

9. شبیه سازی آنسامل کانونی³⁵ NVT

اکنون به جایی رسیده ایم که میتوانیم به موضوع اصلی کتاب که شبیه سازی سیستم های آماری بپردازیم. از دید مکانیک آماری، مشاهده پذیرهای فیزیک را میتوان با متوسط گیری آنسامبلی³⁶ بدست آورد. احتمال حضور سیستمی که در تعادل ترمودینامیکی با یک منبع گرمایی به دمای T است در یکی از ریز حالت³⁷ های آن با تابع احتمال بولتزمن³⁸ داده میشود. فرض کنید نقطه‌ی در فضای فاز این سیستم را با \vec{x} نشان دهیم. در این صورت برداری با بعد فضای فاز است. به طور مثال اگر سیستم ما یک گاز ایده آل با N ذره باشد، این فضا $6N$ مولفه دارد. 3 درجه آزادی برای مکان و سه درجه آزادی برای سرعت هر یک از ذرات گاز. در این صورت کمیت فیزیکی $A(\vec{x})$ تابعی از مختصات سیستم در فضای فاز است. اندازه گیری این کمیت در زبان مکانیک آماری معادل با متوسط گیری از آن بر روی تابع توزیع کانونیک است.

$$\langle A \rangle = \frac{\int_{\Omega} A(\vec{x}) e^{-\beta E(\vec{x})} dv}{\int_{\Omega} e^{-\beta E(\vec{x})} dv}$$

که در اینجا $\beta = 1/k_B T$ است که در آن $k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ m}^2 \text{ kg s}^{-2} \text{ K}^{-1}$ ، ثابت بولتزمن است. انتگرال بر روی تمام فضای فاز سیستم، Ω ، است. عبارت مخرج تابع پارش³⁹ سیستم یا در واقع ضریب یکه سازی تابع توزیع بولتزمن است. به این شکل میتوان شکل یکه‌ی تابع توزیع بولتزمن را به صورت زیر معرفی کرد:

$$p(\vec{x}) = \frac{e^{-\beta E(\vec{x})}}{\int_{\Omega} e^{-\beta E(\vec{x})} dv}$$

به این ترتیب متوسط گیری بالا به شکل آشنای

$$\langle A \rangle = \int_{\Omega} A(\vec{x}) p(\vec{x}) dv$$

³⁵ Canonical ensemble

³⁶ Ensemble averaging

³⁷ Micro state

³⁸ Boltzmann

³⁹ Partition Function

در میاید. در نتیجه اگر بتوانیم فضای فاز را با تابع توزیع $p(\vec{x})$ نمونه برداری کنیم، اندازه گیری کمیت A به سادگی با متوسط گیری بر روی آن بدست میاید. اما این کاری است که اکنون میدانم که چگونه انجام دهیم. با استفاده از روش متروپولیس ما قادریم در فضای فاز به گونه ای گشت و گذر کنیم که احتمال حضور در هر نقطه ای با وزن تابع بولتزمن متناسب باشد.

با توجه به بحثی که داشتیم باید برای اینکه دینامیک مونت کارلو به ما اجازه دهد که در زمان قابل دسترس به تابع توزیع تعادلی بولتزمن برسیم، باید قدمهایی با طولهای کوتاه برای رفتن به همسایگی ها برداریم.

9.3. استفاده از الگوریتم متروپولیس برای نمونه برداری از آنسامبل کانونی

همانطور که دیدیم برای بدست آوردن هر کمیت مشاهده پذیر فیزیکی در یک آنسامبل کانونی کافی است که این آنسامبل را به کمک تابع توزیع بولتزمن بسازیم و از آن نمونه برداری کنیم. اولین نکته ای که باید در ذهن نگه دارید این است که در شبیه سازی های متروپولیس، منظور شبیه سازی دینامیک سیستم نیست. یعنی قدم هایی که برداشته میشود هیچ ربطی به معادلات حرکت که دینامیک سیستم را تعیین میکند ندارد. این قدمها فقط برای جابجا شدن در فضای فاز به منظور نمونه برداری از آن است. در نتیجه این قدمها نه تنها رابطه دینامیکی با هم ندارند بلکه امید ما این است که هیچ گونه همبستگی نداشته باشند تا مولد کاتوره ای ما برای نمونه برداری قابل باشد.

در این گونه شبیه سازیها تعداد ذرات سیستم، N ، حجم سیستم، V ، و دمای آن، T ، ثابت است. برای همین به آن شبیه سازی در آنسامبل NVT گفته میشود. این ساده ترین آنسامبلی است که میتوان با روش متروپولیس شبیه سازی کرد. شبیه سازی آنسامبل های دیگر نیز امکان پذیر است ولی برای دیگر آنسامبل ها نیاز به تمهیداتی است که کمیت های مورد نظر را در طی شبیه سازی ثابت نگه دارد. به طور مثال در آینده به شبیه سازی آنسامبل میکرو کانونی⁴⁰، NVE، خواهیم پرداخت و نشان میدهم که برای ثابت نگه داشتن انرژی باید چه تغییراتی در الگوریتم داد.

