

ЛАБОРАТОРНА РОБОТА №5. Моделювання мікроканонічного та канонічного ансамблів методом Монте-Карло

Мета: Комп'ютерне моделювання методом Монте-Карло мікроканонічного та канонічного ансамблів.

Теоретичні відомості до лабораторної роботи наведені у лекції 5.

Порядок виконання роботи

Виконати наступне завдання згідно з номером свого варіанту, використовуючи відповідну математичну модель.

1. За допомогою двовимірної моделі Ізінга отримати залежності від температури (наприклад, взяти діапазон від 0 до 50 з кроком 0.1) теплоємності та магнітної сприйнятливості системи, якщо число спінів системи, константа обмінної взаємодії, напруженість зовнішнього магнітного поля та число випробувань дорівнюють, відповідно: 64, 1, 0, 100. Вивести відповідні графіки залежностей.

2. Для ідеального газу з N частинок: дослідити залежність числа прийняття від температури (наприклад, взяти $T=[0 \ 0.2 \ 0.5 \ 1 \ 5 \ 10 \ 20 \ 30 \ 40 \ 50 \ 70 \ 90 \ 100]$) та підібрати функцію, що її апроксимує, якщо початкова швидкість частинки, максимальна зміна швидкості, число випробувань, кількість частинок дорівнюють, відповідно: 0, 4, 2000, 80. Побудувати відповідні графіки.

3. Обчислити та візуалізувати миттєві конфігурації двовимірної системи спінів методом канонічного ансамбля (у вигляді прямокутних паралелепіпедів) в моменти часу 10, 100, 500, 2000, а також обчислити та вивести значення теплоємності, магнітної сприйнятливості та намагніченості системи, якщо: число спінів системи, константа обмінної взаємодії, напруженість зовнішнього магнітного поля, температура системи, число випробувань, відповідно, дорівнюють: 64, 1, 0, 1.5, 100.

4. Для одновимірної системи спінів (модель Ізінга) візуалізувати функцію розподілу повної енергії системи та апроксимувати її, якщо: число спінів системи дорівнює 200, кількість випробувань дорівнює 100.

5. Для ідеального газу з N частинок: 1) дослідити залежність числа прийняття на один крок $\frac{A^2}{N}$ від максимальної зміни швидкості dV_{max} (наприклад, від 0 до 1 з кроком 0.1), 2) визначити значення dV_{max} , яке забезпечує значення коефіцієнту прийняття, близьке до 0.5, та обчислити для нього середню енергію однієї частинки та середню швидкість частинок, якщо початкова швидкість частинки, температура газу, число випробувань, кількість частинок дорівнюють, відповідно: 0, 0.2, 2000, 80.

6. Дослідити залежність середньоквадратичного відхилення швидкості частинки ідеального газу, що складається з однієї частинки, від температури (наприклад, від 0 до 100 з кроком 0.1), якщо: початкова швидкість частинки, максимальна зміна швидкості та число випробувань дорівнюють, відповідно: 0, 4 та 10^4 . Апроксимувати отриману залежність. Побудувати графіки отриманої залежності та апроксимуючої функції.

7. Для одновимірної системи дослідити залежність коефіцієнту прийняття рішень $Accept$ від відношення $dV / \sqrt{\frac{E_{sys}}{N}}$ при різних значеннях числа частинок системи (наприклад, від 10 до 200 з кроком 10), якщо енергія системи, число випробувань та максимальне значення зміни швидкості дорівнюють, відповідно: 40, 4000, $2\sqrt{2}$. Побудувати графік залежності.

8. Для системи з Np частинок дослідити залежність числа прийняття на один крок $\frac{(Accept)^2}{Np}$ від максимальної зміни швидкості dV_{max} (наприклад, від 0 до 1 з кроком 0.1), якщо початкова швидкість частинки, температура газу, число випробувань, кількість частинок дорівнюють, відповідно: 0, 0.2, 2000, 80. Побудувати графік залежності.

9. Обчислити та візуалізувати миттєві конфігурації двовимірної системи спінів методом Монте-Карло (у вигляді прямокутних паралелепіпедів) у моменти часу 0, 100, 1000, 2000, якщо: число спінів системи дорівнює 81, кінцева енергія системи дорівнює -10, кількість випробувань дорівнює 50.

10. За допомогою двовимірної моделі Ізінга отримати залежність намагніченості від температури (наприклад, взяти діапазон від 0 до 100 з кроком 0.1), якщо число спінів системи, константа обмінної взаємодії, напруженість зовнішнього магнітного

поля та число випробувань дорівнюють, відповідно: 64, 1, 0, 100. Вивести графік залежності.

