

ЛЕКЦІЯ 5

МОДЕЛЮВАННЯ МІКРОКАНОНІЧНОГО ТА КАНОНІЧНОГО АНСАМБЛІВ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

5.1 Моделювання мікроканонічного ансамблю методом Монте-Карло

5.1.1 Мікроканонічний ансамбль

Розглянемо замкнуту систему, що складається з N частинок. Виберемо за макроскопічні характеристики системи об'єм V і повну енергію системи E , які вважатимемо постійними. Крім того, припустимо, що система є ізольованою, тобто можна знехтувати впливом на неї зовнішніх чинників. Як відомо, замкнуті макроскопічні системи намагаються перейти в стаціонарне рівноважний стан з максимальною ентропією. Зазначимо, що якщо на макроскопічному рівні система характеризується трьома величинами N , E , V , то на мікроскопічному рівні існує величезна кількість конфігурацій, що реалізують заданий макростан N , E , V .

Таким чином, на можливі мікростани накладається єдине обмеження – вони повинні бути такими, щоб забезпечити задані фізичні характеристики системи: число частинок N , об'єм V , повну енергію E . Оскільки причини, через які слід віддати перевагу певному стану, відсутні, можна стверджувати, що система в будь-який момент часу може виявитися з однаковою ймовірністю в одному з можливих мікростанів (*постулат про рівність апіорних імовірностей*). Це означає, що для системи з Ω досяжними станами імовірність виявити систему в мікростані s

дорівнює

$$P_s = \begin{cases} \frac{1}{\Omega}, & \text{якщо } s - \text{досяжне,} \\ 0, & \text{в іншому випадку.} \end{cases} \quad (5.1)$$

З (5.1) видно, що сума P_s по всіх Ω дорівнює одиниці.

Для визначення середніх значень фізичних величин, що характеризують макроскопічну систему, можна використовувати два способи. У першому способі вимірюють фізичні величини протягом досить великого проміжку часу, за який система встигає поперебувати у великій кількості досяжних мікростанів, і проводять подальше усереднення. Даний підхід був уже використаний у лабораторній роботі №4, коли методом МД розраховувалися середні значення температури і тиску неідеального газу. З точки зору проведеного усереднення у часі, ймовірність P_s є частиною часу,

протягом якого система за час спостережень перебуває в даному мікроскопічному стані s .

Незважаючи на очевидний фізичний зміст середніх у часі, в статистичній фізиці вводять поняття статистичних середніх в даний момент часу, які обчислюються по ансамблю мікростанів, відповідних заданому макростану. (Гіпотеза про збіг середніх значень величин, що обчислюються усередненням у часі й усередненням по ансамблю реалізацій, називається *ергодичною гіпотезою*.) Повне число систем в ансамблі дорівнює числу можливих мікростанів. Імовірність виявити в ансамблі тотожних систем s -ту реалізацію визначається виразом (5.1). Ансамбль систем, що характеризується величинами E, T, V і описується розподілом імовірностей виду (5.1), називається *мікроканонічним ансамблем*.

Вважатимемо, що система характеризується деякою величиною A , значення якої в s -тому стані дорівнює A_s . Тоді середнє значення A по ансамблю визначається як зважене середнє

$$\langle A \rangle = \sum_s A_s P_s. \quad (5.2)$$

З (5.2) видно, що для визначення середнього по ансамблю значення величини необхідно знати значення імовірностей P_s . При невеликій кількості частинок значення імовірностей можна визначити методом перебору. Однак при збільшенні числа частинок даний метод стає неприйнятним через великий обсяг обчислень. У цих умовах доводиться використовувати наближені методи, серед яких одним з найефективніших є метод Монте-Карло.

5.1.2 Моделювання мікроканонічного ансамблю

Загальна ідея методу Монте-Карло для канонічного ансамблю полягає в отриманні репрезентативної вибірки з повного числа мікростанів та оцінці з її використанням значення ймовірності P_s . Для цього можна використовувати досить очевидну процедуру: зафіксувати повне число частинок N і об'єм системи V , змінювати випадковим чином координати і швидкості окремих частинок, приймати конфігурації мікростанів, що мають задану повну енергію. На жаль, дана процедура виявляється неефективною, оскільки більшість конфігурацій взагалі не матимуть необхідної повної енергії та повинні бути відкинуті.

Ефективна обчислювальна процедура методу Монте-Карло для мікроскопічного ансамблю (за Х. Гулдом, Я. Тобочником) полягає в поділі вихідної макроскопічної системи на дві підсистеми: вихідну (далі називатимемо системою) та підсистему, що складається з одного елемента, яку автори назвали *демоном* (за аналогією з демоном Максвелла). Роль демона аналогічна ролі члена кінетичної енергії в методі МД, розглянутому в лабораторній роботі №4. Обходячи елементи системи і передаючи енергію, він забезпечує зміну конфігурації системи. Якщо енергії, запасеної в мантії демона, виявляється достатньо, він віддає енергію тому елементу системи, якому потрібна енергія, для здійснення зміни конфігурації. І навпаки, якщо для зміни конфігурації потрібно зменшити енергію системи, енергія передається частинкою демону. Єдине обмеження полягає в тому, що енергія демона повинна бути позитивною. Описана процедура алгоритмічно виглядає таким чином.

1. Згенерувати початкову конфігурацію системи із заданим значенням повної енергії.
2. Вибрати випадковим чином частинку і провести пробну зміну її координат.
3. Обчислити повну енергію системи в новому стані.
4. Якщо в новому стані енергія системи виявляється меншою, то система віддає енергію демону – і нова конфігурація приймається.
5. Якщо в новому стані енергія системи виявляється більшою, то нова конфігурація приймається, якщо енергії демона достатньо для того, щоб передати її системі. В іншому випадку нова конфігурація не приймається – і частинка зберігає свої старі координати.
6. Якщо пробна зміна не змінює енергії системи, то нова конфігурація приймається.

Наведені вище дії повторюються аж до отримання репрезентативної вибірки мікростанів. Можна очікувати, що за деякий проміжок часу система досягне рівноважного стану, в якому в системі і демона будуть деякі середні (для кожного) значення енергії. При цьому значення повної енергії системи залишається постійною. Оскільки демон представляє тільки один степінь свободи, на відміну від розглянутої статистичної системи, можна очікувати, що флуктуації системи будуть невеликі.

Застосуємо описаний алгоритм до класичного одновимірного ідеального газу, швидкості частинок якого є неперервними і необмеженими, а енергія частинок не

залежить від їх положення, тому повна енергія частинок є сумою кінетичних енергій окремих частинок. Для зміни конфігурації випадковим чином змінюватимемо швидкість випадково обраної частинки.

Для реалізації описаного алгоритму в MatLab створимо два m-файли:

1) файл Init.m, що містить опис функції, яка повертає абсолютні значення швидкостей в момент часу $t = 0$;

2) файл Demon.m, що містить опис функції, яка повертає усереднені по ансамблю реалізацій значення: енергії демона (Edave), середньої енергії системи на одну частинку (Esysave), середньої швидкості на одну частинку системи (Vave) та середнього числа прийняття рішень (Accept).

```
function z=Init(N,Ensys)
```

```
% Функція, що повертає абсолютні значення швидкостей в момент часу t=0
```

```
% N - число частинок системи, Ensys - енергія системи
```

```
V=(Ensys./N).^0.5;
```

```
for i=1:N
```

```
    z(i)=V;
```

```
end
```

```
end
```

```
function [Edave,Esysave,Vave,Accept]=Demon(N,Ensys,NTrial,Vel,dV)
```

```
% Функція, що повертає усереднені по ансамблю реалізацій значення:
```

```
% Edave - енергії демона, Esysave - середньої енергії системи на 1 частинку,
```

```
% Vave - середньої швидкості на 1 частинку системи,
```

```
% Accept - середнє число прийняття , N - число частинок системи,
```

```
% Ensys - енергія системи, NTrial - кількість випробувань
```

```
% Vel - початкові швидкості, dV - максимальне значення зміни швидкості
```

```
Edemon=0; Vtot=sum(Vel); Vcum=0; Escum=0; Edcum=0; Accept=0;
```

```
for j=1:NTrial
```

```
    for i=1:N
```

```
        dv=(2*rand(1)-1)*dV; % випадкова зміна швидкості
```

```
        Ip=floor(N*rand(1)+1); % випадковий вибір частинки
```

```
        VTrial=Vel(Ip)+dv; % пробна зміна швидкості
```

```
        de=0.5*(VTrial.^2-Vel(Ip)^2); % пробна зміна енергії
```

```
        if de<=Edemon % якщо енергія зменшується - зміна приймається
```

```
            Vel(Ip)=VTrial;          Vtot=Vtot+dv;          Accept=Accept+1;
```

```
            Edemon=Edemon-de;      Ensys=Ensys+de;
```

```
        end
```

```
        Edcum=Edcum+Edemon;    Escum=Escum+Ensys;    Vcum=Vcum+Vtot;
```

```
    end
```

```
end
```

```

Edave=Edcum/(NTrial*N);      Accept=Accept/(NTrial*N);
Esysave=1/N*Escum/(NTrial*N); Vave=1/N*Vcum/(NTrial*N);
end

```

Далі необхідно виконати наступну послідовність команд:

```

% Edave - енергія демона
% Esysave - середня енергія системи на 1 частинку
% Vave - середня швидкість на 1 частинку системи
% Accept - середнє число прийняття (коефіцієнт прийняття)
Ensys=40; % енергія системи
N =40; % число частинок системи
NTrial=4000; % кількість випробувань
dV=2*2^0.5; % максимальне значення зміни швидкості
Vel=Init(N,Ensys); % задання початкових швидкостей
% обчислення характеристик стану ідеального газу
[Edave Esysave Vave Accept]=Demon(N,Ensys,NTrial,Vel,dV);

```

Нижче виведений результат наведеної вище послідовності команд.

```

Edave = 0.9548
Esysave = 0.9761
Vave = 0.0031
Accept = 0.5109

```

Слід враховувати, що мікроканонічний ансамбль не можна вважати абсолютно адекватною моделлю реальних статистичних систем, оскільки дані системи не є термодинамічно ізольованими, але перебувають у тепловому контакті з навколишнім середовищем. Це призводить до виникнення потоку тепла між досліджуваною системою та навколишнім середовищем. Оскільки розмір досліджуваної системи, зазвичай, набагато менший за розмір навколишнього середовища, першу називатимемо мікросистемою, а останнє – тепловим резервуаром (термостатом). При цьому закон збереження повної енергії відноситься до складної системи, що складається з мікросистеми і теплового резервуару.

Розглянемо велику кількість уявних копій мікросистеми і теплового резервуару. Мікросистема і тепловий резервуар, що розглядаються як єдине ціле, є ізольованою термодинамічною системою і можуть бути описані за допомогою мікроканонічного ансамблю. Оскільки в даному випадку найбільший інтерес представляють рівноважні значення фізичних величин, що описують мікросистему, необхідно знати імовірність P_s , з якою мікросистема виявляється у стані s з енергією E_s . Ансамбль, який описує

розподіл імовірностей станів мікросистеми, що перебуває в термодинамічній рівновазі з тепловим резервуаром, називається *канонічним*.