مشابه الگوریتم یک بعدی، در اینجا نیز باید یک گشت را تولید کرد. البته این بار گشت ما در فضای حقیقی نیست و در فضای فاز است. در هر نقطه از این فضا، مقدار تمام متغیر های مربوط مسئله مشخص است و در نتیجه میتوانیم هر اندازه پذیر را نیز نمونه برداری کرد. در نتیجه میتوانیم الگوریتم را به شکل زیر باز نویسی کنیم.

⁴⁰ Microcanonical ensemble

آلگوریتم متروپولیس برای آنسامبل NVT:

1. $\vec{x} = \vec{x}_0$
"یک آرایش ابتدایی برای سیستم پیش نهاد میکنیم."
2. $\vec{y} = \vec{x} + \vec{R}$
 \vec{R} برداری کاتوره ای با حد اکثر طول برابر با طول قدم است.
3. If $Rand(0,1) < p(\vec{y})/p(\vec{x})$ Then accept
"در صورتی که شرط متروپولیس بر آورده شود قدم قبول میشود"
4. Loop (2) + (3)
"قدم های اصلی باید در یک حلقه قرار داده شوند"

همانطور که در قدم سوم در بالا مشاهده می کنید، برای پذیرش یا عدم پذیرش ما به نسبت تابع توزیع

احتمال نیاز داریم. این به این معنی است که مقدار تابع پارش که در مخرج تابع توزیع در معاله ی؟؟ ظاهر شد

عنصر مهمی در شبیه سازی ما نیست و به آن نیازی نیست. این نکته به شدت اهمیت دارد. برای مشخص شدن

اهمیت آن توجه به این نکته ضروری است که منظور نهایی در مکانیک آماری مانند هر جای دیگر در فیزیک اندازه

گیری است. یعنی ابزار مکانیک آماری برای محاسبه مقادیر کمیت های مشاهده پذیر فیزیکی به کار میرود که در

دیدگاه مکانیک آماری معادل با متوسط گیری از کمیت بر روی آنسامبل متناظر با مسئله است. از مکانیک آماری

میدانیم که با دانستن تابع پارش ما قادریم که دیگر کمیت های فیزیکی را نیز به دست آوریم. به طور مثال متوسط

انرژی با مشتق گیری از تابع پارش نسبت به β بدست می آید. برای همین در شکل تحلیلی مکانیک آماری حل یک

مسئله فیزیکی معادل با محاسبه ی تابع پارش آن است. مسایل زیادی وجود دارند که ما میتوانیم تابع پارش انها را

محاسبه کنیم، ولی از طرف دیگر تعداد مسایلی که برای آن ها حل دقیق نداریم نیز کم نیستند.

در روش متروپولیس ما تابع پارش را محاسبه نمیکنیم. در حقیقت نیازی به محاسبه ی آن نداریم. آن چیزی که

نیاز مندیم نمونه هایی با تابع توزیع بولتزمن است، و برای بدست آوردن آنها نیز فقط به نسبت آنها نیاز است،

$$\frac{p(\vec{y})}{p(\vec{x})} = \frac{e^{-\beta E(\vec{x})}}{e^{-\beta E(\vec{y})}}$$

و در این محاسبه نیز فقط باید بتوانیم انرژی سیستم را در هر نقطه فضای فاز محاسبه کنیم. از آنجا که برای هر مسئله

در فیزیک اولین داده ی ما و در واقع آن چیزی که سیستم با آن مشخص میشود، هامیلتونی سیستم است، پس ما مطمئناً انرژی

را میتوانیم بدست آوریم. در نتیجه در روش شبیه سازی متروپولیس هیچ مسئله غیر قابل حلی وجود ندارد. این مزیت مهم

این ابزار نسبت به روشهای تحلیلی است. ولی فراموش نکنیم که خود انتگرال تابع پارش را نمیتوانیم محاسبه کنیم. برای محاسبه

این انتگرال اگر از روش نمونه برداری ساده استفاده کنیم به دلیل بزرگ بودن فضای تابع و ابعاد مسئله به جواب خوبی نمیرسیم.

اگر از روش نمونه بردای هوشمند نیز بخواهیم استفاده کنیم باید تابع توزیع را بیکه کنیم که در نتیجه به جواب بدیهی $1 = 1$

میرسیم.

