

1. FPU problém s kubickou nelinearitou v pohybové rovnici

(modifikace programu fpu2.m)

Ve cvičení jsme studovali vliv nelinearity na numerické řešení pohybových rovnic. Konkrétně jsme se zabývali Fermi-Pasta-Ulamovým (FPU) problémem s kvadratickou nelinearitou, tj. kdy pohybová rovnice pro výchylky 1D oscilátoru má tento tvar:

$$\ddot{u} = (u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}) + \alpha [(u_{i+1} - u_i)^2 - (u_i - u_{i-1})^2], \quad (1)$$

kde α byl jediným parametrem. Cílem tohoto zadání je modifikovat shora uvedený program pro studium FPU problému s kubickým nelineárním členem, tj. kdy pohybová rovnice má tento tvar:

$$\ddot{u} = (u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}) + \beta [(u_{i+1} - u_i)^3 - (u_i - u_{i-1})^3]. \quad (2)$$

Řešte tuto rovnici numericky pro $\beta > 0$ (vaše volba) a sledujte, které módy vibrace jsou vybudzeny. Jaké jsou jednotky koeficientů α a β ? Jak se mění řešení rovnice s kvadratickou a kubickou nelinearitou pro numericky stejné hodnoty α a β ?

2. Fázový diagram 2D Isingova modelu na čtvercové mřížce s vlivem pole (modifikace programu ising2pd.m)

Ve cvičení jsme si ukázali, jak lze získat závislost magnetizace 2D Isingova modelu na teplotě. Cílem tohoto zadání je zmapovat fázový diagram 2D Isingova modelu v závislosti nejen na teplotě, ale také na síle magnetického pole. Pro zopakování, celková energie (Hamiltonián) feromagnetického Isingova modelu je

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i , \quad (1)$$

kde druhý člen představuje část, kterou je třeba do programu dodělat. Zde $h > 0$ představuje energii vnějšího magnetického pole. Proved'te sérii simulací pro různé hodnoty h a pomocí modifikovaného programu nahoře zjistěte odpovídající T_c (uvažujte, že T_c odpovídá průměrné magnetizaci spinu $m = (1/N) \sum_{i=1}^N s_i = 0.5$). Jeden bod už máte (pro $h = 0$). Nakreslete graf h vs. T_c , zakreslete kritickou čáru a pojmenujte fáze ve dvou získaných oblastech.

3. Numerická integrace funkce jedné proměnné generováním náhodných čísel (modifikace programu `rndpi.m`)

Modifikujte tento program tak, aby byl schopen numericky integrovat jakoukoliv funkci jedné proměnné $f(x)$ mezi předem známými hodnotami x_1 a x_2 a za předpokladu, že mezi těmito body nepřesáhnou funkční hodnoty předem dané meze f_{min} a f_{max} . Abyste ukázali, že tento program funguje, určete hodnotu integrálu

$$I = \int_{0.5}^3 \ln x \, dx \quad (1)$$

a srovnajte ji s analytickým řešením. Načrtněte závislost hodnoty I na počtu generovaných náhodných čísel (stačí pár bodů). Kolik náhodných čísel je třeba k určení I na čtyři desetinná místa?

4. Algoritmus pro minimalizaci funkce N proměnných metodou FIRE

(modifikace rychlostního Verletova algoritmu)

V roce 2006 publikovali E. Bitzek et al. ve Physical Review Letters zajímavou metodu minimalizace funkce N proměnných, která je pro některé úlohy podstatně lepší než např. metoda konjugovaných gradientů. Vaším úkolem je přečíst si tento článek (dodám v PDF, jen 4 strany) a napsat funkci v Matlabu, která implementuje tuto metodu.

Jedná se o následující kroky:

START:

Máme dány počáteční pozice (\mathbf{x}), rychlosti (\mathbf{v}) a funkci $E(\mathbf{x})$, kterou chceme minimalizovat. Toto může být kterákoliv z funkcí, o kterých jsme se bavili (Rosenbrock, Himmelblau) nebo energie soustavy interagujících částic (viz. molekulární statika/dynamika). Uvažujeme tyto doporučené parametry metody FIRE:

$$(N_{min}, f_{inc}, f_{dec}, \alpha_{start}, f_{\alpha}) = (5, 1.1, 0.5, 0.1, 0.99) . \quad (1)$$

Začneme v čase $t = 0$ s vámi zvoleným časovým krokem Δt . Uvažujme $\alpha = \alpha_{start}$, $F_{tol} = 0.0001$ a zvolte si maximální krok Δt_{max} .