У загальному випадку мікросистемою можна вважати будь-яку макроскопічну систему, розмір якої менший за тепловий резервуар, в тому числі й окрему частинку, виділену серед інших частинок теплового резервуару. Прикладом такої мікросистеми є демон, якого можна вважати мікросистемою, мікроканонічний стан якої визначається лише її енергією. Таким чином, *метод визначення розподілу імовірностей в канонічному ансамблі полягає в тому, щоб виконати чисельне моделювання демона, який обмінюється енергією з ідеальним газом, що складається з N частинок. Ідеальний газ у даному випадку відіграє роль термостату, і задача полягає у визначенні щільності ймовірності $P(E_d)$ того, що демон має енергію E_d* . Обчислювальний алгоритм, що дозволяє розв'язати дану задачу, досить очевидний:

1. Провести моделювання канонічного ансамблю методом Монте-Карло, зберігаючи на кожному кроці Монте-Карло значення енергії демона.

2. Для знайденої реалізації значень енергії демона обчислити розподіл імовірностей $P(E_d)\Delta E$.

3. Визначити функціональну залежність $P(E_d)\Delta E$ від температури.

Для реалізації даного алгоритму в MatLab створимо m-файл DemonE.m, який містить опис функції, що повертає миттєві (на кожному кроці Монте-Карло) значення енергії демона.

```
function z=DemonE(N,NTrial,Vel,dV)
% Функція, що повертає миттєві значення енергії демона
% N - число частинок системи, NTrial - кількість випробувань
% Vel - початкові швидкості, dV - максимальне значення зміни швидкості
Edemon=0; z(1)=Edemon; k=1;
for j=1:NTrial
    for i=1:N
        dv=(2*rand(1)-1)*dV; % випадкова зміна швидкості
        lp=floor(N*rand(1)+1); % випадковий вибір номера частинки
        Vtrial=Vel(lp)+dv; % пробна зміна швидкості
        de=0.5*(Vtrial.^2-Vel(lp).^2); % пробна зміна енергії
        if de<=Edemon % якщо енергія зменшується - пробна зміна приймається
            Vel(lp)=Vtrial; Edemon=Edemon-de;
        end
    end
    k=k+1; z(k)=Edemon;
end
```

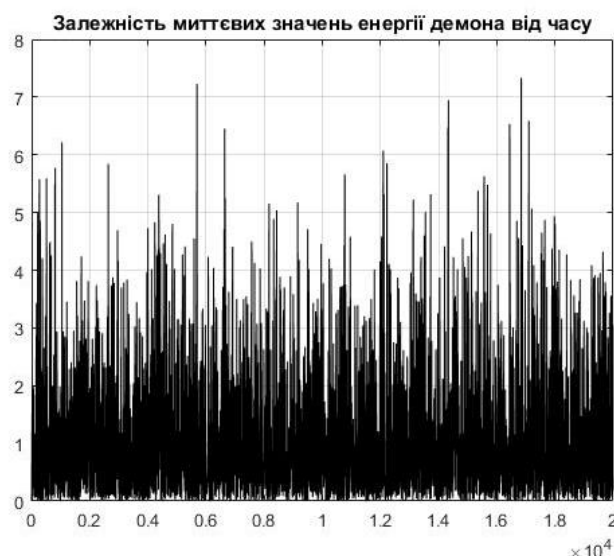
end

Далі необхідно виконати наступну послідовність команд:

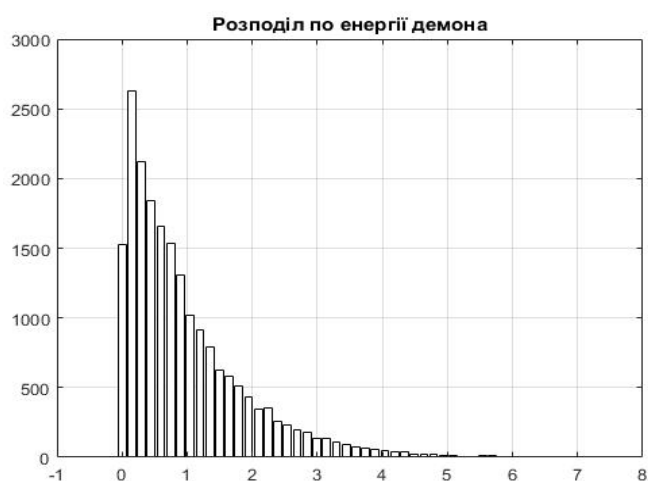
```
clear
Ensys=40; % енергія системи
N =40; % число частинок системи
NTrial=500; % кількість випробувань
dV=2*2^0.5; % максимальне значення зміни швидкості
Vel=Init(N,Ensys); % обчислення початкових швидкостей частинок
Ed=DemonE(N,NTrial,Vel,dV); % обчислення миттєвих значень енергії демона
% візуалізація залежності миттєвих значень енергії демона від часу
i=1:length(Ed);
figure; plot(i,Ed,'k'); axis([0 20000 0 8]); grid;
title('Залежність миттєвих значень енергії демона від часу');
% обчислення й візуалізація розподілу імовірностей
x1=min(Ed); x2=max(Ed); Nint=50;
i=1:Nint;
x=x1+(x2-x1)/(Nint-1)*(i-1); h=hist(Ed,x);
figure
bar(x,h); grid;
title('Розподіл по енергії демона');
colormap white
% обчислення й візуалізація функції, апроксимуючої розподіл
Fun=@(u,z) u(1)*exp(-u(2)*z); % задання апроксимуючої функції
beta=nlinfit(x,h,Fun,[3000 1]); % обчислення коефіцієнтів апроксимуючої функції
% візуалізація гістограми послідовності миттєвих значень енергії демона
% та апроксимуючої функції
Ni=500;
i=1:Ni;
X(i)=x1+(x2-x1)/(Ni-1)*(i-1);
figure
bar(x,h);
colormap white
hold on
plot(X(i),Fun(beta,X(i)),'g'); grid;
title('Функція, що апроксимує розподіл по енергії демона');
```

Результати виконання описаної послідовності команд наведені на рис.5.1.

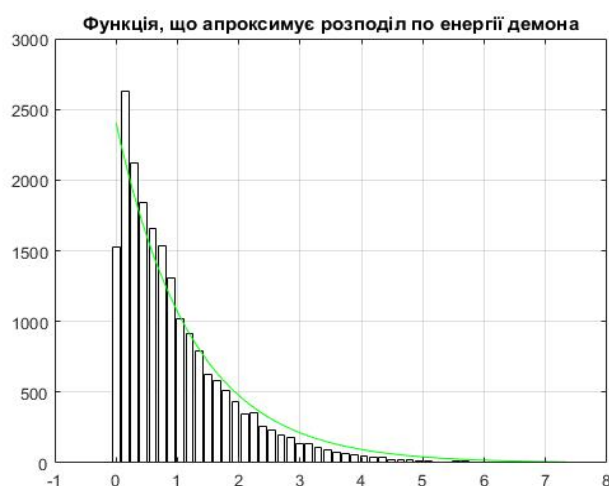
Таким чином, результати моделювання ідеального газу методами мікроканонічного та канонічного ансамблів дозволяють зробити наступні висновки:



а)



б)



в)

Рисунок 5.1

1. Розподіл імовірностей енергії демона описується функцією вигляду

$$P(E_d) = A e^{-\frac{E_d}{T_{term}}}, \quad (5.3)$$

де A – сталий коефіцієнт, $T_{term} \approx 0.99013$.

2. Температура ідеального газу T_{kin} , яка визначається як середня кінетична енергія, що припадає на одну частинку, співпадає в межах точності моделі з температурою термостату T_{term} . Це дозволяє зробити висновок про те, що демон перебуває у термодинамічній рівновазі з термостатом.

Розподіл імовірності (5.3) – це розподіл Больцмана або канонічний розподіл, який прийнято записувати у такому вигляді:

$$P(E) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E}{k_B T}}, \quad (5.4)$$

де Z – нормувальний множник, що обирається з умови рівності одиниці суми по всіх станах демона, $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К – стала Больцмана, T – абсолютна температура.

Температура може вимірюватися в одиницях k_B , тоді розподіл Больцмана приймає вигляд

$$P(E) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E}{T}}. \quad (5.5)$$

Формули (5.4) та (5.5) забезпечують простий спосіб обчислення температури по середній енергії демона E_d , яка за визначенням дорівнює

$$\langle E_d \rangle = \frac{\int E e^{-\frac{E}{T}} dE}{\int e^{-\frac{E}{T}} dE} = T. \quad (5.6)$$

Таким чином, середня енергія демона дорівнює температурі термостата. Даний результат справедливий лише за умови, що значення енергії приймають неперервні значення.

Формули (5.5), (5.6) застосовні до будь-якої мікросистеми, що перебуває у тепловій рівновазі з термостатом, – канонічного ансамбля, при цьому всякий макростан задається температурою T , кількістю частинок системи N та об'ємом V . На відміну від канонічного ансамбля, мікроканонічний ансамбль характеризується енергією E , кількістю частинок системи N та об'ємом V .

5.1.3 Модель Ізінга

Однією з найпростіших моделей, що використовуються в статистичній фізиці для моделювання фазових переходів в магнітних речовинах або бінарних сполуках, є модель Ізінга. Дана модель відноситься до широкого класу решіткових моделей, в яких розглядаються локальні взаємодії, тобто взаємодії між найближчими вузлами решітки. У магнітних системах локальні взаємодії обумовлені спінами, розташованими у вузлах решітки. Спіни можуть бути, наприклад, магнітними моментами атомів в твердому тілі, що взаємодіють між собою та зовнішнім магнітним полем.

Розглянемо решітку, що складаються з N вузлів. Пов'яжемо з кожним i -м вузлом решітки число $s_i = \pm 1$, що характеризує напрямок магнітного моменту системи, де $s_i = +1$, якщо спин орієнтований в додатному напрямку осі Z , та $s_i = -1$, якщо спин орієнтований у від'ємному напрямку осі Z . (Дана картина характерна для частинок з напівцілим спіном, хоча далі ми розглядаємо спіни як класичні степені свободи і не вводимо для них правил комутації кутового моменту, що використовуються в квантовій механіці.)

Будь-який мікростан решітки задається набором змінних $\{s_1, s_2, \dots, s_N\}$.

Оскільки макроскопічні властивості системи визначаються властивостями її досяжних мікростанів, необхідно обчислити залежність енергії E від конфігурації спінів. Повна енергія при наявності магнітного поля h в моделі Ізінга дорівнює

$$E = -J \sum_{\langle i, j \rangle} s_i s_j - h \sum_{i=1}^N s_i, \quad (5.7)$$

де позначення $\langle i, j \rangle$ означає, що сума береться по всіх найближчих сусідніх парах спінів, константа обмінного зв'язку J характеризує силу взаємодії сусідніх спінів (рис.5.2).



