

SEMINARIUM Z MAGNETYZMU I NADPRZEWODNICTWA

Uprzejmie zawiadamiamy, że w **środę**

17 kwietnia 2024 r., o godz.10:00

odbędzie się seminarium w **sali 203, budynek I**

na którym

dr Dariusz Sztenkiel

(Instytut Fizyki Polskiej Akademii Nauk)

wygłosi referat na temat:

“Symulacje Step Monte Carlo (sMC)”

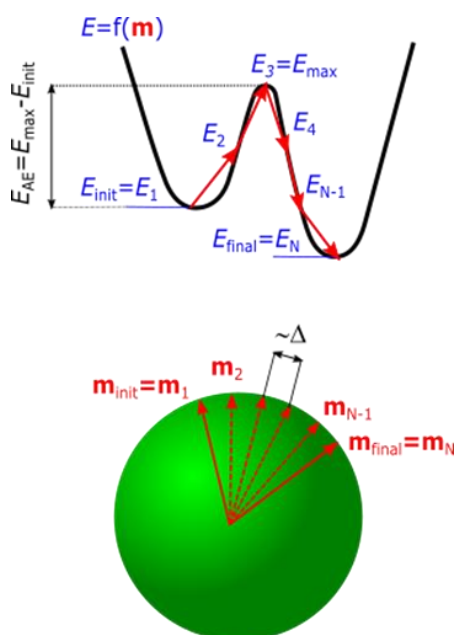


Fig. 1. Schematyczna ilustracja metody sMC dla przypadku procesu magnetyzacji (jeden ruch Monte Carlo). Kierunek magnetyzacji \mathbf{m} (dolny panel) może przyjmować dowolny punkt na sferze jednostkowej z energią $E=f(\mathbf{m})$ (górny panel). W podejściu sMC prawdopodobieństwo akceptacji losowego stanu końcowego \mathbf{m}_{final} zależy od energii aktywacji $E_{AE} = E_{max} - E_{init}$.

Obliczenia Monte Carlo (MC) są obecnie stosowane w wielu gałęziach nauki, m.in. w fizyce, finansach i ekonomii, biologii, inżynierii itp. W dziedzinie fizyki materii skondensowanej MC może być wykorzystywany m.in. do badania układów klasycznych cząstek [1], układów spinowych, perkolacji i fraktali. Algorytm MC jest naturalnym wyborem do badania statycznych właściwości, gdzie wpływ efektów dynamicznych może być zaniedbany. W seminarium przedstawię zmodyfikowany algorytm Monte Carlo, w którym prawdopodobieństwo akceptacji stanu końcowego zależy od energii aktywacji (bariery), a nie od różnicy energii między stanem końcowym i początkowym [2]. Aby sprawdzić poprawność algorytmu step Monte Carlo (sMC), zostanie przeprowadzona analiza porównawcza jego wyników z wynikami uzyskanymi za pomocą metody stochastycznej Landaua-Lifshitz-Gilberta (sLLG).

[1] D. Frenkel and B. Smit, “Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications”, Academic Press, San Diego (2002).

[2] D. Sztenkiel, “Introducing the step Monte Carlo method for simulating dynamic properties”, *Adv. Theory Simul.* 2300184 (2023).

The work is supported by the National Science Center (Poland) through project OPUS 2018/31/B/ST3/03438 and by the Interdisciplinary Center for Mathematical and Computational Modelling at the University of Warsaw through the access to the computing facilities.

Wykład będzie prowadzony po polsku w sali 203.

Dostępna będzie również transmisja ZOOM - link podany jest na stronie IF PAN.

Serdecznie zapraszamy

Roman Puźniak / Andrzej Szewczyk / Henryk Szymczak