ALGORITMUS:

F0: Určete $\mathbf{F} = -\nabla E(\mathbf{x})$, což bude vektor se stejným počtem prvků jako \mathbf{x} . Pokud je $|\mathbf{F}| < F_{tol}$, našli jsme lokální minimum a algoritmus ukončíme. Pokud ne, pokračujeme dál...

F1: Určete projekci $P = \mathbf{F} \cdot \mathbf{v}$

F2: Nastavte rychlosti $\mathbf{v} := (1 - \alpha \mathbf{v}) + \alpha \hat{\mathbf{F}}|\mathbf{v}|$, kde $\hat{\mathbf{F}}$ je jednotkový vektor

F3: Pokud $P > 0$ a počet kroků od iterace, kdy P bylo naposledy záporné, je větší než N_{min} , zvětšete časový krok na $\Delta t := \min(\Delta t_{f_{inc}}, \Delta t_{max})$ a nastavte $\alpha := \alpha f_{\alpha}$

F4: Pokud $P \leq 0$, zmenšete časový krok na $\Delta t := \Delta t_{f_{dec}}$, vynulujte rychlosti ($\mathbf{v} = \mathbf{0}$) a nastavte $\alpha = \alpha_{start}$

F5: Upravte pozice $\mathbf{x} := \mathbf{x} + \mathbf{v}\Delta t + \mathbf{F}/(2m)(\Delta t)^2$

F6: Skok zpět na F0

5. Konstrukce simulačního bloku Heuslerovské slitiny Ni_2MnGa

(modifikace programu `mkxtal.m`)

Heuslerovská slitina Ni_2MnGa je feromagnetický materiál s tvarovou pamětí, tzn., že vykazuje jak magnetickou tak strukturní fázovou přeměnu. Definujte primitivní translační a bázevé vektory tohoto materiálu (strukturu najdete na internetu). Implementujte tyto parametry do programu `mkxtal.m`. Zobraďte tuto strukturu v Matlabu, AtomEye nebo JMol. Ukažte několik charakteristických pohledů, popište směry a typy atomů.

6. Simulace heteroepitaxe argonu na substrátu s trojúhelníkovou symetrií (modifikace programu `mstatics.m`)

Ze studia Lennard-Jonesova potenciálu víte, že základní stav argonu ve 2D odpovídá trojúhelníkové mřížce, v níž každý atom má 6 nejbližších sousedů. Vaším úkolem je studovat rozhraní mezi filmem Ar a substrátem (jiným materiálem trojúhelníkové struktury), který má ale menší mřížkový parametr. Zkonstruuje blok atomů trojúhelníkové mřížky tak, aby nejbližší vzdálenost mezi atomy byla $0.8r_{eq}$ (r_{eq} je rovnovážná vzdálenost nejbližších sousedů ve skutečném Ar – znáte z přednášek). Velikost bloku v horizontálním směru bude min. 50 jednotkových buněk. V dolní části bloku bude vertikálně cca 5 jednotkových buněk, které budou představovat substrát a tyto atomy se tedy nebudou během relaxace pohybovat. Toto je nutné zajistit vynulováním sil na těchto atomech! Ostatní atomy v horní části bloku (cca M jednotkových buněk) představují film a tyto se budou během relaxace pohybovat. Proveďte relaxaci této konfigurace pomocí molekulární statiky pro $M = \{5, 20, 50\}$. Pro jednoduchost uvažujte volné povrchy ve všech směrech. Zobraďte zrelaxovanou strukturu, kde barvy na atomech odpovídají jejich energiím. Pozorujete nějaký rozdíl ve struktuře rozhraní mezi filmem a substrátem pro malá a velká M ?

7. Celulární automat simulující skluz v granulárních materiálech

(modifikace programu `glife.m`)

Vaším cílem je modifikovat tento program tak, aby simuloval skluz zrn v granulárních materiálech anebo také skluz zeminy, pohyb laviny, apod. Tento celulární automat je postaven na následujícím jednoduchém algoritmu.