Рисунок 5.2 – Енергія взаємодії між найближчими сусідніми спінами за відсутності магнітного поля

Якщо $J > 0$, то у стані $\uparrow\uparrow$ та $\downarrow\downarrow$, тобто за однакової орієнтації спінів найближчих сусідів, енергетично вигіднішими є стани $\uparrow\downarrow$ та $\downarrow\uparrow$, в яких сусідні спіни орієнтовані у протилежні боки. Отже, можна очікувати, що для $J > 0$ стан з найменшою повною енергією є феромагнітним, тобто середнє число спінів, зорієнтованих в одному напрямі, не дорівнює нулю. Якщо $J < 0$, то, з енергетичної точки зору, кращими виявляються стани $\uparrow\downarrow$ та $\downarrow\uparrow$, для яких сусідні спіни є антипаралельними. Отже, середнє число спінів, зорієнтованих в одному напрямі, дорівнює нулю, тобто спіни

впорядковані через один (антиферромагнітний стан). При докладанні зовнішнього магнітного поля, спрямованого паралельно осі Z , спіни \uparrow та \downarrow набувають додаткової внутрішньої енергії, яка дорівнює $-h$ та $+h$, відповідно.

Виділимо основні спрощуючі припущення, покладені в основу моделі Ізінга:

1. Кінетична енергія вузлів решітки приймається рівною нулю.
2. У виразі, що описує енергію взаємодії, враховується лише внесок від найближчих сусідів, і передбачаються лише два дискретні стани для спінів.

Оскільки в подальшому нас цікавитимуть термодинамічні характеристики даної системи, виявляється зручним вимірювати енергії зв'язків J та h в одиницях температури. Тоді нагрівання системи призводитиме до послаблення цих зв'язків. Можливі конфігурації системи визначаються завданням значень всіх спінових змінних, число яких становить 2^N , а внесок будь-якої з 2^N спінових конфігурацій s визначається функцією розподілу для канонічного ансамблю

$$\omega(s) = \frac{e^{-E(s)}}{Z}, \quad (5.8)$$

де

$$Z(J, h) = \sum_i^N e^{-E(s_i)}. \quad (5.9)$$

Отримаємо вираз, що пов'язує енергію демона і температуру термостата. Нагадаємо, що в неперервному випадку розподіл енергії демона підпорядковувалося формулі Больцмана (5.5). Припустимо, що даний розподіл імовірностей справедливий для будь-якої макроскопічної системи, що перебуває у стані термодинамічної рівноваги. Тоді $\langle E_d \rangle$ дорівнює

$$\langle E_d \rangle = \frac{\sum E e^{-\frac{E}{T}} dE}{\sum e^{-\frac{E}{T}} dE}, \quad (5.10)$$

де суми обчислюються за всіма можливими значеннями E_d .

Мінімальна ненульова втрата енергії системи в нульовому магнітному полі складає, як видно з рис.5.3, $2sJ$, де s – сумарний спін найближчих сусідів перекидаючого спіна.

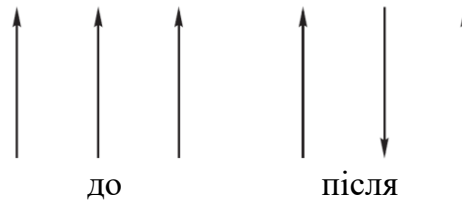


Рисунок 5.3 – Зміна енергії, обумовлена змінами орієнтації центрального спіну

В одновимірному випадку сумарний спін найближчих сусідів дорівнює 0 або 2, тобто мінімальна ненульова втрата енергії дорівнює $2J$. Отже, енергія демона може дорівнювати $0, 2J, 4J, \dots$. Якщо ввести позначення $x = \frac{2J}{T}$, то вираз (5.10) для нескінченної решітки набуває вигляду

$$\left\langle \frac{E_d}{T} \right\rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} (xn) e^{-nx}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx}}. \quad (5.11)$$

Нескінченні суми у чисельнику та знаменнику можуть бути обчислені аналітично. Можна використати для обчислення вбудований у MatLab символічний процесор:

$$\sum_{n=0}^{\infty} (xn) e^{-nx} \rightarrow x \frac{\exp(-x)}{(1 - \exp(-x))^2}, \quad (5.12)$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx} \rightarrow \frac{1}{1 - \exp(-x)}. \quad (5.13)$$

Поділивши (5.12) на (5.13) та виконавши очевидне перетворення, отримуємо

$$\left\langle \frac{E_d}{T} \right\rangle = \frac{x}{e^x - 1}. \quad (5.14)$$

Підставивши у (5.14) замість x вираз $\frac{2J}{T}$ і розв'язавши отримане рівняння

відносно T , отримуємо:

$$T = \frac{2J}{\ln \left(1 + \frac{2J}{\langle E_d \rangle} \right)}. \quad (5.15)$$

В одновимірній моделі Ізінга демон повинен обирати спіни випадковим чином, що дозволить уникнути підрахунку періодично повторюваних конфігурацій. Оскільки нашою метою є оцінювання термодинамічних характеристик нескінченної

термодинамічної системи, слід урахувати граничні умови. За такі оберемо періодичні (тороїдальні) граничні умови: решітка вважається кільцем, в якому спіни s_i , що перебувають у вузлах $i = 1$ та $i = N$, взаємодіють між собою. Це забезпечує рівну кількість взаємодій для всіх спінів у досліджуваній системі.

Для моделювання одновимірної моделі Ізінга методом канонічного ансамбля в MatLab необхідно створити файл Ising.m, який містить опис функції, що повертає значення повної енергії системи, енергії демона, намагніченості та середнє число прийняття рішень.

```
function [Es Ed SpM Accept]=Ising(Nspin,J,h,Esi,NTrial)
% Функція, що повертає миттєві значення: Es - повної енергії системи,
% Ed - енергії демона, SpM - намагніченості, Асепт - середнього числа прийняття
% Nspin - число спінів системи, J - константа обмінної взаємодії
% h - зовнішнє магнітне поле, Esi - кінцева енергія системи
% NTrial - кількість випробувань задання конфігурації спінів в момент часу t=0
for i=1:Nspin
    s(i)=1;
end
M=Nspin; Ens=- (J+h)*Nspin; Edemon=2*J*ceil((Esi-Ens)/(2*J));
Es(1)=Ens; % енергія системи в момент часу t=0
Ed(1)=Edemon; % енергія демона в момент часу t=0
SpM(1)=M; % магнітний момент системи в момент часу t=0
Accept=0; k=1;
% реалізація методу мікроканонічного ансамбля
for i=1:NTrial
    for j=1:Nspin
        Ispin=floor(Nspin*rand(1)+1); % випадковий вибір номеру спіна
        % періодичні граничні умови
        if Ispin==1    Left=s(Nspin);
        else          Left=s(Ispin-1);
        end
        if Ispin==Nspin    Right=s(1);
        else               Right=s(Ispin+1);
        end
        de=2*s(Ispin)*(-h+J*(Left+Right)); % пробна зміна енергії спіна
        if de<=Edemon % прийняття пробної зміни
            s(Ispin)=-s(Ispin);    Accept=Accept+1;
            Edemon=Edemon-de;      Ens=Ens+de;
        end
        k=k+1;    Es(k)=Ens;    Ed(k)=Edemon;    SpM(k)=sum(s);
    end
end
Accept=Accept/(NTrial*Nspin);
```

end

Далі необхідно виконати наступну послідовність команд:

```
Nspin=200; % число спінів системи
J=1; % константа обмінної взаємодії
h=0; % зовнішнє поле
Esi=-10; % задання кінцевого значення енергії системи
NTrial=100; % кількість випробувань
% обчислення миттєвих значень: повної енергії системи (Es), енергії демона (Ed),
% намагніченості (SpM) та середнього числа прийняття рішень (Accept)
[Es Ed SpM Accept]=Ising(Nspin,J,h,Esi,NTrial);
% візуалізація залежностей миттєвих значень повної енергії системи та
% енергії демона від часу
i=1:1200;
figure; plot(i,Es(i), 'b'); grid
title('Залежність миттєвих значень повної енергії системи від часу');
figure; plot(i,Ed(i), 'g'); grid
title('Залежність миттєвих значень повної енергії демона від часу');
% обчислення розподілу імовірностей миттєвих значень енергії демона
Nint=50; i=1:Nint;
x1=min(Ed); x2=max(Ed); x=x1+(x2-x1)/Nint*i;
h=hist(Ed,x);
% визначення та візуалізація функції, що описує розподіл імовірності
Fun=@(u,z) u(1)*exp(-u(2)*z);
beta=nlinfit(x,h,Fun,[10000 0.05]);
figure; bar(x,h); colormap white; hold on
Ni=500;
j=1:Ni;
X(j)=x1+(x2-x1)/Ni*j;
plot(X,Fun(beta,X),'r'); grid; title('Функція розподілу енергії демона');
Emean=mean(Es)/Nspin; % обчислення середньої намагніченості на 1 спін
Mmean=mean(SpM)/Nspin; % обчислення середньої енергії на 1 спін
Tmean=2/log(1+2./mean(Ed)); % обчислення температури системи
end
```

Нижче наведені результати виконання описаної послідовності команд (повідомлення, що виводяться у командне вікно MatLab, та графіки обчислених залежностей (рис.5.4)).

```
Emean = -0.0936
Mmean = 0.0118
Tmean = 9.6823
```