9.4. قدم زمانی مونت کارلو

در گذشته دیدیم که بهتر است قدمهای مونت کارلو را در همسایگی نقطه فعلی برداریم. یعنی در هر تلاش برای جابجایی به

سیستم اجازه دهیم که نقطه ای در همسایگی نقطه ای که اکنون ایستاده است را امتحان کند. برای سیستم آماری ما که تعداد متغیر

های سیستم و در نتیجه بُعد فضای فاز بسیار زیاد است، میتوان همسایگی را با تغییر فقط یکی از متغیر ها در حالی که بقیه ثابت اند

تعریف کنیم. این که کدام یک از متغیر ها شانس تغیر را دارد را میتوانیم به طور تصادفی تعیین کنیم. در این صورت یک قدم زمانی

مونت کارلو برابر با تعداد تلاش هایی است که به هر یک از متغیر های مسئله به طور متوسط حد اقل یک بار شانس برای تغییر

داده شده باشد. توجه کنید که این قدم زمانی هیچ ربطی به زمان واقعی ندارد. دوباره یاد آوری میکنیم که در مونت کارلو ما

دینامیک را شبیه سازی نمیکنیم و فقط در تلاشیم از یک سیستم در تعادل ترمودینامیکی با یک حمام گرمایی نمونه برداری صحیح

کنیم تا بتوانیم کمیت های فیزیکی مربوط را به درستی متوسط بگیریم. در نتیجه یک واحد زمان مونت کارلو فقط تعداد عملیات محاسباتی را تعیین میکند.

9.5. اصل ارگادیک و قدم های مونت کارلو

مطابق با اصل ارگادیک که بنیادی ترین اصل مکانیک آماری است، سیستم در زمان محدود از همسایگی هر نقطه ای در فضای فاز میگذرد. به زبان ساده تر، تمام نقاط فضای فاز برای سیستم قابل دسترس اند. پس ما باید دقت کنیم که قدم هایی که برای تلاش های مونت کارلو تعریف میکنیم این اصل را نقض نکنند. یعنی این قدمها به سیستم اجازه بدهند که در طی شبیه سازی احتمال حضور در نقاط مختلف فضای فاز غیر صفر باشد.

9.6. محاسبه ی تغییر انرژی به جای انرژی

مطابق با رابطه ؟؟ ما برای تعیین احتمال قبول در هر تلاش باید دو مقدار انرژی را داشته باشیم، انرژی سیستم در حال حاضر و در جابجایی فرضی. از این دو انرژی نیازی به محاسبه ی انرژی سیستم در حال حاضر نداریم زیرا آنرا قبلا محاسبه کرده ایم. ولی باید انرژی سیستم را در نقطه جدید محاسبه کنیم. اگر فرض کنیم که تابع انرژی پتانسیل فقط شامل جملات انرژی جفت ذرات باشد برای بدست آوردن انرژی باید N^2 محاسبه انجام شود. ولی اگر رابطه ؟؟ را به صورت

$$\frac{p(\vec{y})}{p(\vec{x})} = \frac{e^{-\beta E(\vec{y})}}{e^{-\beta E(\vec{x})}} = e^{-\beta \Delta E}$$

بنویسیم که در آن $\Delta E = E(\vec{y}) - E(\vec{x})$ ، اختلاف انرژی به ازای جابجایی احتمالی سیستم است. از آنجا که ما فقط یک درجه ی آزادی سیستم را تغییر میدهیم و بقیه درجات آزادی تغییر نمیکند محاسبه ی ΔE از مرتبه N است. این تغییر کوچک در الگوریتم مرتبه الگوریتم را یک واحد کاهش میدهد که بسیار مهم است. بدیهی است که برای بدست آوردن انرژی کل سیستم نیز از این محاسبه میتوان کمک گرفت. یعنی کافیهست که انرژی حالت قبل با ΔE جمع شود.

نکته 1:

در خیلی از مسایل محاسبه ΔE کمی پیچیده است. در این گونه مسایل توصیه میشود که در مراحل دیباگ کردن کد انرژی را از هر دو روش محاسبه کنید و در هر قدم با هم مقایسه کنید و در صورت مشاهده اختلاف پیام خطا بدهید. در صورت عدم بروز مشکل برای اجرای اصلی محاسبه ی انرژی کل را خاموش کنید.

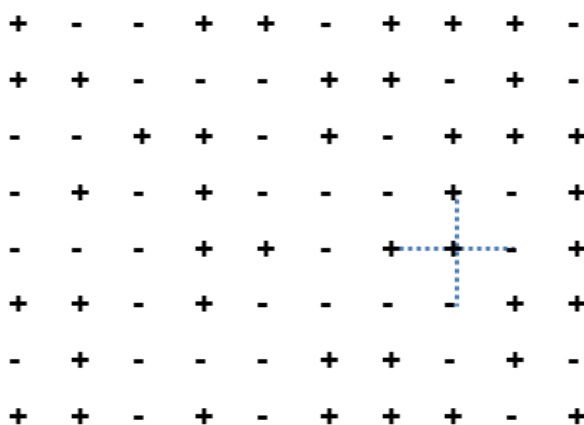
در فصل های بعدی با مثال هایی آشنا میشویم که شبیه سازی مونت کارلو میتواند برای حل مسایل کمک کند.

بیشتر بدانیم:

به بیشتر بدانیم بخش قبل مراجعه شود.