START:

Definujme 2D pole $f(x, y)$ tak, že f je všude nula, pouze $f(N/2, N/2) = \infty$, kde N je sudý počet buněk ve směru x a y . Místo nekonečna samozřejmě použijeme nějaké velké pozitivní celé číslo.

ALGORITMUS:

V každé iteraci procházíme postupně všechny buňky. Pokud $f(x, y) \geq 4$ tak:

$$\begin{aligned} f(x, y) &:= f(x, y) - 4 \\ f(x \pm 1, y) &:= f(x \pm 1, y) + 1 \\ f(x, y \pm 1) &:= f(x, y \pm 1) + 1 \end{aligned} \tag{1}$$

To znamená, že čtyři zrnka z pozice (x, y) sklouzla stejnoměrně na všechny sousední pozice ve směrech x a y .

Simulujte tento automat na mřížce 64×64 po dobu nejméně 1000 iterací. Po vykreslení příkazem `pcolor` použijte také `caxis([0 5])` a `colorbar`, aby byla vidět struktura kopečku písku. Jak by se algoritmus nahoře změnil, když bychom chtěli simulovat neizotropní skluz zeminy? Realizujte jednu simulaci s těmito modifikovanými pravidly a ukažte rozdíly oproti chování modelu nahoře.

8. Morseův interakční potenciál

(viz. přednáška o Lennard-Jonesově potenciálu)

Morseův interakční potenciál je jedním z párových potenciálů, kde energie interakce mezi dvěma sousedícími atomy závisí pouze na jejich vzdálenosti. Je definován takto:

$$V(r) = D \left[1 - e^{-\beta(r-r_0)} \right]^2, \quad (1)$$

kde D , β a r_0 umožňují parametrizovat tento potenciál pro konkrétní materiál. Morseův potenciál pro molekulu H_2 je popsán těmito parametry: $D = 4.75$ eV, $\beta = 1.93$ Å⁻¹, $r_0 = 7.41$ pm. Uvažujte stejnou cut-off funkci jako jsme použili v případě Lennard-Jonesova potenciálu. Určete hodnoty parametrů A a B v této cut-off funkci za předpokladu, že tato nahradí Morseův potenciál pro vzdálenosti atomů r mezi $2.5r_0$ a $3r_0$ (pro $r \geq 3r_0$ budeme atomární interakce ignorovat). Vykreslete tento potenciál v Matlabu.

9. Vliv aplikovaného napětí na fázový diagram feroelastického materiálu (modifikace programu `twinning.m`)

Při studiu metod fázového pole jsme si ukázali, že v případě Fe-30at.%Pd dochází ke strukturnímu fázovému přechodu 1. druhu z vysokoteplotní kubické fáze do nízkoteplotní tetragonální fáze. K tomuto fázovému přechodu dochází okolo 270 K. Cílem tohoto zadání je studovat vliv vnějšího napětí na teplotu fázového přechodu u tohoto materiálu (veškeré parametry máte). Předpokládejte, že volná energie tohoto materiálu je popsána funkcí

$$F = \int d\mathbf{x} [f_{nop} + f_{op} + f_{grad} - f_{load}] , \quad (1)$$

kde jednotlivé komponenty tohoto integrandu jsou definovány vztahy:

$$\begin{aligned} f_{nop} &= \frac{A_1}{2} e_1^2 + \frac{A_3}{2} e_3^2 \\ f_{op} &= \frac{A_2^0 (T - T_c)}{2} e_2^2 + \frac{B}{4} e_2^4 + \frac{C}{6} e_2^6 \\ f_{grad} &= \frac{K_2}{2} |\nabla e_2|^2 \\ f_{load} &= \sigma e_2 . \end{aligned} \quad (2)$$

Jedinou novinkou je přítomnost napěťového členu f_{load} . Uvažujte graf, kde horizontální osa představuje T_c a vertikální osa σ (aplikované napětí). Vaším úkolem je najít T_c pro různá napětí σ . Jeden bod už znáte ze cvičení. Pokračujte tak, že si zvolíte σ (pozor – je v eV/Å³) a pak uděláte několik simulací pro různé teploty T . Vykreslete závislost σ vs. T_c a popište na které straně je stabilní která fáze.