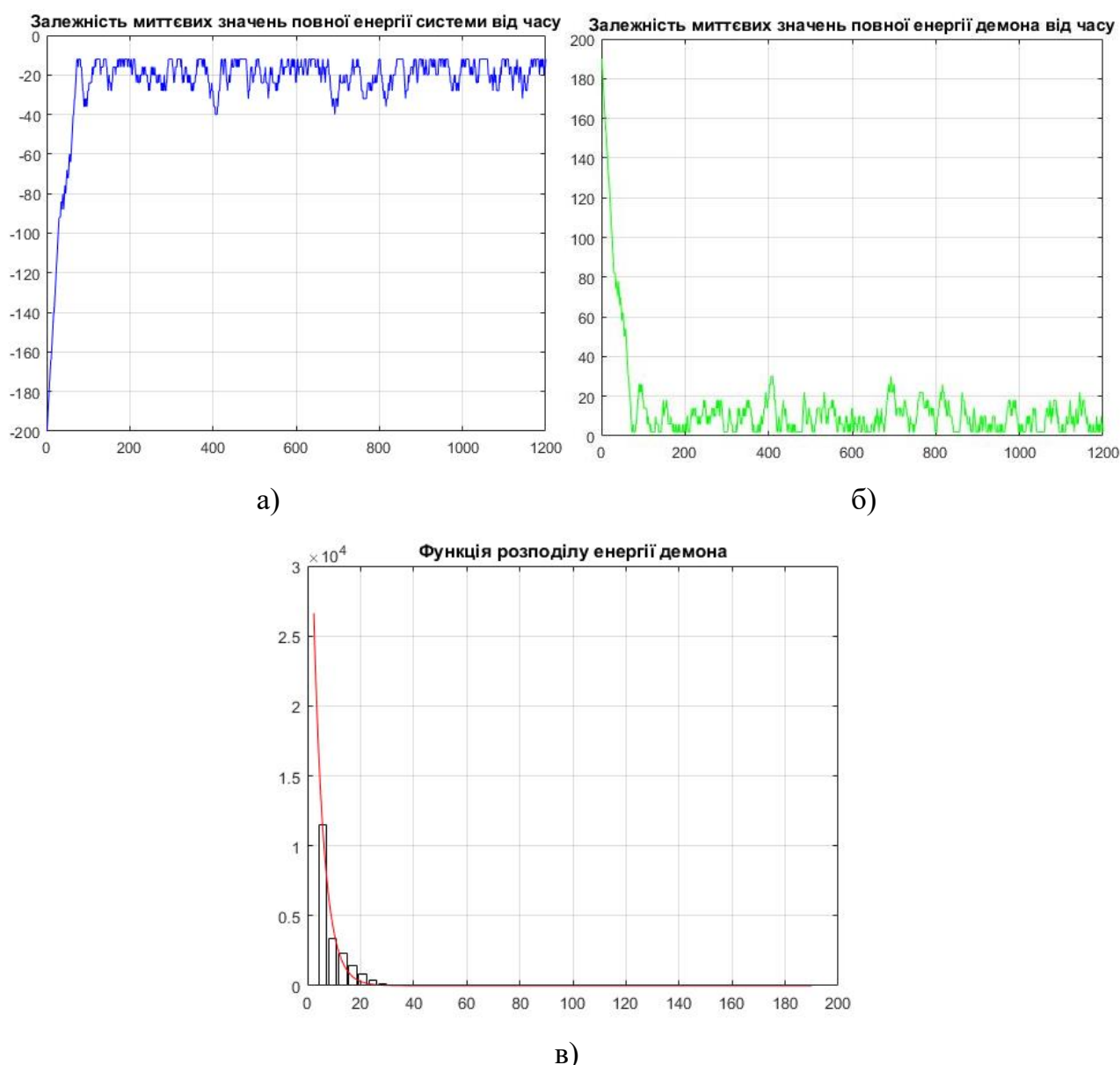


Рисунок 5.4

Оскільки спочатку конфігурації спінів, що забезпечують шукане значення енергії, невідомі, за початкову конфігурацію ми обираємо конфігурацію з мінімальною енергією, тому для досягнення рівноважного стану із заданою повною енергією системи потрібний деякий скінченний час – час релаксації (див. рис.5.4).

Узагальнимо метод мікроканонічного ансамблю, використаний нами для одновимірної системи спінів, на випадок двовимірної системи (рис.5.5).

Як і в одновимірному випадку, обираємо періодичні (тороїдальні) граничні умови, тобто уявлятимемо решітку кільцем, в якому спіни s_{ij} , що перебувають у вузлах ($i = 1, j = 1, 2, \dots, N$), взаємодіють зі спінами, що перебувають у вузлах ($i = N, j = 1, 2, \dots, N$),

$j = 1, 2, \dots, N$), а спіни, розміщені у вузлах ($i = 1, 2, \dots, N$, $j = 1$), взаємодіють зі спінами, розміщеними у вузлах ($i = 1, 2, \dots, N$, $j = N$) (див. рис.5.6).

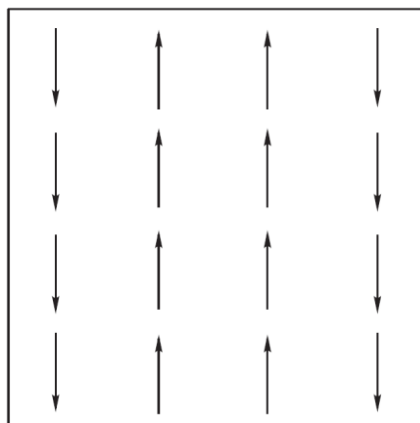


Рисунок 5.5 – Квадратна двовимірна решітка, що складається з $T = 16$ спінів

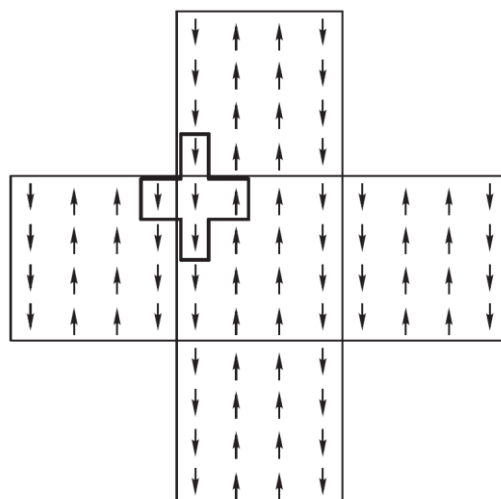


Рисунок 5.6 – Задання граничних умов для квадратної двовимірної решітки, що складається з $T = 16$ спінів

Це забезпечує однакове число взаємодій для всіх спінів у досліджуваній системі. Взаємодію обраного спіна з сусідами можна розглядати як взаємодію з одним спіном, величина якого дорівнює алгебраїчній сумі величин чотирьох сусідніх спінів, яка, вочевидь, може приймати три значення: 0, 2, 4. Отже, мінімально можливе значення зміни енергії при перекиданні одного спіна становить $2J - (-2J) = 4J$, на відміну від одновимірного випадку, в якому квант зміни енергії дорівнював $2J$. Зазначена обставина визначає необхідність заміни в (5.15) $2J \rightarrow 4J$:

$$T = \frac{4J}{\ln \left(1 + \frac{4J}{\langle E_d \rangle} \right)}. \quad (5.16)$$

Алгоритм моделювання двовимірної системи, що складається з N спінів, методом Монте-Карло реалізується наступною послідовністю дій:

1. Задання числа спінів решітки N_{spin} .
2. Задання числа кроків методу Монте-Карло на спіні.
3. Задання орієнтації спінів у вузлах квадратної решітки в момент часу $t = 0$ (початкової конфігурації системи).
4. Вибір випадковим чином одного зі спінів системи.
5. Обчислення пробної зміни енергії.
6. Якщо пробне зміна призводить до зменшення енергії системи, то система віддає енергію демону – і нова конфігурація приймається.
7. Якщо пробне зміна збільшує енергію системи, то нова конфігурація приймається в тому випадку, якщо демон має достатню енергію для передачі її системі.
8. Якщо пробне зміна не змінює енергію системи, то приймається нова конфігурація.
9. Повторення п.4–8 (число повторень дорівнює числу спінів у системі).
10. Повторення п.4–9 (число повторень дорівнює числу кроків методу Монте-Карло на спіні).

Для реалізації описаного алгоритму моделювання двовимірної системи спінів методом Монте-Карло в MatLab створимо файл `Ising2.m`, що містить опис функції, яка повертає миттєві значення: енергії системи, енергії демона, намагніченості, числа прийняття рішень, а також миттєві конфігурації спінів.

```
function [Es,Ed,SpM,A,S]=Ising2(Nspin,J,h,Esi,NTrial)
% Функція, що повертає миттєві значення: Es - енергії системи, Ed - енергії демона,
% SpM - намагніченості, Асепт - числа прийняття рішень, S - миттєві конфігурації спінів
% Nspin - число спінів системи, J - константа обмінної взаємодії
% h - напруженість зовнішнього магнітного поля, Esi - кінцева енергія системи
% NTrial - кількість випробувань
Ns=Nspin.^0.5; % число спінів уздовж одного боку
s=ones(Ns,Ns); % початкова конфігурація спінів
Ens=- (J+h)*Nspin; % початкова енергія системи
% початкова енергія демона
Edemon=4*J*floor((Esi-Ens)/(4*J));
```

```

Es(1)=Ensys;  Ed(1)=Edemon;
S=s;  k=1;
for i=1:NTrial
    Accept=0;
    for j=1:Nspin
        % випадковий вибір вузла сітки
        lx=floor(Ns*rand(1)+1);    ly=floor(Ns*rand(1)+1);
        % граничні умови
        if lx==1    Left=Ns;
        else        Left=lx-1;
        end
        if lx==Ns    Right=1;
        else        Right=lx+1;
        end
        if ly==1    Down=Ns;
        else        Down=ly-1;
        end
        if ly==Ns    Up=1;
        else        Up=ly+1;
        end
        % пробна зміна енергії
        de=2*s(ly,lx)*(-h+J*(s(ly,Left)+s(ly,Right)+s(Down,lx)+s(Up,lx)));
        if de<=Edemon % прийняття пробної зміни енергії
            s(ly,lx)=-s(ly,lx);    Accept=Accept+1;
            Edemon=Edemon-de;    Ensys=Ensys+de;
        end
        k=k+1;    Es(k)=Ensys;    Ed(k)=Edemon;    A(k-1)=Accept;
        s1=sum(s);    SpM(k)=sum(s1);    S=cat(3,S,s);
    end
end
A=A/NTrial;
end

```

Далі необхідно виконати наступну послідовність команд:

```

Nspin=81; % число спінів системи
J=1; % константа обмінної взаємодії
h=0; % напруженість зовнішнього магнітного поля
Esi=-10; % кінцева енергія системи
NTrial=50; % кількість випробувань
[Es,Ed,SpM,A,S]=Ising2(Nspin,J,h,Esi,NTrial);
% візуалізація залежності миттєвих значень повної енергії системи
% та енергії демона від часу
i=1:2000;
figure; plot(i,Es(i),'b'); grid;

```

```

title('Залежність миттєвих значень енергії системи від часу');
figure; plot(i,Ed(i),'b'); grid;
title('Залежність миттєвих значень енергії демона від часу');
% візуалізація миттєвих конфігурацій системи у вигляді векторного поля
i=1:9; j=1:9;
V(i,j)=0; U(i,j)=0; Z(i,j)=0;
figure; quiver3(Z,U,V,S(:,1)); colormap white;
title('Конфігурація системи в момент часу t=0');
:
% візуалізація миттєвих конфігурацій системи у вигляді паралелепіпедів
figure; bar3(S(:,1)); axis([0 10 0 10 -1.5 1.5]); colormap white
title('Конфігурація системи в момент часу t=0');
:
mean(Es); % середня енергія системи
Emean=mean(Es)/Nspin; % середня енергія системи на 1 спін
SpMmean=mean(SpM)/Nspin; % середня намагніченість на 1 спін
Amean=mean(A); % середнє значення коефіцієнту прийняття на 1 крок
Tmean=4/log(1+4/mean(Ed)); % рівноважна температура системи
end

```

Нижче наведені результати виконання описаної послідовності команд (повідомлення, що виводяться у командне вікно MatLab, та графіки обчислених залежностей (рис.5.7)).

```

Emean =    -0.1731
SpMmean =   0.5617
Amean =     0.2350
Tmean =     2.5100

```

5.2 Моделювання мікроканонічного ансамблю методом Монте-Карло

Вище ми використовували метод канонічного ансамблю для моделювання поведінки статистичних систем. Одною з безперечних переваг даного методу є очевидна простота вихідного постулату про рівність апіорних імовірностей появи можливих мікростанів. Необхідно також зазначити, що при проведенні обчислювальних експериментів з використанням мікроканонічного ансамблю демон не пред'являє жодних вимог до якості генерованої послідовності випадкових чисел. Дана обставина визначило відому популярність методу канонічного розподілу та його модифікацій.