10. مدل آیزینگ⁴¹

یکی از مدل‌های بسیار پر کاربرد و مهم در مکانیک آماری مدل آیزینگ است. این مدل که اولین بار برای مدل سازی سیستم‌ها مغناطیسی پیشنهاد شد برای بسیاری از مسایل دیگر نیز کاربر یافته است. نکته ی مهم این است که این مدل به خوبی میتواند رفتار بحرانی و تغییر فاز پیوسته را نشان دهد. در این مدل فرض میشود که بروی رئوس یک شبکه دو قطبی های مغناطیسی نشسته اند. این دو قطبی ها هم با میدان خارجی و هم دو قطبی های دیگر برهمکنش دارند. فرض میشود که برهمکنش با دیگر دو قطبی ها کوتاه برد است و در ساده ترین تقریب فرض میشود که هر دو قطبی فقط با همسایه ها اولش برهمکنش دارد. این مدل از این هم ساده تر است و فرض میکند که هر دو قطبی فقط میتواند دو مقدار +1 و -1 را داشته باشد. برای همین معمولا این دو قطبی ها را اسپین مینامند. در نتیجه یک نمونه از این سیستم آرایشی از این اسپین ها با مقادیر +1 و -1 است.



شکل 22 نمایی شماتیک از یک مدل دوبعدی آیزینگ با آرایشی از اسپین ها. هر اسپین فقط با همسایگان نزدیکش بر همکنش دارد.

در نتیجه اگر سیستم ما N اسپین داشته باشد، فضای فاز ما یک فضای گسسته ی N بعدی است که هر نقطه ی آن با یک بردار N مولفه ای، $\vec{s} = \{s_1, s_2, \dots, s_i, \dots, s_N\}$ ، داده میشود که مولفه های آن فقط میتواند مقادیر +1 یا -1 را بگیرد. اگر این بردار

⁴¹ Ising model

را با یک بردار 3 بعدی مقایسه کنیم، میتوانیم بگوییم که هر نقطه ی این فضا در یکی از رئوس یک مکعب N بعدی نشسته اند. در نتیجه ما با مسئله ای مواجه هستیم که فضای فاز آن گسسته است.

انرژی (یا هامیلتونی) این سیستم به شکل

$$E(\vec{s}) = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i$$

داده میشود. در این رابطه J مقیاس انرژی برهمکنش و مقداری مثبت است و $\langle ij \rangle$ به معنی جمع بر روی تمام همسایه های اول است. عبارت دوم برهمکنش میان دوقطبی ها با میدان خارجی h را نشان میدهد. در ادامه این بحث بدون آنکه از کلیت بحث کاسته شود فرض میکنیم که $h = 0$ ، و فقط عبارت اول را در نظر میگیریم.

10.3. شکست تقارن در مدل آیزینگ

در ابتدا قبل از شروع بحث شبیه سازی این مدل، اجازه بدهید کمی بیشتر با این مدل آشنا شویم. ضریب منفی پشت جمع در عبارت انرژی نشان میدهد که اسپین های هم جوار ترجیح میدهند که در حالت های هم سان باشند. به این معنی که هر دو مثبت یا منفی باشند. در نتیجه به راحتی میتوان حدس زد که آرایش کمینه ی انرژی برای این سیستم، آرایشی است که تمام اسپین ها مثبت یا منفی باشد. زیرا هر اختلاف علامتی در همسایه ها باعث افزایش انرژی سیستم میشود. ولی با وجود این که این آرایش کمینه ی انرژی است ولی کمینه ی انرژی آزاد⁴² (F) سیستم نیست. برای روشن شدن این نکته آرایشی را در نظر بگیرید که همه ی اسپین ها به غیر یکی مثبت هستند. هر چند این ساختار به اندازه $2J$ انرژی بیشتری نسبت به آرایش کمینه انرژی دارد، ولی به دلیل اینکه این تک اسپین مخالف میتواند هر کدام از N اسپین موجود در سیستم باشد، آنتروپی⁴³ (S) این سیستم بیشتر است.

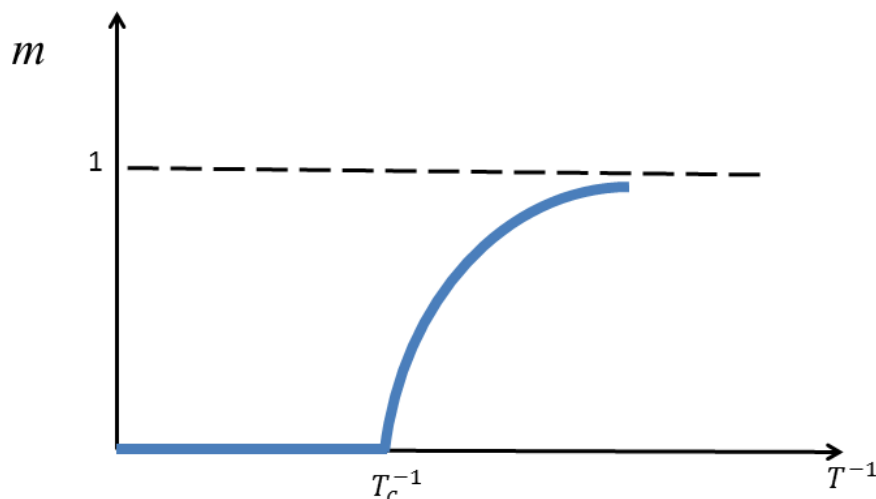
اگر مثال بالا را ادامه دهیم میتوان نشان داد که بیشترین آنتروپی برای حالتی است که نیمی از اسپین ها مثبت و نیمی منفی است. به این شکل میتوان حدس زد که در دماهای بالا به دلیل اهمیت دما (T) در انرژی آزاد

