Докладчик:
Коротнев Вячеслав Андреевич
2 курс, ЛФИ, Б02-110

Проект по информатике

Теоретическое описание свойств парамагнетика

Основная задача: определить зависимость намагниченности системы спинов в постоянном магнитном поле от температуры через моделирование процесса

МФТИ 2022

Цели

Прикладные задачи:

- Определить теоретическую зависимость, основываясь на результатах статистической механики
- Промоделлировать систему спинов с помощью эффективных алгоритмов

Теоретическое введение

Постулаты

Если изолированная система с равной вероятностью находится в любом из доступных состояний, то она находится в состоянии равновесия.

Постулаты

Если изолированную систему нельзя обнаружить с равной вероятностью в любом из ее доступных состояний, то она не находится в равновесии. При этом она будет изменяться со временем в сторону равновесного состояния.

Постулаты

Если изолированная система находится в равновесии, то ее можно обнаружить с равной вероятностью в любом из доступных состояний.

Вероятности

Пусть Ω доступные состояния.

$$P_i = \frac{\Omega_i}{\Omega}$$

A, A' системы в равновесии с доступными состояниями $\Omega(E), \Omega'(E')$ с энергиями в диапазоне δE. * вся система.

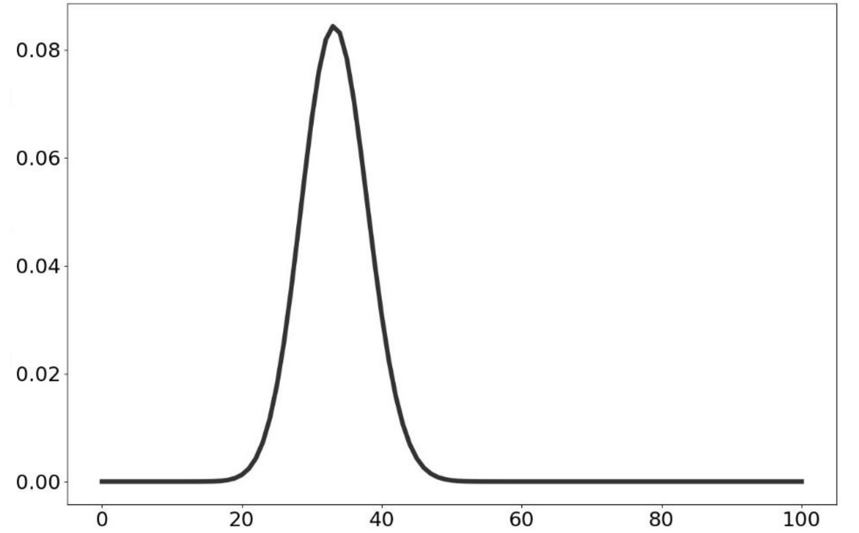
$$P(E) = \frac{\Omega^*(E)}{\Omega^*_{\text{total}}} = C\Omega^*(E)$$

Вероятности

$$\Omega'(E') = \Omega'(E^* - E)$$

$$\Omega^*(E) = \Omega(E)\Omega'(E^* - E)$$

$$P(E) = C\Omega(E)\Omega'(E^* - E)$$



Вероятности

$$\ln P(E) = \ln C + \ln \Omega(E) + \ln \Omega'(E')$$

Максимум при:

$$\beta(E) = \frac{1}{\Omega}\frac{\partial \Omega}{\partial E} \qquad \beta(E) = \beta'(E')$$

$$\boxed{\frac{1}{\beta} \equiv kT}$$

Вероятности

$$\frac{1}{\beta} \equiv kT \qquad \frac{1}{T} \equiv \frac{\partial S}{\partial E}$$

$$S = k \ln \Omega$$

Вероятности

$$\ln \Omega(E + Q) - \ln \Omega(E) = \left(\frac{\partial \ln \Omega}{\partial E}\right) Q + o(Q)$$

