بسمه تعالی

فاطمه زینی وند 9215560004

شبیه­سازی مونت­کارلو

چکیده:

روش شبیه­سازی مونت­کارلو یک الگوریتم محاسباتی است که از نمونه­گیری تصادفی برای محاسبه­ی نتایج استفاده می­کند. این روش زمانی استفاده می­شود که مطمئن نیستیم یک رویداد مشخص، اتفاق می­افتد یا نه، اما احتمال این که این اتفاق بیفتد، قابل تخمین زدن است. در شبیه­سازی مونت­کارلو، با تغییر تصادفی موقعیت ذرات موجود در سیستم همراه با تغییر در جهت­گیری و انجام حرکات داخلی، پیکربندی­هایی از سیستم تولید می­شود که میانگین­گیری روی آن­ها اساس کار را تشکیل می­دهند [3].

انواع روش­های مونت­کارلو عبارت­اند از: مونت­کارلو کلاسیک، مونت­کارلو کوانتومی و شبیه­سازی مونت­کارلو. شبیه­سازی مونت­کارلو در ریاضیات، فیزیک هسته­ای و شیمی و مخصوصا در زمینه­ی شیمی­فیزیک و به­طور خاص در شبیه­سازی قالب­های اتم­های د­رگیر کاربرد دارد[2] . شبیه­سازی سینتیکی مونت­کارلو از انتشار و واکنش میلیون­ها ذره در یک، دو و یا سه بعد، طراحی شده است که به راحتی توسط کاربر جهت توسعه مدل­های پیچیده برای سیستم­های خاص به­کار می­رود و مشکلات روش مونت­کارلو را با تولید اعداد تصادفی، حل می­کند و برای حل معادله­ی مستر به کار می­رود [1].

References:

1. S. Guerrero, E.E. Wolf, Chemical Engineering science, 66 (2011) 4477-4487.

2. Max J. Hoffmann, Sebastian Matera, Karsten Reuter, Computer Physics Communications, 185 (2014) 2138-2150.

.3 M. Leetmaa, N.V. Skorodumova, KMCLib: A general framework for lattice kinetic Monte Carlo (KMC) simulations, Computer Physics Communications (2014), http://dx.doi.org/10.1016/j.cpc.2014.04.017.