$$F = E - TS$$

⁴² Free energy

⁴³ Entropy

کمینه انرژی آزاد برای آرایش ها با آنتروپی بالا اتفاق میفتد و در نتیجه جمع مغناطش سیستم صفر میشود. به این ترتیب این سیستم در دماهای بالا فاقد مغناطش ذاتی است. اما با کاهش دما سهم عبارت دوم در انرژی آزاد کم میشود و کمینه ی انرژی آزاد و انرژی یکی میشوند و سیستم ترجیح میدهد در آرایشی قرار گیرد که اسپین ها هم جهت باشند و در نتیجه سیستم دارای مغناطش غیر صفر است. نکته ی جالب این مدل این است که به خوبی رفتاری مشابه تغییر فاز سیستم های مغناطیسی از فاز پار مغناطیس به فاز فرومغناطیس نشان میدهد.



شکل 23 تغییرات مغناطش بر حسب دما در مدل آیزینگ تغییر فازی از پارامغناطیس (مغناطش ذاتی صفر) به فرو مغناطیس نشان میدهد

کمیت مغناطش را که در این سیستم میتواند معیاری از نظم سیستم باشد به کمیت نظم⁴⁴ معروف است. تغییر فاز در کمیت نظم از مقدار غیر صفر به صفر در دمایی اتفاق می افتد که آنرا دمای بحرانی سیستم، T_c ، مینامیم. برای دماهای بالاتر از این مقدار بحرانی تقارن مثبت – منفی بر سیستم حاکم است ولی در دماهای پایین سیستم باید یکی از دو حالت ممکن همه مثبت یا همه منفی را انتخاب کند. برای همین این مدل به خوبی یکی از مهم ترین پدیده های فیزیک آماری (و ماده ی چگال) یعنی شکست خود به خود تقارن⁴⁵ را از خود نشان میدهد و از این نظر شبیه سازی آن نه تنها برای ما از نظر محاسباتی ارزش آموزشی دارد، برای درک بهتر فرایند شکست خود به خود تقارن نیز بسیار مفید است.

⁴⁴ Order parameter

⁴⁵ Spontaneous symmetry breaking

یکی از خواص مهم سیستم هایی که رفتار بحرانی نشان می دهند این است که نه تنها کمیت نظم در نقطه ی بحرانی تغییراتی غیر عادی نشان می دهد، بلکه در رفتار دیگر مشاهده پذیر های ترمودینامیک و یا مشتقات آنها نیز میتوان ناپیوستگی یا تکینگی را مشاهده کرد. در مورد مدل آیزینگ نیز به این گونه است و در نقطه بحرانی دو کمیت ظرفیت گرمایی ویژه، C_v ، و پذیرفتاری مغناطیسی، χ ، سیستم در دمای بحرانی دارای تکینگی هستند.

از مکانیک آماری میدانیم که دلیل اصلی این تکینگی ها به بینهایت شدن طول همبستگی، ξ ، در این سیستم ها در نقطه بحرانی است. این خاصیت را در مورد مدل تراوش در بخش های قبلی مشاهده کردیم. طول همبستگی در مدل آیزینگ را کمی جلوتر به شکل ریاض تعریف خواهیم کرد. در اینجا همان بس که بدانیم این طول معیاری از همبستگی مکانی اسپین ها را می دهد. به دلیل نامحدود شدن طول همبستگی در دمای بحرانی سیستم بدون مقیاس میشود و تمام کمیت های فیزیک در این نقطه باید رفتاری آزاد-مقیاس⁴⁶ یا توانی داشته باشند. به این ترتیب برای رفتار سیستم در نزدیکی نقطه ی بحرانی، توان های بحرانی زیر معرفی میشوند.

$$m \sim (T_c - T)^\beta$$

$$\chi \sim |T_c - T|^{-\gamma}$$

$$C_v \sim |T_c - T|^{-\alpha}$$

$$\xi \sim |T_c - T|^{-\nu}$$

مدل آیزینگ در بُعد یک و دو دارای حل دقیق است. این مدل در یک بُعد رفتار بحرانی در دمای محدود نشان نمیدهد. ولی در بُعد 2 به خوبی تغییر فاز را نشان میدهد. در بُعد 3 حل دقیق ندارد و تمام اطلاعات ما از این مدل در این بعد از شبیه سازی های کامپیوتری بدست می آید و یا روشهای تقریبی که کیفیت تقریب نیز از مقایسه با نتایج شبیه سازی ها می آید. حل یک بعدی بسیار ساده و بدیهی است، حل دو بعدی بسیار تکنیکی و پیچیده ولی ممکن است، و حل سه بعدی وجود ندارد. اگر به این نکته توجه کنیم که در سوی دیگر شبیه سازی این مدل در ابعاد متفاوت خیلی شبیه به هم است و تنها زمان شبیه سازی برای بدست آورد پاسخی دقیق با بعد رشد میکند، به اهمیت شبیه سازی پی میبریم.