11. Візуалізувати миттєві конфігурації двовимірної системи спінів методом Монте-Карло у вигляді векторного поля в моменти часу 0, 100, 1000, 2000, якщо: число спінів системи дорівнює 81, кінцева енергія системи дорівнює -10, кількість випробувань дорівнює 50.

12. Для одновимірної системи дослідити залежність коефіцієнту прийняття рішень *Accept* від енергії демона *Edave* при різних значеннях числа частинок системи (наприклад, від 10 до 200 з кроком 10), якщо енергія системи, число випробувань та максимальне значення зміни швидкості дорівнюють, відповідно: 40, 4000, $2\sqrt{2}$. Побудувати графік залежності.

13. Дослідити залежність середньої енергії ідеального газу, що складається з однієї частинки, від температури (наприклад, від 0 до 100 з кроком 0.1), якщо: початкова швидкість частинки, максимальна зміна швидкості та число випробувань дорівнюють, відповідно: 0, 4 та 10^4 . Побудувати графік залежності.

14. За допомогою двовимірної моделі Ізінга отримати залежності від температури (наприклад, взяти діапазон від 0 до 200 з кроком 1) теплоємності та магнітної сприйнятливості системи, якщо число спінів системи, константа обмінної взаємодії, напруженість зовнішнього магнітного поля та число випробувань, дорівнюють, відповідно: 64, 1, 0, 100. Вивести відповідні графіки залежностей.

15. Дослідити залежність середньоквадратичного відхилення швидкості частинки ідеального газу, що складається з однієї частинки, від температури (наприклад, від 0 до 50 з кроком 0.05), якщо: початкова швидкість частинки, максимальна зміна швидкості та число випробувань дорівнюють, відповідно: 0, 5 та 10^4 . Апроксимувати отриману залежність. Побудувати графіки отриманої залежності та апроксимуючої функції.

16. Для одновимірної системи дослідити залежність коефіцієнту прийняття рішень *Accept* від відношення $dV / \sqrt{\frac{E_{sys}}{N}}$ при різних значеннях числа частинок системи (наприклад, від 1 до 100 з кроком 5), якщо енергія системи, число випробувань та максимальне значення зміни швидкості дорівнюють, відповідно: 40, 4000, $3\sqrt{3}$. Побудувати графік залежності.

17. Для одновимірної системи дослідити залежність коефіцієнту прийняття рішень *Accept* від енергії демона *Edave* при різних значеннях числа частинок системи (наприклад, від 1 до 100 з кроком 2), якщо енергія системи, число випробувань та максимальне значення зміни швидкості дорівнюють, відповідно: 40, 4000, $3\sqrt{3}$. Побудувати графік залежності.

18. За допомогою двовимірної моделі Ізінга вивести графік залежності намагніченості від температури (наприклад, взяти діапазон від 0 до 200 з кроком 1), якщо число спінів системи, константа обмінної взаємодії, напруженість зовнішнього магнітного поля, дорівнюють, число випробувань, відповідно: 64, 1, 0, 100.

19. Обчислити та візуалізувати миттєві конфігурації двовимірної системи спінів методом канонічного ансамбля (у вигляді прямокутних паралелепіпедів) в моменти часу 5, 50, 250, 1000, а також обчислити та вивести значення теплоємності, магнітної сприйнятливості та намагніченості системи, якщо: число спінів системи, константа обмінної взаємодії, напруженість зовнішнього магнітного поля, температура системи, число випробувань, відповідно, дорівнюють: 64, 1, 0, 1.5, 100.

Контрольні питання

1. Поняття мікроканонічного ансамбля.
2. В чому полягає ідея методу Монте-Карло для мікроканонічного ансамбля? Яку роль відіграє демон у обчислювальній процедурі цього методу?
3. Одновимірна модель Ізінга для мікроканонічного ансамбля.
4. Наведіть алгоритм моделювання двовимірної системи, що складається з N спінів, методом Монте-Карло.
5. Поняття канонічного ансамбля для моделювання поведінки системи, що перебуває при постійній температурі.
6. Наведіть загальний опис алгоритму Метрополіса для канонічного ансамбля.
7. Реалізація алгоритму Метрополіса в моделі ідеального газу з однієї частинки та моделювання одновимірного класичного ідеального газу, що складається з N частинок.
8. Моделювання двовимірної моделі Ізінга методом канонічного ансамбля.