$$\Delta \ln \Omega = \frac{\partial \ln \Omega}{\partial E} Q = \beta Q$$

$$\Delta S = \frac{Q}{T} \sim dS = \frac{\delta Q}{T}$$

Вероятности

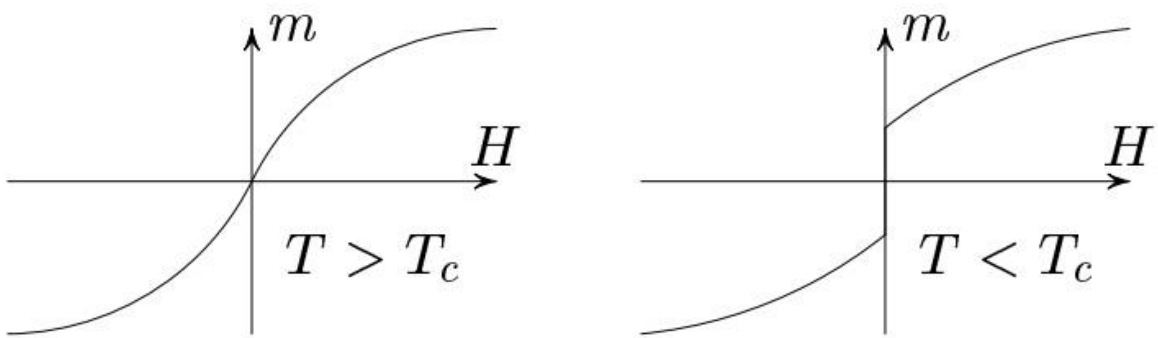
$$P \propto \Omega'(E^* - E_r)$$

$$\ln \Omega'(E^* - E_r) = \ln \Omega'(E^*) - \beta E_r$$

$$\boxed{P = C \exp -\beta E_r}$$

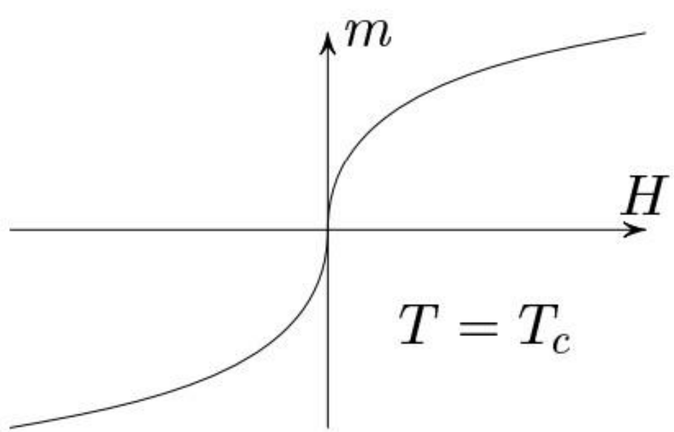
Физическая модель

Модель

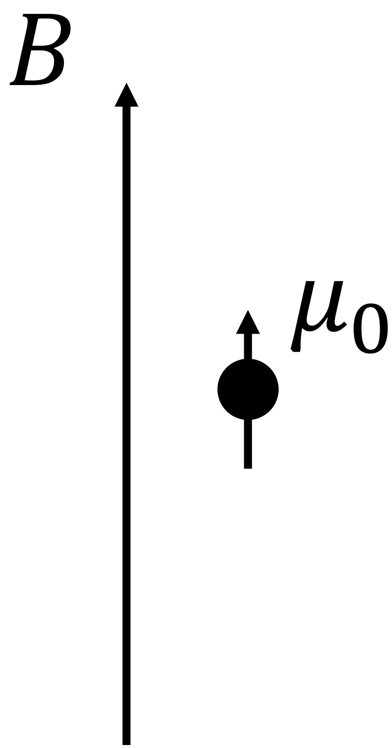


а) б)

Рис. 3.2.



Модель



1. Два состояния (вверх и вниз)
2. Взаимодействия между моментами малы

$$\varepsilon_{up} = -\mu_0 B$$

$$P_{up} = C \exp \beta \mu_0 B$$

$$P_{up} + P_{down} = 1$$

Модель

$$P_{up} + P_{down} = C(e^{\beta\mu_0 B} + e^{-\beta\mu_0 B}) = 1$$

$$\bar{\mu} = P_{up}\mu_0 - P_{down}\mu_0$$

$$\bar{\mu} = \mu_0 \frac{e^{\beta\mu_0 B} - e^{-\beta\mu_0 B}}{e^{\beta\mu_0 B} + e^{-\beta\mu_0 B}}$$

$$\boxed{\bar{\mu} = \mu_0 \tanh\frac{\mu_0 B}{kT}}$$

Модель

Модель Изинга (предложена Ленцом).

s_i спин в решетке

$$E = -E_0 \sum_{<i,j>} s_i s_j - H \sum_i s_i$$

Из общей физики известно распределение – распределение Гиббса:

$$W = C \exp - \frac{\Delta E}{kT}$$

Элементы теории вероятности

Теория вероятности

$\mu: \Omega \to \mathbb{R}$ - вероятностная мера на σ-алгебре

$X: \Omega \to \mathbb{R}, \forall \omega \in \Omega \;\; x = X(\omega)$- реализация