⁴⁶ Scale free

10.4. شبیه سازی مدل آیزینگ با استفاده از الگوریتم متروپولیس

در اینجا می‌خواهیم الگوریتم متروپولیس را که در فصل قبل معرفی کردیم، برای مدل گسسته ی آیزینگ بکار ببریم. همانطور که قبلاً اشاره شد هر آرایش سیستم در فضای فاز با برداری N بعدی که مولفه های آن می‌توانند $+1$ یا -1 باشند.

10.4.1. شرایط اولیه

بهتر است که برای شروع کار با یک آرایشی شروع کنیم که خیلی خاص نباشد. برای همین پیشنهاد می‌کنیم که برای شروع شبیه سازی بعد از مشخص کردن اندازه های شبکه یک آرایش کاملاً تصادفی برای شروع کار در نظر بگیریم. در یک شبیه سازی دو بُعدی کافی است آرایه ای دو بعدی متناظر با اندازه های شبکه در نظر بگیریم که با مقادیر کاتوره ای $+1$ و -1 مقدار دهی اولیه میشوند.

نکته 1:

بهتر است که برای ساختار دادن به کُد خود برنامه را به شکل بسته ای بنویسیم. برای این کار بهتر است که تابعی با نام `init()` معرفی کنید و تمام امور مربوط به شرایط اولیه را در آن قرار دهیم. در آینده در صورت نیاز به کمیتی که باید در ابتدا معرفی شود یا مقدار اولیه داشته باشد، آن را در داخل این تابع قرار می‌دهیم. در حال حاضر کمیت هایی که باید معرفی شوند اضافه بر اندازه های شبکه، L ، و مقادیر اولیه اسپین ها، دما و ضریب انرژی J است.

10.4.2. قدم مونت کارلو برای مدل آیزینگ

برای ادامه کار باید قسمت اصلی شبیه سازی که حلقه ی مرکزی متروپولیس است را ایجاد کنیم. این حلقه با انتخاب یک آرایش در همسایگی نقطه ی فعلی برای تلاش در جابجایی در فضای فاز شروع میشود. در اینجا به دلیل گسسته بودن فضای فاز دست ما برای انتخاب طول قدم برای جابجایی باز نیست. بهتر است که کوتاه ترین قدم را در نظر بگیریم. کوتاه ترین قدم معادل است با تغییر یکی از اسپین ها. یعنی کافی است که یکی از اسپین ها به طور کتره ای انتخاب شود و در یک منفی ضرب شود. البته این کار نباید تا امتحان شرط متروپولیس و قبول تلاش نهایی شود.

10.4.3. محاسبه ی انرژی

برای انجام شبیه سازی متروپولیس محاسبه ی انرژی یکی از کارهایی که حتما باید انجام داد. برای همین توصیه میشود که این محاسبه نیز در تابعی به نام $\text{energy}()$ انجام گیرد. برای تحقیق شرط متروپولیس در هر تلاش باید انرژی حالت فعلی با انرژی حالت مورد بررسی مقایسه شود. همانطور که در قبل اشاره شد به دلیل محدود بودن قدمهای تلاش، محاسبه ی تغییر در انرژی به ازای قدمی که قرار است برداشته شود هزینه ی کمتری دارد. در مورد مدل آیزینگ محاسبه ی انرژی نیاز به $2N$ محاسبه، به ازای تمام رابط های بین اسپینی، دارد. در صورتی که تغییر در علامت یک اسپین فقط در چهار جمله از این $2N$ جمله تاثیر میگذارد. از آنجا که حلقه ی متروپولیس قلب اصلی این شبیه سازی است، کاهش مرتبه ی محاسبه در اینجا بسیار اهمیت دارد. برای همین به غیر از تابعی که انرژی را محاسبه میکند به تابعی احتیاج داریم که تغییر در انرژی را به ازای جهش علامت یکی از اسپین ها گزارش کند.