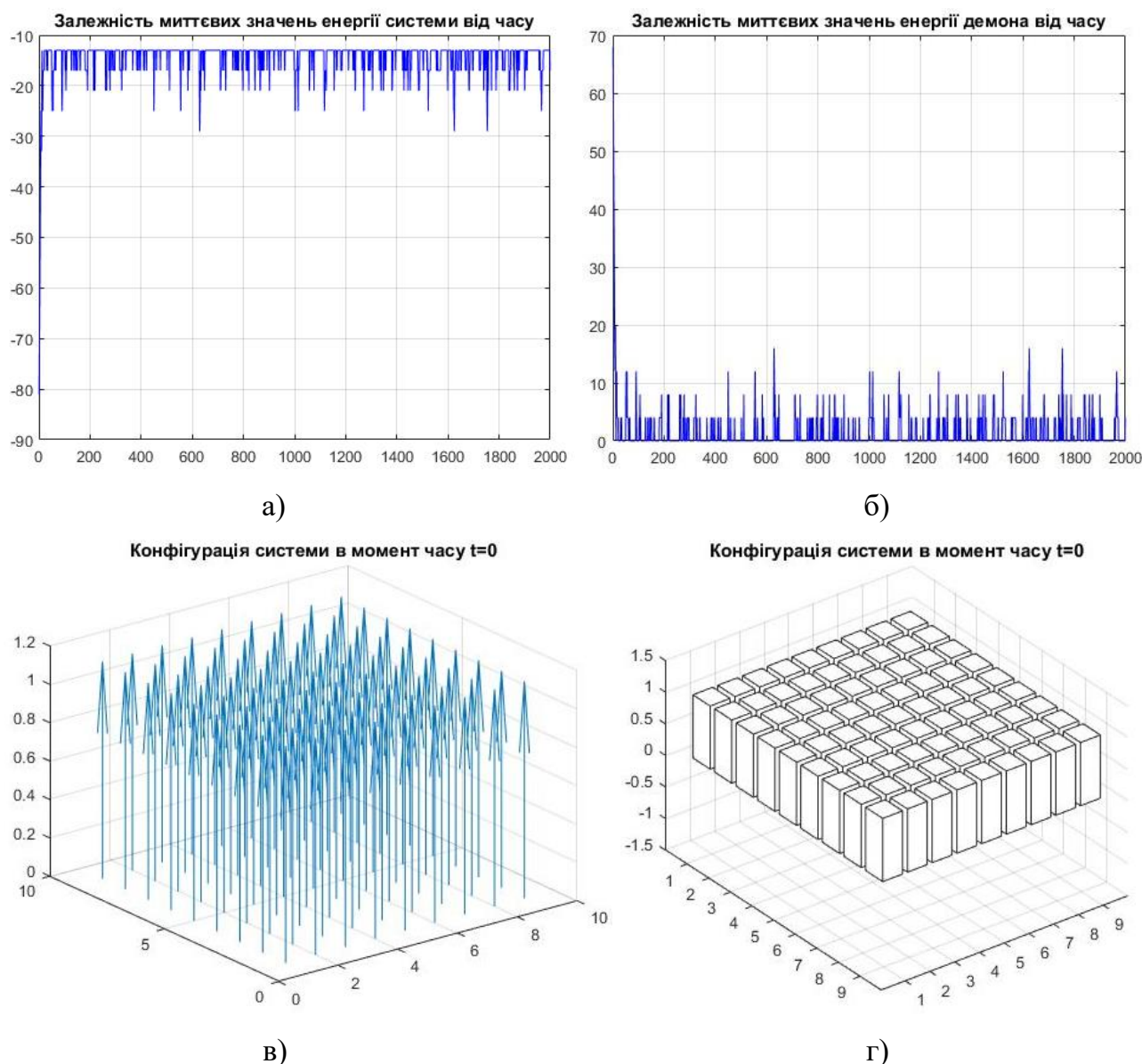


Рисунок 5.7

В той же час алгоритму демона притаманний цілий ряд *недоліків*, мабуть, головний з яких полягає в складності отримання системи з наперед заданою внутрішньою енергією. Необхідно також зазначити, що, з фізичної точки зору, більш природно вивчати залежності термодинамічних величин, що характеризують макроскопічну систему, від температури, а не від повної внутрішньої енергії. Оскільки в натурних експериментах вимірюється саме температура системи, а не її внутрішня енергія.

Розглянемо *метод канонічного ансамблю*, що дозволяє моделювати поведінку системи, що перебуває при постійній температурі. Даний метод використовується для моделювання ідеального класичного газу та моделі Ізінга.

5.2.1 Канонічний ансамбль

Як відомо, переважна більшість фізичних систем не є ізольованими. Це означає, що вони обмінюються енергією з навколишнім середовищем. Оскільки розміри досліджуваних фізичних систем, як правило, є малими порівняно з розмірами навколишнього середовища, можна вважати що будь-яка зміна енергії малої системи не впливає помітно на температуру великої системи. (Наприклад, включення в мережу праски (мала система) не робить помітного впливу на температуру повітря в кімнаті (велика система)). Отже, велику систему можна розглядати як тепловий резервуар із заданою абсолютною температурою T (термостат).

При контактуванні макроскопічної системи з термостатом система прагне перейти до рівноважного стану шляхом обміну енергією з термостатом. Процес обміну енергією триває доти, поки температура системи і температура термостата не стануть рівними.

Вище було показано, що як мала система може виступати система, що складається з однієї частинки (демон). Імовірність P_s того, що демон перебуває у мікростані s з енергією E_s , описується формулою

$$P_s = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E_s}{T}}, \quad (5.17)$$

де T – температура, вимірювана в енергетичних одиницях, Z – нормувальний множник,

який обирається з умови
$$\sum_{s=1}^M P_s = 1. \quad (5.18)$$

Підставивши (5.17) у (5.18), отримаємо:
$$Z = \sum_{s=1}^M e^{-\frac{E_s}{T}}. \quad (5.19)$$

Суми і (5.18) та (5.19) обчислюються за всіма M мікростанами системи.

Знання імовірності P_s дозволяє обчислити середні по ансамблю макроскопічні характеристики $\langle A \rangle$ згідно із загальним правилом

$$\langle A \rangle = \sum_{s=1}^M A_s P_s. \quad (5.20)$$

Так, наприклад, середня по ансамблю мікростанів енергія $\langle E \rangle$ дорівнює

$$\langle E \rangle = \sum_s E_s P_s = \frac{1}{Z} \sum_s E_s e^{-\frac{E_s}{T}}. \quad (5.21)$$

Зазначимо, що через велику кількість доданків пряме обчислення сум у (5.21) неможливе. Дійсно, навіть для досить малої решітки розміром 16×16 існує $2^{256} \approx 10^{77}$ конфігурацій. За цих умов для оцінювання середніх значень макроскопічних характеристик системи доводиться використовувати імовірнісні методи, одним з варіантів яких є алгоритм Метрополіса.

5.2.2 Алгоритм Метрополіса для канонічного ансамбля

Розглянемо систему, яка складається з N частинок, розміщених в об'ємі V при постійній температурі T . Згенеруємо деяке обмежене число конфігурацій m з повного числа можливих конфігурацій M . Тоді оцінка середнього значення $\langle A \rangle$ може бути отримана з наступного виразу

$$\langle A \rangle \approx \sum_{s=1}^m A_s P_s = \frac{\sum_{s=1}^m A_s e^{-\frac{E_s}{T}}}{\sum_{s=1}^m e^{-\frac{E_s}{T}}}, \quad (5.22)$$

де E_s та A_s – відповідно, повна енергія системи E та значення фізичної величини A в конфігурації s .

Для обчислення $\langle A \rangle$ згідно з (5.22) можна застосувати процедуру, яка полягає у:

генерації випадкової конфігурації, обчисленні E_s , A_s і добутку $A_s e^{-\frac{E_s}{T}}$ та підрахунку відповідного внеску кожної конфігурації у суму (5.22). Однак поява кожної конкретної конфігурації є досить малоїмовірною, отже, велике число конфігурацій даватимуть малий внесок у суми (5.22), тому, такий обчислювальний алгоритм також буде недостатньо ефективним.

Для усунення зазначеного недоліку можна скористатися методом, який використовується для обчислення визначених інтегралів методом Монте-Карло. Ідея даного методу полягає в генерації конфігурації згідно з функцією розподілу ймовірностей π_s . Оскільки подальше усереднення проводиться за m конфігураціям

зсунутої вибірки, то для виключення даного зсуву при обчисленні суми в (5.22) кожна конфігурація повинна братися з ваговим множником $\frac{1}{\pi_s}$:

$$\langle A \rangle \approx \frac{\sum_{s=1}^m A_s \frac{1}{\pi_s} e^{-\frac{E_s}{T}}}{\sum_{s=1}^m \frac{1}{\pi_s} e^{-\frac{E_s}{T}}} . \quad (5.23)$$

Найдоцільнішим виявляється обрати $\frac{1}{\pi_s}$ у вигляді:

$$\pi_s = \frac{e^{-\frac{E_s}{T}}}{\sum_{s=1}^m e^{-\frac{E_s}{T}}} . \quad (5.24)$$

У цьому випадку, як легко переконатися прямою підстановкою (5.24) у (5.23), $\langle A \rangle$ дорівнює

$$\langle A \rangle \approx \frac{\sum_{s=1}^m A_s \sum_{s=1}^m e^{-\frac{E_s}{T}}}{\sum_{s=1}^m \sum_{s=1}^m e^{-\frac{E_s}{T}}} = \frac{\sum_{s=1}^m A_s}{m} , \quad (5.25)$$

де при перетворенні знаменника врахована умова нормування $\sum_{s=1}^m e^{-\frac{E_s}{T}} = 1$.

Формула (5.25) дозволяє дати загальний опис алгоритму Метрополіса:

1. Сформулювати початкову конфігурацію системи.
2. Провести випадкову пробну зміну початкової конфігурації.
3. Обчислити зміну енергії системи ΔE , обумовлену проведеною пробною зміною конфігурації.
4. Якщо $\Delta E \leq 0$, прийняти нову конфігурацію системи та перейти до п.8.
5. Якщо $\Delta E > 0$, обчислити «імовірність переходу» $W = e^{-\frac{\Delta E}{T}}$.
6. Згенерувати випадкове число r з рівномірним законом розподілу в інтервалі $[0, 1]$.

7. Якщо $r \leq W$, прийняти нову конфігурацію системи, в іншому випадку зберегти попередню конфігурацію.

8. Визначити значення шуканих фізичних величин.

9. Повторити п.2–8 для отримання достатнього числа конфігурацій.

10. Обчислити середні за статистично незалежними одна від одної конфігураціями.