$F_X(x) = \mu(\{\omega \in \Omega | X(\omega) \leq x\})$ – функция распределения

$$F_X(x) = \int_{-\infty}^{x} p_X(x)dx$$

Теория вероятности

Математическое ожидание:

$$E(X) = \int_{-\infty}^{+\infty} x\, p_X(x) dx$$

Дисперсия:

$$\mathrm{Var}(X) = E(X^2) - E(X)^2$$

Теория вероятности

$X: \Omega \times T \to \mathbb{R}$ - стохастический процесс

$t_1, \dots, t_m, B_1, \dots, B_m$ - набор дискретных времен и борелевских множеств

$P(B_1, t_1, \dots, B_m, t_m) = \mu(X(t_1) \in B_1, \dots, X(t_m) \in B_m)$ - совместное распределение вероятностей

Теория вероятности

$P(B_1, t_1, \ldots, B_m, t_m) = \mu(X(t_1) \in B_1, \ldots, X(t_m) \in B_m)$ - совместное распределение вероятностей

$$P(B_1, t_1, \ldots, B_m, t_m) = \int_{B_m} \ldots \int_{B_1} p_m(x_m, t_m, \ldots, x_1, t_1) dx_m \ldots dx_1$$

- плотность совместных вероятностей.

$$p_{l|k}(x_{k+l}, t_{k+l}, \ldots, x_{k+1}, t_{k+1}) = \frac{p_{l+k}(x_{k+l}, t_{k+l}, \ldots, x_1, t_1)}{p_k(x_k, t_k, \ldots, x_1, t_1)}$$

Теория вероятности

$$\mu(X(t) \in B | X(t_m) = x_m, \dots, X(t_1) = x_1)$$
$$= \mu(X(t) \in B | X(t_m) = x_m)$$

- условие Марковского процесса.

$$p_{1|m}(x, t | x_m, t_m, \dots, x_1, t_1) = p_{1|1}(x, t | x_m, t_m)$$

$$T(x, t | x', t') = p_{1|1}(x, t | x', t')$$

- Условная вероятность перехода.

Теория вероятности

$$\int T(x,t|x',t')dx = 1$$

$$T(x_3,t_3|x_1,t_1) = \int T(x_3,t_3|x_2,t_2)T(x_2,t_2|x_1,t_1)dx$$

$$T_{\tau+\tau'}(x|x') = \int T_\tau(x|x'')\, T_{\tau'}(x''|x')dx$$

- Уравнение Чепмена-Колмогорова.

Теория вероятности

Эргодическая теорема (для дискретных случаев)

$$p_{ij}^{(k+l)} = \sum_{\alpha} p_{\alpha j}^{(l)}\, p_{i\alpha}^{(k)}$$

$$P^{(k+l)} = P^{(k)} P^{(l)}$$

$$\Pi^{(k)} = \Pi\, P^{(k)}$$

Π строка начальных вероятностей.
P матрица переходных вероятностей.

Теория вероятности

Эргодическая теорема (для дискретных случаев)

Если $\exists n_0 > 1 \min\limits_{i,j} p_{ij}^{(n_0)} > 0$, то найдутся такие

$\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_N$, что:

$$\pi_j > 0 \qquad\qquad \sum_j \pi_j = 1$$

$p_{ij}^{(n)} \to \pi_j$ при $n \to \infty$

Алгоритм Метрополиса

Алгоритм Метрополиса

Моделирование физической системы.

Предполагается, что система эргодична и существует стационарное состояние.

Система должна стремиться к состоянию с наименьшей энергией.

Алгоритм Метрополиса

Термодинамическое равновесие (детальный баланс):

$W(x|x')p(x') = W(x'|x)p(x)$

Вероятность перехода из x в y равно вероятности перехода из y в x.

$W(x|x') = g(x'|x)A(x',x)$

$g(x'|x)$ выбирается произвольно

Алгоритм Метрополиса

Модель Изинга (предложена Ленцом).

s_i спин в решетке

$$E = -E_0 \sum_{<i,j>} s_i s_j - H \sum_i s_i$$

Из общей физики известно распределение – распределение Гиббса:

$$W = C \exp - \frac{\Delta E}{kT}$$

Алгоритм Метрополиса

1. Сгенерируем произвольное распределение спинов.
2. Меняем положение произвольного спина и считаем изменение энергии системы.
3. Генерируем случайное число от 0 до 1. Если оно меньше $\exp -\frac{\Delta E}{kT}$, то сохраняем конфигурацию.
4. Повторяем шаги до стационарного состояния.