از آنجا که برای محاسبه احتمال قبول قدم نیاز به محاسبه عامل بولتزمن $e^{-\beta \Delta E}$ است، در تمام محاسبات ضریت βJ با $J/k_B T$ هم ظاهر میشود. برای کاهش تعداد عملیات ضرب و تقسیم میتوان به جای استفاده از واحد های فیزیکی از واحدی استفاده کنیم که در آن این عامل به یک پارامتر کاهش یابد. به طور مثال اگر واحد انرژی را $k_B T$ بگیریم، J تنها پارامتر موثر مسئله خواهد بود (البته در این واحد). امکان دیگر تثبیت J/k_B به عنوان واحد انرژی و ورود دما به مسئله در این واحد است. این گونه واحد های انتخابی که در شبیه سازی به به منظور کاهش عملیات ریاضی انتخاب میشوند را واحد های کاهیده⁴⁷ مینامیم.

نکته 2:

در مورد مسئله آیزینگ میتوان محاسبه ی عامل احتمال متروپولیس را به شکل بسیار بهینه ای نوشت. فرض کنید که در قدمی از شبیه سازی، تلاش برای تغییر علامت s_{ij} مورد بررسی باشد. در این حالت تغییر در انرژی به شکل $\Delta E = -2 s_{ij} (s_{i+1j} + s_{i-1j} + s_{ij+1} + s_{ij-1})$ داده میشود. عبارت داخل پرانتز عددی مضرب دو خواهد بود. پس $\Delta E \in \{-8, -4, 0, 4, 8\}$ است. به دلیل محدودیت در مقادیر ممکن ΔE میتوان ضریت بولتزمن را برای این پنج مقدار در یک آرایه ی پنج عضوی ذخیره کرد و بر حسب مورد صدا زد. این کار به مراتب از محاسبه ی تابع نمایی کم هزینه تر است.

10.4.4. شرایط مرزی دوره ای

⁴⁷ Reduced units

در تمام مسایلی که برهمکنش های چند ذره ای (تقریباً تمام مسایل فیزیک) در هامیلتونی سیستم وجود دارد، سوال مهمی مطرح است و آن اینکه با ذراتی که بر روی مرزی سیستم مینشینند چه کنیم. توجه کنید که در سیستم های ترمودینامیک تعداد این ذرات در مقایسه با ذراتی که در حجم قرار دارند انقدر کوچک است که از اثر آنها میتوان چشم پوشی کرد و هر گونه که بر همکنش آنها را فرض کنیم تاثیری بر فیزیک نخواهد داشت. ولی در مسایلی که ما شبیه سازی میکنیم، به دلیل محدودیت های محاسباتی اندازه های سیستم بسیار کوچک است و این ذرات نقش موثر و قابل مشاهده ای را خواهند داشت. پس نتایج شبیه سازی به نحوه برخورد با آنها وابسته است.

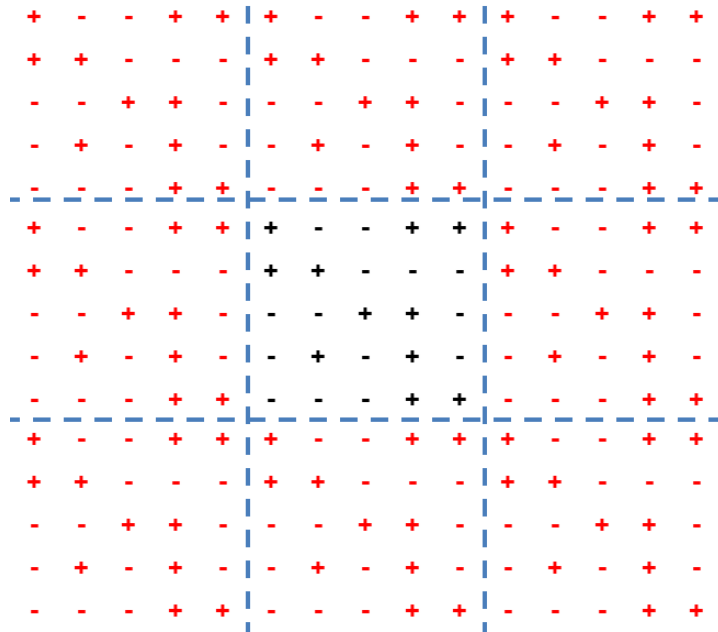
روشهای متفاوتی برای در نظر گرفتن ذرات سطحی وجود دارد، ولی یکی از پر کاربرد ترین آنها که قصد دارد اثر سطح را تا حد امکان کاهش دهد استفاده از شرایط مرزی دوره ای است. مثال زیر میتواند برای درک این شرایط مرزی کمک کند.