Описаний алгоритм можна тлумачити як випадкові блукання. Пронумеруємо різні конфігурації порядковими номерами $i = 1, 2, 3, \dots$. Тоді кожен конфігурацію можна вважати певною «точкою», а обчислювальний процес згідно з алгоритмом Метрополіса – випадковим блуканням по даних точках. Дії, що виконуються згідно з п.3–7, дозволяють визначити умовну ймовірність того, що в «момент часу» об'єкт перебуватиме в точці i за умови, що в момент часу t він перебував в точці j , тобто знайти

відношення $\frac{P(i)}{P(j)}$. Оскільки обчислюється відношення ймовірностей, немає

необхідності проводити їх нормування. Оскільки конфігурації генеруються з ймовірністю, пропорційною необхідній ймовірності, для обчислення середніх слід використовувати формулу (5.25). Таким способом виявляється можливим оцінити середні значення макроскопічних величин, але не нормувальний коефіцієнт Z .

Існує строгий математичний доказ того факту, що після досить великого числа кроків алгоритм Метрополіса генерує стани, енергія яких розподілена за Больцманом. Однак, дотримуючись обраного фізичного підходу, ми свідомо відмовляємося від математично строгого доказу на користь емпіричного підходу, тобто підтвердження даного висновку на прикладі моделі ідеального газу та одновимірної системи спінів.

Вибір розподілу Больцмана не є єдиною можливим. Виявляється, що до розподілу Больцмана в асимптотичній границі призводять й інші розподіли ймовірності. Можна показати, що існує єдина необхідна умова, яка полягає в тому, щоб

$$W(1 \rightarrow 2)e^{-\frac{E_1}{T}} = W(2 \rightarrow 1)e^{-\frac{E_2}{T}}. \quad (5.26)$$

Рівність (5.26) називається принципом детальної рівноваги.

На прикладі класичного ідеального газу можна показати, що алгоритм Метрополіса призводить для окремих мікростанів до розподілу Больцмана. Як відомо, будь-який мікростан газу повністю описується завданням швидкості частинок,

оскільки енергія ідеального газу залежить лише від швидкості частинок. При цьому швидкість класичної частинки є величиною неперервною, в той час як для кількісного опису системи необхідно мати рахункове число мікростанів. Отже, необхідно провести розбиття інтервалу можливих значень швидкостей на кінцеве число досить малих дискретних інтервалів. Наприклад, для 20 частинок та поділу інтервалу можливих швидкостей на 10 інтервалів повне число можливих мікростанів становить 10^{20} . Вочевидь, досить проблематично не тільки пронумерувати дані стани, а й обчислити за прийнятний час точні оцінки імовірностей і середніх величин. Отримана оцінка підтверджує правомірність використання моделі ідеального газу для демонстрації асимптотичних характеристик алгоритму Метрополіса.

Для реалізації алгоритму Метрополіса в моделі ідеального газу, який містить одну частинку, в MatLab створимо функцію IdealGas.m, що повертає миттєві значення швидкості, енергії та середнє число прийняття рішення.

```
function [V,Es,Accept] = IdealGas(Vel,T,dVmax,NTrial)
% Функція, що повертає миттєві значення швидкості (V), енергії (E)
% та середнє число прийняття рішення (Accept)
% Vel - початкова швидкість, T - температура газу
% dVmax - максимальна зміна швидкості, NTrial - число випробувань
beta=1/T;
E=Vel.^2/2; % початкова енергія
Accept=0;
for i=1:NTrial
    dV=(2*rand(1)-1)*dVmax;
    Vtrial=Vel+dV; % випадкова зміна швидкості
    de=0.5*(Vtrial.^2-Vel.^2); % пробна зміна енергії
    if de>0
        if exp(-beta*de)>=rand(1) % крок приймається
            Vel=Vtrial;      Accept=Accept+1;      E=E+de;
        end
    else % крок не приймається
        Vel=Vtrial;      Accept=Accept+1;      E=E+de;
    end
    Es(i)=E;  V(i)=Vel;
end
Accept=Accept/NTrial;
end
```

Далі необхідно виконати наступну послідовність команд:

```
Vel=0; % початкова швидкість частинки
```

```

T=0.5; % температура газу
Vmax=4; % максимальна зміна швидкості
NTrial=10^4; % число випробувань
% обчислення миттєвих значень швидкості (V), енергії (E)
% та середнього числа прийняття рішення (Accept)
[V Es Accept]=IdealGas(Vel,T,dVmax,NTrial);
Vmean=mean(V); % середня швидкість частинки
Esmean=mean(Es); % середня енергія частинки
i=1:NTrial;
figure; plot(i,Es,'k'); % візуалізація залежності миттєвих значень енергії від часу
% обчислення й візуалізація функції розподілу за енергією ідеального газу,
% що складається з однієї частинки
x1=min(Es); x2=max(Es);
Nint=100; % число інтервалів гістограми
i=1:Nint;
x(i)=x1+(x2-x1)/Nint*i; h=hist(Es,x);
figure; bar(x,h); colormap white
end

```

На рис.5.8 наведені результати роботи описаної послідовності команд.

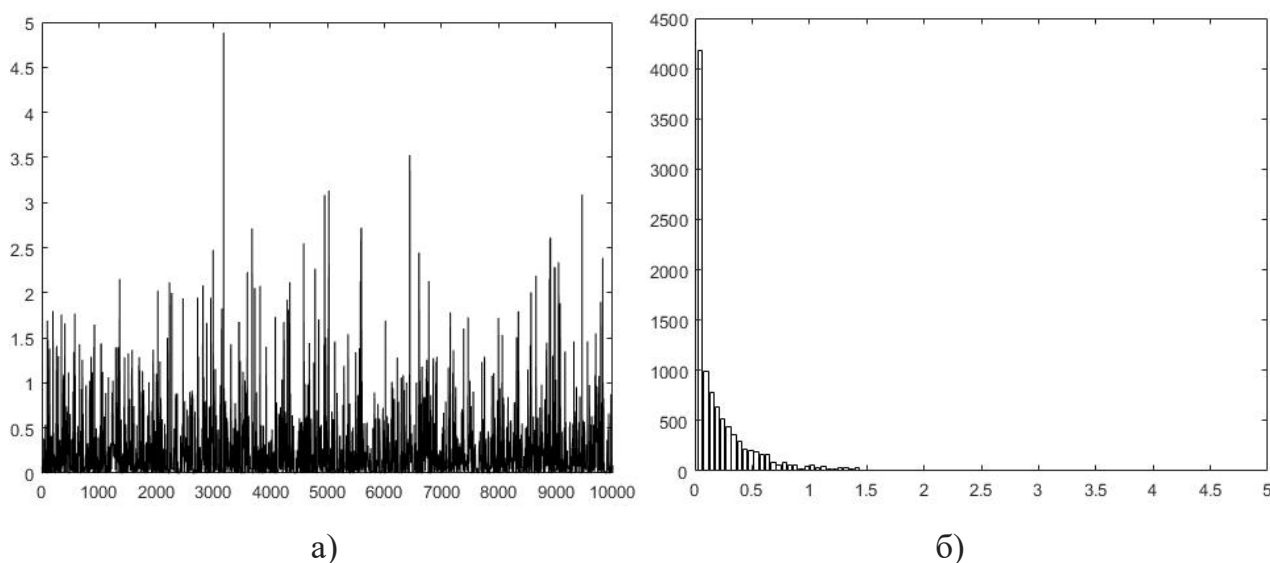


Рисунок 5.8 – Залежність миттєвих значень енергії ідеального газу, який містить одну частинку, від часу (а) та розподіл випадкової послідовності, наведеної на рис.5.8а (б)

Для моделювання одновимірного класичного ідеального газу, що містить N частинок, слід використовувати модифіковану функцію `IdealGas2.m`, яка відрізняється від функції `IdealGas.m` тим, що:

- 1) повна енергія газу обчислюється як сума кінетичних енергій всіх частинок;

2) окрім випадкового вибору величини зміни швидкості, проводиться випадковий вибір номеру тієї частинки, для якої проводиться пробна зміна швидкості.

Інші дії проводяться за алгоритмом Метрополіса.

```
function [V,Es,Accept] = IdealGas2(Vel,T,dVmax,NTrial,Np)
% Функція, що повертає миттєві значення швидкості (V), енергії (E)
% та середнє число прийняття рішення (Accept)
% Vel - початкова швидкість, T - температура газу,
% dVmax - максимальна зміна швидкості,
% NTrial - число випробувань, Np - число частинок
beta=1/T; i=1:Np; v(i)=Vel;
Eold=dot(v,v)/2; % скалярний добуток
V(1)=mean(v); % середнє значення
Es=Eold;
Accept=0;
k=2;
for i=1:NTrial
    for j=1:Np
        N=floor(Np*rand(1)+1); % випадковий вибір частинки
        dV=(2*rand(1)-1)*dVmax; % випадкова зміна швидкості
        Vtemp=v(j);
        v(j)=v(j)+dV;
        Enew=0.5*dot(v,v);
        de=Enew-Eold; % пробна зміна енергії
        if de>0
            if exp(-beta*de)>rand(1) % крок приймається
                Accept=Accept+1;
                Eold=Enew;
            else % крок не приймається
                v(j)=Vtemp;
            end
        else
            Accept=Accept+1; Eold=Enew;
        end
        V(k)=mean(v); Es(k)=Eold/Np;
        k=k+1;
    end
end
Accept=Accept/(NTrial*Np);
end
```

Далі необхідно виконати наступну послідовність команд:

```
Vel=0; % початкова швидкість частинки
```

```

T=5; % температура газу
dVmax=5; % максимальна зміна швидкості
NTrial=2000; % число випробувань
Np=80; % число частинок
% обчислення миттєвих значень швидкості (V), енергії (E)
% та середнього числа прийняття рішення (Accept)
[V Es Accept]=IdealGas2(Vel,T,dVmax,NTrial,Np);
Vmean=mean(V); % середня швидкість частинки
Esmean=mean(Es); % середня енергія частинки
i=1:size(Es,2);
% візуалізація залежності миттєвих значень енергії від часу
figure; plot(i,Es,'k');
% обчислення й візуалізація функції розподілу за енергією ідеального газу,
% що складається з N частинок
x1=min(Es); x2=max(Es);
Nint=100; % число інтервалів гістограми
i=1:Nint;
x(i)=x1+(x2-x1)/Nint*i;
h=hist(Es,x);
figure; bar(x,h); colormap white
end

```

На рис.5.9 наведені результати роботи описаної послідовності команд.