Команда разработчиков

Коротнев Вячеслав – тимлид, разработчик

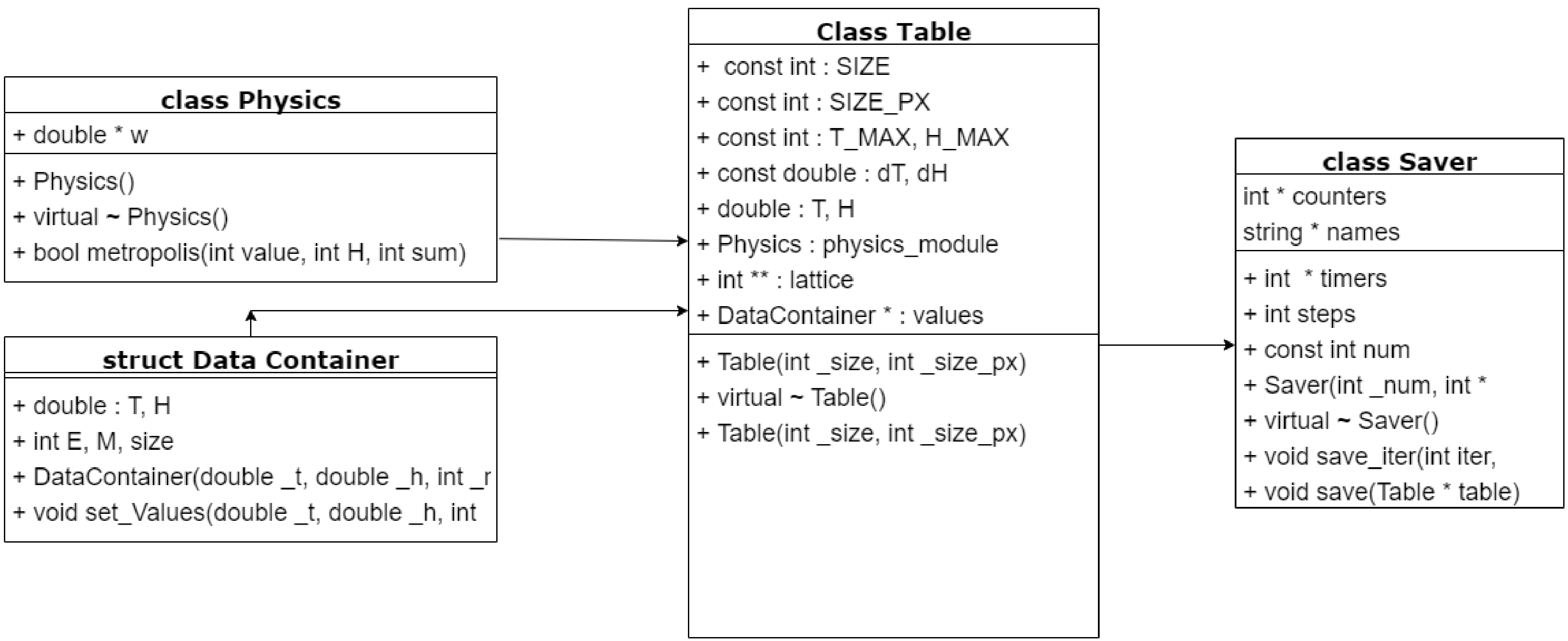
1. Формировал вектор развития проекта и основные задачи
2. Построил логику построения программного обеспечения
3. Принял непосредственное участие в реализации задачи

Команда разработчиков

Дмитрий Хватов – разработчик

1. Отстранен от проекта за неисполнение обязательств

Структура кода



Выводы

Проделанная работа:

- Вывод распределения Гиббса
- Расчет намагниченности одного спина
- Изучение начал теории вероятности
- Обоснование алгоритма Метрополиса
- Программная реализация алгоритма

Литература

- Курс лекций по термодинамике, Овчинкин В.А., МФТИ
- Курс лекций по термодинамике, Александров Д.А., МФТИ
- Курс лекций по физической кинетике, Щелкачев Н.М., МФТИ
- Кельберт М., Сухов Ю. Вероятность и статистика в примерах и задачах. Том 1. Основные понятия теории вероятностей и математической статистики. – Litres, 2017.
- Бройер Х. П., Петруччионе Ф. Теория открытых квантовых систем. – 2010.
- Рейф Ф. Статистическая физика. – Наука, 1972.
- Ширяев А. Н. Вероятность-1. – МЦНМО, 2021.