فرض کنید که سیستم محدودی با اندازه ای 5×5 داریم؛

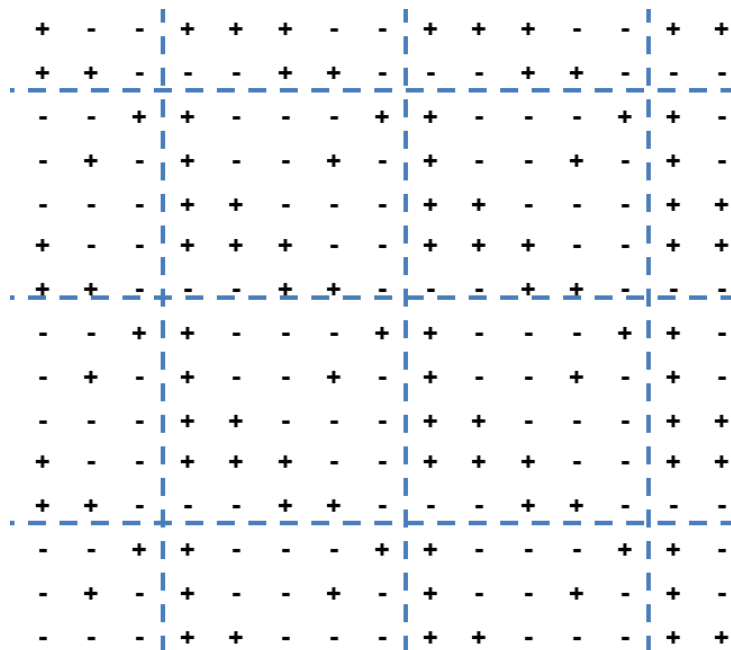
+	-	-	+	+
+	+	-	-	-
-	-	+	+	-
-	+	-	+	-
-	-	-	+	+

همانطور که در این تصویر میبیند 16 عدد از 25 اسپین این مدل، یعنی بیش از نیمی از آنها، بر روی مرز نشسته اند. در این آرایش عناصر مرزی کمتر از 4 همسایه دارند و در صورت عدم تمهیدی برای از بین بردن اثرات مرزی این اسپین ها بر فیزیک مسئله تاثیر قابل توجهی میگذارند.

در واقع در این تصویر 16 اسپین از 9 اسپین دیگر متمایز هستند. برای از بین بردن این تمایز میتوان این آرایش را در فضا تکرار کرد. یعنی تصاویر این سیستم را از راست و چپ، بالا و پایین در فضا تکثیر کرد به گونه ای که بنظر برسد که سیستم ما تا بینهایت از هر سو ادامه دارد. البته به خوبی میدانیم که این تصویر نا متناهی از تناوب سیستم محدود ما تولید شده است.

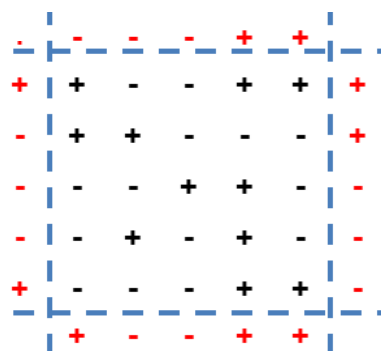


در اینجا برای تمایز سیستم اولیه از تصاویری هم از رنگ استفاده شده است و هم مرزها با خطوط خط چین نمایش داده شده است. ولی اگر این علائم نا پدید بشود (با توجه به نا محدود بودن این مجموعه) کسی نمیتواند محل مرز اولیه و سیستمی که تکثیر شده است را تشخیص دهد. تنها چیزی که قابل مشاهده است وجود دوره تناوب است. ولی سیستم اصلی میتواند هر مربع 5×5 دلخواهی باشد.



به این ترتیب هیچ تمایزی بین نقاط این شبکه تناوبی نیست و میتوان برای انرژی این آرایش، برهمکنش هر ذره با همسایگانش را در نظر گرفت. به این ترتیب اثر مرز حذف شده است، هر چند به دلیل تناوب مسئله اثر طول محدود همچنان پا برجاست و نباید فراموش کنیم که در هر صورت ما در حال شبیه سازی سیستمی به طول 5 هستیم و ما باید انرژی در واحد سیستم محدود را محاسبه کنیم. یعنی فقط برای 25 ذره ای که در سیستم وجود دارند.

بدلیل کوتاه برد بودن برهمکنش در مدل آیزینگ نیازی به نگه داشتن تمام تصاویر نداریم. چون هر ذره فقط با همسایه اول خود برهمکنش دارد. در نتیجه سیستم محدود زیر که در آن فقط یک ردیف از مجموعه تصاویر در دو سوی سیستم اصلی نگه داشته شده است معادل سیستم بینهایت گسترده و تناوبی ماست.



10.5. تصحیح اندازه ی محدود

باید اضافه شود.

9.1	1. کدی برای شبیه سازی مدل آیزینگ دو بعدی با روش متروپولیس آماده کنید.
تمرین	2. رفتار کمیت های C_v , χ , و $ \langle m \rangle $ را برحسب دما (بخصوص در اطراف دمای بحرانی) بررسی کنید.
	3. با فرض اینکه رفتار بحرانی برای ظرفیت گرمایی، تکنیکی لگاریتمی دارد، $c_v = c_0 \ln(T - T_c)$ با اجرای برنامه برای سیستم هایی با اندازه های متفاوت نماهای بحرانی β_c , γ_c , و ν_c ضریب c_0 را برای آیزینگ دو بعدی بدست آورید.