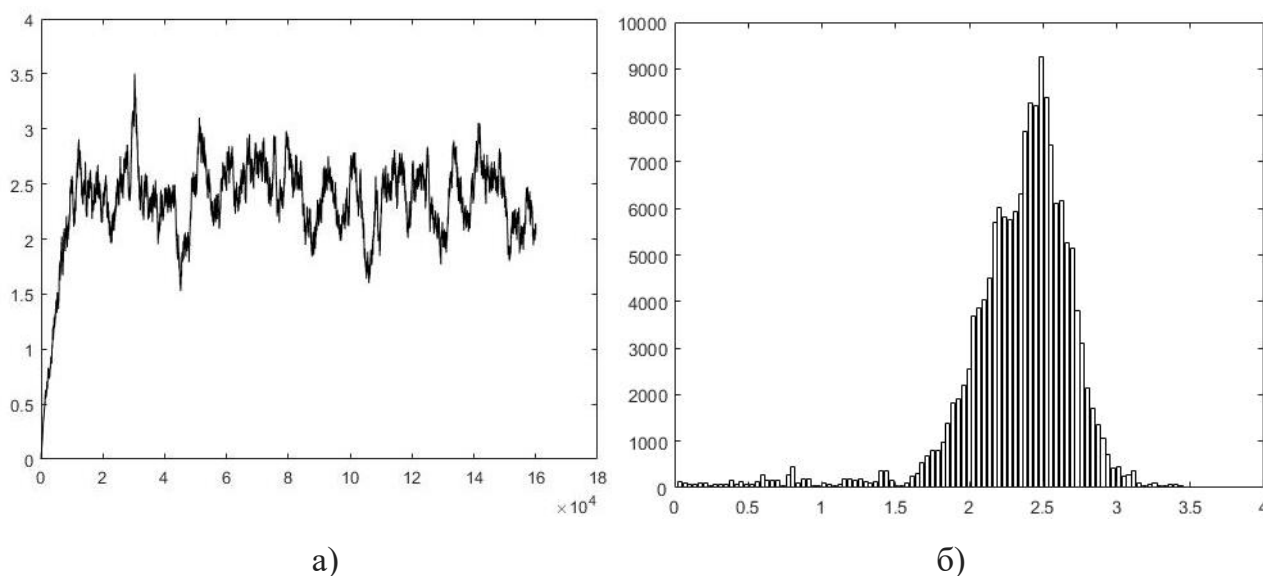


Рисунок 5.9 – Залежність миттєвої енергії від часу (а) та гістограма розподілу миттєвих значень енергії (б) для класичного ідеального газу

Аналіз залежності, наведеної на рис.5.9а, показує, що існує деякий перехідний період скінченної тривалості, протягом якого система набуває «теплової рівноваги» з

термостатом. Після досягнення рівноваги температура системи має флуктуації відносно середнього значення, що відповідає заданій температурі.

5.2.3 Моделювання двовимірної моделі Ізінга

Як відомо, цілий ряд матеріалів без домішок (наприклад, залізо, нікель) і різних сплавів за відсутності зовнішнього магнітного поля мають спонтанну намагніченість. Дані властивості проявляються тільки при температурі, нижчій за певну температуру T_C , звану критичною температурою або температурою Кюрі. При температурах $T > T_C$ спонтанна намагніченість зникає, тобто відбувається перехід з упорядкованого режиму, в якому спіни розташовані впорядковано, до хаотичного режиму, в якому орієнтація спінів є випадковою.

Згідно з сучасними уявленнями, механізм феромагнетизму має квантово-механічну природу, тому для побудови адекватної моделі досліджуваного явища необхідно використовувати математичний апарат квантової механіки. Однак виявляється, що навіть вивчення класичних двовимірних і тривимірних моделей Ізінга дає можливість виявити загальні закономірності поведінки магнітних систем поблизу фазового переходу. В той же час важливо розуміти, що класичні моделі Ізінга, яким притаманні відомі обмеження, не можуть дати повного адекватного опису феромагнетизму, що особливо помітно проявляється при температурах, близьких до абсолютного нуля.

Для дослідження моделі Ізінга необхідно визначити макроскопічні характеристики системи, що представляють інтерес з фізичної точки зору. До таких характеристик, зазвичай, відносять середню енергію системи $\langle E \rangle$, середню намагніченість $\langle M \rangle$, питому теплоємність системи при постійному об'ємі c_v та магнітну сприйнятливість. Найчастіше дослідників цікавлять рівноважні значення зазначених величин. Одна з макроскопічних характеристик системи – питома теплоємність c_v , за визначенням, дорівнює

$$c_v = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}. \quad (5.27)$$

Альтернативний метод вимірювання теплоємності c_v ґрунтований на використанні зв'язку теплоємності з флуктуаціями повної енергії в канонічному ансамблі. Для визначення співвідношення, що пов'язує питому теплоємність c_v з флуктуаціями енергії системи в канонічному ансамблі, підставимо до (5.27) вираз для середньої енергії ансамблю (5.21):

$$c_v = \frac{\partial}{\partial T} \frac{1}{Z} \sum_{s=1}^M E_s e^{-\frac{E_s}{T}}, \quad (5.28)$$

$$\text{де } Z = \sum_{s=1}^M e^{-\frac{E_s}{T}}.$$

Виконавши диференціювання в (5.28), отримаємо

$$c_v = \frac{1}{Z^2} \frac{\partial Z}{\partial T} \sum_{s=1}^M E_s e^{-\frac{E_s}{T}} - \frac{1}{Z} \cdot \frac{1}{T^2} \sum_{s=1}^M E_s^2 e^{-\frac{E_s}{T}}. \quad (5.29)$$

Враховуючи, що $\frac{\partial Z}{\partial T} = \frac{1}{T^2} \sum_{s=1}^M E_s e^{-\frac{E_s}{T}}$, з (5.29) остаточно знайдемо

$$c_v = \frac{1}{T^2} (\langle E \rangle^2 - \langle E^2 \rangle). \quad (5.30)$$

Ізотермічна магнітна сприйнятливості χ , що характеризує чутливість системи до впливу зовнішнього поля при постійній температурі, за визначенням, дорівнює

$$\chi = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial h}. \quad (5.31)$$

Дану величину, як і питому теплоємність c_v , можна пов'язати з флуктуаціями намагніченості системи. Запишемо енергію системи у вигляді

$$E_s = E_{0,s} - h M_s, \quad (5.32)$$

де $E_{0,s}$ – енергія s -го стану за відсутності магнітного поля, h – докладене зовнішнє магнітне поле, M_s – намагніченість в s -му стані.

Середня намагніченість $\langle M \rangle$, за визначенням, дорівнює

$$\langle M \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{s=1}^M M_s e^{-\frac{E_s}{T}}. \quad (5.33)$$

Продиференціювавши (5.32) по h , отримуємо

$$\frac{\partial E_s}{\partial h} = -M_s. \quad (5.34)$$

Використовуючи (5.34), маємо:
$$\frac{\partial Z}{\partial h} = \sum_{s=1}^M \frac{1}{T} M_s e^{-\frac{E_s}{T}}. \quad (5.35)$$

Отже,
$$\frac{\partial \langle M \rangle}{\partial h} = -\frac{1}{Z^2} \frac{\partial Z}{\partial h} \sum_{s=1}^M M_s e^{-\frac{E_s}{T}} - \frac{1}{Z} \cdot \frac{1}{T} \sum_{s=1}^M \frac{\partial E_s}{\partial h} M_s e^{-\frac{E_s}{T}}. \quad (5.36)$$

Підставивши до (5.36) вирази (5.34) та (5.35), отримаємо

$$\frac{\partial \langle M \rangle}{\partial h} = \frac{1}{T} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2). \quad (5.37)$$

Підставивши (5.37) до (5.31), остаточно знайдемо

$$\chi = \frac{1}{T} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2), \quad (5.38)$$

де M , $\langle M^2 \rangle$ відповідають нульовому зовнішньому полю.

Співвідношення (5.30), (5.38) є загальними співвідношеннями між функціями відгуку та рівноважними флуктуаціями.

Наступний крок після вибору цікавих нам рівноважних характеристик системи і завдання способу їх визначення полягає в реалізації алгоритму Метрополіса, який в загальному вигляді наведений у п.1.2.2. Застосовуючи алгоритм Метрополіса, можна згенерувати спінові конфігурації S з імовірністю $w(S)$, а потім усереднити шукані величини по всіх конфігураціях. Для генерації спінових конфігурацій можна, наприклад, вибрати такий пробний крок від S до S_t , при якому всі спіни одночасно змінюються випадковим чином. Однак такий пробний крок призводить до отримання конфігурації, що значно відрізняється від вихідної конфігурації S , і отже, імовірність відкинути дану конфігурацію була б великою, тому доцільніше використовувати дрібніші кроки. Для цього розглядатимемо конфігурації, що відрізняються переворотом одного спіна. При цьому спін s_{ij} , що перевертається, обирається випадковим чином. Ухвалення даного пробного кроку залежить від відношення

$$r = \frac{w(S_t)}{w(S)} = e^{-\frac{E_s}{T}} e^{\frac{E_s}{T}}. \quad (5.39)$$

Якщо $r > 1$ або якщо $r < 1$, але більше, ніж рівномірно розподілене на відріжку $[0, 1]$ випадкове число, то спін s_0 перевертається – і приймається нова конфігурація, в

іншому випадку спіні залишаються незмінними. На одному кроці Монте-Карло проводиться N спроб перевертання спіна ($N = N_{spin}$).

Для реалізації описаного алгоритму в MatLab створимо три файли:

1) файл Espin.m, який містить опис функції, що повертає енергію заданої конфігурації спінів;

2) файл InitSp.m, який містить опис функції, що повертає енергію системи, значення повного магнітного моменту, матрицю, яка містить інформацію про конфігурацію системи, у момент часу $t = 0$;

3) файл IsingKA.m, який містить опис функції, що повертає миттєві значення енергії системи, число прийняття, миттєвий магнітний момент системи, миттєві конфігурації спінів системи.

```
function z=Espin(Nspin,s,h,J)
% Функція, що повертає енергію заданої конфігурації спінів,
% Nspin - число спінів системи,
% s - матриця, що містить інформацію про розміщення спінів
% h - напруженість зовнішнього магнітного поля, J - константа обмінної взаємодії
Ns=Nspin.^0.5;    E=0;
for i=1:Ns
    for j=1:Ns % перевірка періодичних граничних умов
        if j==1
            Left=Ns;
        else
            Left=j-1;
        end
        if j==Ns
            Right=1;
        else
            Right=j+1;
        end
        if i==Ns
            Up=1;
        else
            Up=i+1;
        end
        if i==1
            Down=Ns;
        else
            Down=i-1;
        end
        E=E-s(i,j)*(h+J*(s(i,Left)+s(i,Right)+s(Down,j)+s(Up,j))); % енергія системи
```



```

end
end
z=E;
end

```

```

function [E,s,M]=InitSp(Nspin,J,h)
% Функція, що повертає: E - енергію системи,
% M - значення повного магнітного моменту,
% s - матрицю, що містить інформацію про конфігурацію системи в момент часу t=0
% Nspin - число спінів системи, J - константа обмінної взаємодії
% h - напруженість зовнішнього магнітного поля
Ns=Nspin.^0.5;    M=0;
for i=1:Ns
    for j=1:Ns
        s(i,j)=1;    M=M+s(i,j);
    end
end
E=Espin(Nspin,s,h,J);
end

