναπαριστώντας το καθένα με το δικό του πλέγμα και με διαφορετικά σεντ τιμών θερμοκρασίας και χημικού δυναμικού. Χρησιμοποιώντας το κριτήριο Metropolis, επικοινωνούμε πληροφορίες για την θέση και την ενέργεια από το ένα αντίγραφο στο άλλο. Προσομοιώνουμε αυτά τα πλέγματα σωματιδίων σαν μεγαλοκανονική συλλογή έχοντας την δυνατότητα να αυξομειώσουμε το πλήθος τους μέσω ενός κριτηρίου εξαρτώμενο από το χημικό δυναμικό, καθώς και να τα μετατοπίσουμε. Για κάθε προσθήκη, αφαίρεση ή μετακίνηση σωματιδίου, λαμβάνουμε υπόψη την αλλαγή στο άθροισμα των αλληλεπιδράσεων των σωματιδίων ως προς την συνολική ενέργεια του πλέγματος.

Αρχικά ορίζουμε το πλήθος των κελιών του πλέγματος, το αρχικό πλήθος σωματιδίων σε κάθε πλέγμα, τα βήματα προσθήκης/αφαίρεσης και τα βήματα ανταλλαγής μεταξύ των συστημάτων. Έπειτα ορίζουμε μια τριπλέτα τιμών θερμοκρασιών και μια τριπλέτα τιμών χημικού δυναμικού, με το κάθε σύστημα από τα N_{copy} (9) να αναπαριστά και έναν ξεχωριστό συνδυασμό των δύο αυτών τριπλέτων. Τέλος ορίζουμε τους πίνακες για τις κατειλημμένες θέσεις, τις συντεταγμένες, την ενέργεια του δυναμικού και το μεταβλητό πλήθος των σωματιδίων ανά σύστημα. Όπως και με τις προηγούμενες **Grand Canonical**, γεμίζουμε αρχικά κάθε πλέγμα με $N0$ σωματίδια και με την *MultiLatConfig* αναπαριστούμε τις αρχικές διατάξεις.

MultiLatConfig.m

Δημιουργεί N_{copy} σειρές και τις γεμίζει με N_{plots} subplots. Έπειτα καλεί την *LatConfig* για κάθε subplot.

Ξεκινώντας την προσομοίωση, για κάθε βήμα εκτελούμε *exchangeSteps* επαναλήψεις. Για κάθε τέτοια επανάληψη, διαλέγουμε δύο τυχαία συστήματα $n1$, $n2$, βρίσκουμε τις ενέργειες τους και το πλήθος των σωματιδίων σε αυτά και υπολογίζουμε την διαφορά των fugacities. Αν ο προσαρμοσμένος Metropolis λαμβάνοντας υπόψιν την διαφορά dN και το χημικό δυναμικό, ικανοποιείται, τότε εναλλάσσουμε τις συντεταγμένες, τις ενέργειες και το πλήθος των σωματιδίων μεταξύ των συστημάτων $n1$ και $n2$. Μετά σε κάθε βήμα πάλι, εκτελούμε *addremSteps* επαναλήψεις για κάθε σύστημα, κατά τις οποίες, τις μισές φορές προσπαθούμε να προσθέσουμε και τις άλλες μισές να αφαιρέσουμε ένα σωματίδιο. Τέλος, σε κάθε βήμα, για κάθε σύστημα επιχειρεί την μετακίνηση ενός τυχαίου σωματιδίου σε μια τυχαία θέση (x,y,n) . Η προσθήκη, αφαίρεση καθώς και η μετακίνηση σωματιδίων γίνεται όπως ακριβώς και στην **Grand Canonical Ising Model**. Στο τέλος κάθε βήματος, τροφοδοτούμε τις νέες τιμές στην *histogram* και τελικά υπολογίζουμε την μέση συγκέντρωση και σχεδιάζουμε το ιστόγραμμα των τιμών.



Στις πάνω δύο εικόνες φαίνεται η εναλλαγή μεταξύ των ($n=4$) και ($n=6$) συστημάτων, ενώ στις κάτω τρεις εικόνες φαίνεται η αρχική διάταξη των πλεγμάτων, η τελική τους διάταξη και το ιστόγραμμα των τιμών αντίστοιχα.