10. Fázový diagram Swift-Hohenbergova modelu

(modifikace programu `sh.m`)

Cílem této práce je určit fázový diagram Swift-Hohenbergova modelu pro různé hodnoty parametrů q_0 a α za předpokladu, že $\epsilon = 0.1$. Konkrétně, realizujte sérii simulací pomocí programu nahoře pro různé hodnoty q_0 a α a pro každou kombinaci určete numericky rovnovážné pole $\psi(\mathbf{x})$. Identifikujte pozice kritických čar (křivek?) které oddělují domény odlišných fází. Pro každou doménu zobrazte a pojmenujte charakteristickou fázi.

11. Dráha minimální energie pomocí metody Nudged Elastic Band

(modifikace programu `neb.m`)

Předpokládejte, že energie dvou hypotetických částic je popsána Styblinski-Tangovou funkcí

$$E(x_1, x_2) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 (x_i^4 - 16x_i^2 + 5x_i) , \quad (1)$$

kde x_1 a x_2 jsou pozice těchto dvou částic. Vaším úkolem je modifikovat program `neb.m` tak, aby ho bylo možné použít s funkcí nahoře. Otestujte, že funguje správně tím, že určíte dráhu minimální energie mezi body $(-3, -3)$ a $(3, 3)$. Nejprve si tuto funkci ale vykreslete v Matlabu nebo v jakémkoliv jiném programu (stačí pro x_1 a x_2 mezi ± 5).

12. Zatěžování izotropního materiálu s trhlinou v módu I

(modifikace programu `fem.m`)

Uvažujte 2D izotropní materiál (podmínka rovinné deformace) s trhlinou vycházející z povrchu kolmo na směr vnějšího normálového zatížení. Proveďte diskretizaci studované oblasti pomocí čtyřúhelníkových izoparametrických prvků (QUAD4). Na spodní stěně bude materiál vetknut bez možnosti posuvu v jakémkoliv směru. Na horní stěně aplikujte tahové vnější zatížení v několika krocích a sledujte jak se materiál deformuje. Pro konfigurace získané pro dvě rozdílná vnější napětí určete rozložení von Misesova napětí a identifikujte nebezpečné místo.

13. Extrémy a stabilita parametrů uspořádání pro fázový přechod 1. druhu (viz. přednáška o metodách fázového pole)

Fázové přechody lze velmi dobře studovat metodami fázového pole. Hlavními kroky jsou: (i) identifikace parametru uspořádání, a (ii) formulace volné energie jako funkcionálu tohoto parametru uspořádání, přičemž volná energie musí být invariantní vzhledem ke všem operacím symetrie fáze s vyšší symetrií. Označme tento parametr uspořádání jako $\eta(\mathbf{x})$, což je skalární funkce, která závisí na pozici \mathbf{x} na mříži, která diskretizuje studovaný prostor. V případě fázového přechodu 1. druhu má lokální část funkcionálu volné energie tvar

$$F[\eta] = \int d\mathbf{x} \left(\frac{\alpha}{2} \eta^2 + \frac{\beta}{4} \eta^4 + \frac{\gamma}{6} \eta^6 \right), \quad (1)$$

kde $\alpha = \alpha_0(T - T_c)$ a $\alpha_0 > 0$, $\beta < 0$, $\gamma > 0$. Odvoďte vztahy pro extrémy volné energie, tj. extrémy jejího integrandu $f(\eta)$, a určete pro jaké ΔT se jedná o minimum a maximum. Vysvětlete tvar závislosti $f(\eta)$, kterou jsme si ukázali pro fázový přechod 1. druhu v přednášce. V čem se tato závislost liší od té pro fázový přechod 2. druhu (tj. když $\beta > 0$ a $\gamma = 0$)?

14. Mapování fázového diagramu PFC modelu

(použití programu `pfc.m`)

Ve fázovém modelu krystalu (PFC = phase field crystal) je zachována celková hodnota parametru uspořádání (ψ), který lze jednoduše převést na hustotu hmoty (ρ). Tento model závisí na parametrech ϵ , q_0 a ψ_0 , jejichž význam jsme si vysvětlili v přednášce. Vaším úkolem je zmapovat fázový diagram tohoto modelu změnou parametrů ϵ a ψ_0 , přičemž q_0 a všechny ostatní parametry nechte nastavené na hodnoty, které jsme použili ve cvičení. Výsledkem vašeho snažení bude diagram $\epsilon - \psi_0$, ve kterém identifikujete (zhruba) pozice kritických křivek. Ke každé oblasti přidělíte obrázek a pojmenujete získanou mikrostrukturu.