```

```

function [E,Accept,M,S]=IsingKA(Nspin,J,h,NTrial,T,Sstart,Mstart,Estart)
% Функція, що повертає: E - миттєві значення енергії системи,
% Accept - число прийняття, M - миттєвий магнітний момент системи,
% S - миттєві конфігурації спінів системи, Nspin - число спінів системи,
% J - константа обмінної взаємодії, h - напруженість зовнішнього магнітного поля,
% NTrial - число випробувань, T - температура системи,
% Sstart - матриця, що містить інформацію про орієнтацію спінів у момент часу t=0
% Mstart - значення магнітного моменту системи у момент часу t=0
% Estart - енергія системи в момент часу t = 0
Ns=Nspin.^0.5; M(1)=Mstart; S=Sstart; E(1)=Estart; s=Sstart; Accept=0; k=2;
for i=1:NTrial
    for j=1:Nspin % випадковий вибір номера вузла для перекидання спіна
        lx=floor(Ns*rand(1)+1);    ly=floor(Ns*rand(1)+1);
        % перевірка періодичних граничних умов
        if lx==1
            Left=Ns;
        else
            Left=lx-1;
        end
        if lx==Ns
            Right=1;
        else
            Right=lx+1;
        end
    end
end

```

```

if ly==Ns
    Up=1;
else
    Up=ly+1;
end
if ly==1
    Down=Ns;
else
    Down=ly-1;
end
% пробний перекид спіна
Temp=s(ly,lx);    s(ly,lx)=-s(ly,lx);
de=2*s(ly,lx)*(h+J*(s(ly,Left)+s(ly,Right)+s(Down,lx)+s(Up,lx)));
if or(de<=0,rand(1)<=exp(-de./T)) % пробний перекид спіна приймається
    Accept=Accept+1;    E(k)=E(k-1)-de;    M(k)=M(k-1)+2*s(ly,lx);
else % пробний перекид спіна не приймається
    s(ly,lx)=Temp;    E(k)=E(k-1);    M(k)=M(k-1);
end
S=cat(3,S,s);    k=k+1;
end
end
Accept=Accept/(NTrial*Nspin); % середнє число прийняття
end

```

Далі необхідно виконати наступну послідовність команд:

```

Nspin=64; % число спінів системи
J=1; % константа обмінної взаємодії
h=0; % напруженість зовнішнього магнітного поля
T=1.5; % температура системи
NTrial=100; % число випробувань
% обчислення параметрів початкової конфігурації
[Estart,Sstart,Mstart]=InitSp(Nspin,J,h);
% обчислення параметрів поточних конфігурацій згідно з алгоритмом Метрополіса
[E,Accept,M,S]=IsingKA(Nspin,J,h,NTrial,T,Sstart,Mstart,Estart);
% візуалізація залежності миттєвих значень енергії та магнітного моменту системи у
часі
i=1:length(E);
figure; plot(i,E,'k'); axis([0 length(E) -300 10])
title('Залежність миттєвих значень енергії системи спінів від часу');
figure; plot(i,M,'k');
title('Залежність миттєвих значень магнітного моменту системи спінів від часу');
% візуалізація миттєвих конфігурацій системи
figure; bar3(S(:,1)); colormap white; axis([0 9 0 9 -1 1])
:

```

% виділення миттєвих значень енергії та магнітного моменту, що відповідає
% рівноважному стану системи

```
j=length(E)-2000; E1(j)=E(j+2000); M1(j)=M(j+2000);
```

% обчислення теплоємності за (5.30)

```
E2=E1.^2; c=(1/T.^2)*(mean(E2)-mean(E1).^2)/Nspin; M2=M1.^2;
```

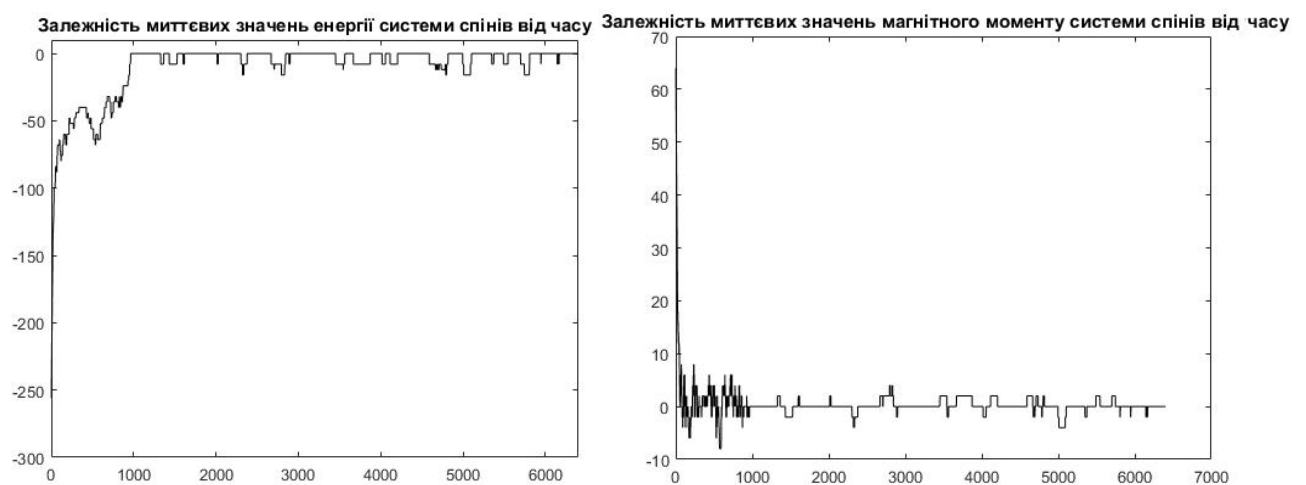
% обчислення магнітної сприйнятливості за (5.38)

```
xi=(1/T)*(mean(M2)-mean(M1).^2);
```

% обчислення намагніченості за (5.38)

```
M1mean=mean(M1)
```

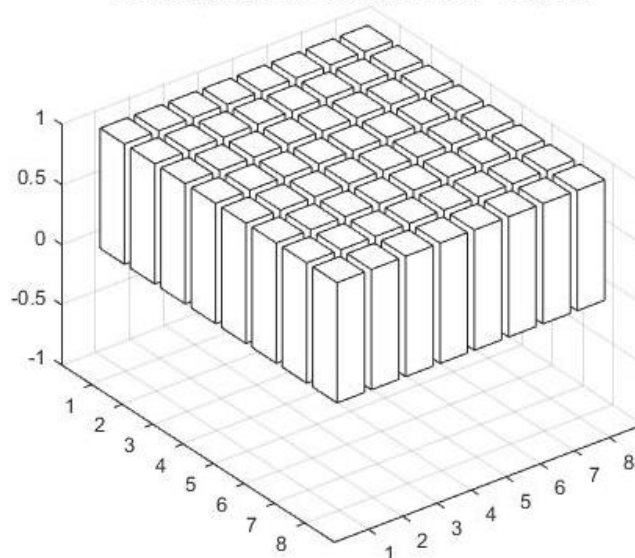
На рис.5.10 наведені результати виконання наведеної послідовності команд.



а)

б)

Конфігурація системи у момент часу $t=0$



в)

Рисунок 5.10

З виразу для повної енергії системи $E = J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - h \sum_{i=1}^N s_i$ видно, що внесок у

значення змінної r , що обчислюється за (5.39), дають лише доданки, які містять s_{ij} :

$$r = e^{-2\Delta s_{ij}(JS+h)}, \quad (5.40)$$

де Δs_{ij} – зміна s_{ij} спіна, обумовлена його перекидом, S – сума чотирьох спінів, сусідніх зі спіном, що перекидається. Оскільки S може приймати лише 5 різних значень (0, ± 2 , ± 4), при $h = 0$ існує всього 5 різних значень енергії (рис.5.11): 0, $\pm 2J$, $\pm 4J$, $\pm 8J$.

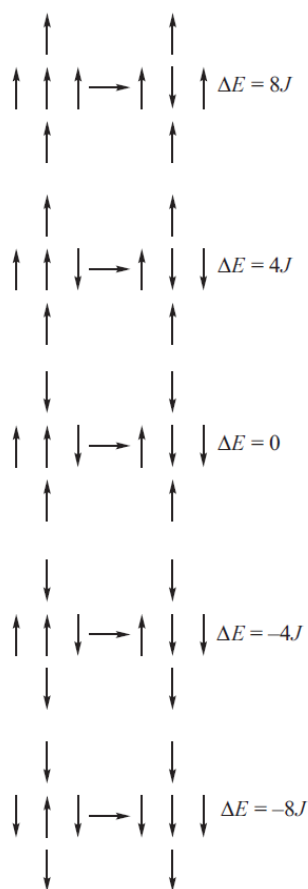


Рисунок 5.11 – Можливі зміни енергії у двовимірній моделі Ізінга при оберті одного спіна

Вище ми оцінювали рівноважні значення енергії, питомої теплоємності, магнітного моменту і намагніченості як середні значення, які обчислюють за відповідними миттєвими значеннями після досягнення системою стану рівноваги. В даному підході апріорі вважається, що кожне з миттєвих значень є статистично незалежним від інших значень, тобто «час кореляції» між вибірками дорівнює нулю. При правильнішому підході слід обчислити автокореляційні функції

$$C_E(\tau) = \frac{\langle E(t)E(t+\tau) \rangle - \langle E \rangle^2}{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}, \quad C_M(\tau) = \frac{\langle M(t)M(t+\tau) \rangle - \langle M \rangle^2}{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}, \quad \text{де } \langle \rangle - \text{усереднення}$$

по всіх можливих значеннях t ; оцінити число кроків метода Монте-Карло, за яке значення автокореляційної функції зменшується в e разів; та обчислити середнє значення енергії, питому теплоємність, середній магнітний момент, питому намагніченість, проводячи вибірку значень, віддалених один від одного не менше ніж на t_{corr} .

В границях нескінченно великою решітки ($N_{spin} \rightarrow \infty$) модель Ізінга має точний розв'язок. У граничному випадку при $h=0$ енергія системи E дається виразом

$$\frac{E}{N_{spin}} = -J \coth(2x) \left[1 + \frac{2}{\pi} \kappa' \cdot K_1(\kappa) \right], \quad (5.41)$$

$$\text{де } x = \tanh\left(\frac{J}{T}\right), \quad \kappa = 2 \frac{\sinh(2x)}{\cosh^2(2x)}, \quad \kappa' = 2 \tanh^2(2x) - 1, \quad \cosh(x) = \frac{e^x + e^{-x}}{2},$$

$$\sinh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{2}, \quad \tanh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}, \quad \coth(x) = \frac{e^x + e^{-x}}{e^x - e^{-x}};$$

$$K_1(\kappa) - \text{повний еліптичний інтеграл першого роду: } K_1(\kappa) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\phi}{\sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \phi}}.$$

Питома намагніченість при $T < T_c$ має вигляд

$$\frac{M}{N_{spin}} = \pm \frac{(1+z^2)^{\frac{1}{4}} (1-6z^2+z^4)^{\frac{1}{8}}}{(1-z^2)^{\frac{1}{2}}}, \quad (5.42)$$

$$\text{де } z = e^{-2 \tanh\left(\frac{2J}{T}\right)}.$$

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.