

НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ

«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ

імені ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»

ФІЗИКО-ТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ

КАФЕДРА ПРИКЛАДНОЇ ФІЗИКИ



ЛАБОРАТОРНА РОБОТА №5

**Моделювання мікроканонічного та канонічного ансамблів методом
Монте-Карло**

Роботу виконав:

Іванов Віктор Віталійович

Студент групи ФФ-41мн, ННФТІ

Роботу перевіряла:

Гордійко Наталія Олександрівна

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

Порядок виконання роботи

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

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.

Програмний код:

```
function [Es, Ed, SpM, A, S, Ns] = Ising2(Nspin, J, h, T, NTrial)
% Налаштування початкових параметрів
Ns = sqrt(Nspin); % розмір сторони решітки
s = ones(Ns, Ns); % початкова конфігурація спінів
Ensys = -J * Nspin; % початкова енергія системи
Edemon = 4 * J * floor((T * Nspin - Ensys) / (4 * J));
Es(1) = Ensys; Ed(1) = Edemon;
S = s; k = 1;

% Основний цикл моделювання
for i = 1:NTrial
    Accept = 0;
    for j = 1:Nspin
        % Випадковий вибір вузла сітки
        Ix = randi(Ns); Iy = randi(Ns);

        % Граничні умови
        Left = mod(Ix - 2, Ns) + 1;
        Right = mod(Ix, Ns) + 1;
        Down = mod(Iy - 2, Ns) + 1;
        Up = mod(Iy, Ns) + 1;

        % Розрахунок зміни енергії
        de = 2 * s(Iy, Ix) * (-h + J * (s(Iy, Left) + s(Iy, Right) + s(Down, Ix) + s(Up,
Ix)));
        if de <= Edemon
            s(Iy, Ix) = -s(Iy, Ix);
            Accept = Accept + 1;
            Edemon = Edemon - de;
        end
    end
    S = s;
end
```

```

        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

% Виклик функції з заданими параметрами
Nspin = 64; % Число спінів системи
J = 1; % Константа обмінної взаємодії
h = 0; % Напруженість зовнішнього магнітного поля
T = 1.5; % Температура
NTrial = 100; % Кількість випробувань

[Es, Ed, SpM, A, S, Ns] = Ising2(Nspin, J, h, T, NTrial);

% Візуалізація миттєвих конфігурацій спінів
time_points = [10, 100, 500, 2000];
colors = lines(length(time_points)); % Генеруємо набір кольорів для кожного часу

for idx = 1:length(time_points)
    t = time_points(idx);
    figure; bar3(S(:, :, t));
    axis([0 Ns 0 Ns -1.5 1.5]);
    colormap(jet); % Використовуємо кольорову карту 'jet'
    title(['Конфігурація системи в момент часу t=', num2str(t)]);
end

% Візуалізація миттєвих значень енергії системи
figure;
plot(1:length(Es), Es, 'Color', 'b', 'LineWidth', 1.5); grid on;
title('Залежність миттєвих значень енергії системи від часу');
xlabel('Час'); ylabel('Енергія');

% Візуалізація миттєвих значень енергії демона
figure;
plot(1:length(Ed), Ed, 'Color', 'r', 'LineWidth', 1.5); grid on;
title('Залежність миттєвих значень енергії демона від часу');
xlabel('Час'); ylabel('Енергія демона');

% Розрахунок фізичних величин
% Compute physical quantities
Emean = mean(Es) / Nspin; % Mean energy per spin
E2mean = mean(Es.^2) / Nspin; % Mean square energy per spin

SpMmean = mean(SpM) / Nspin; % Mean magnetization per spin
SpM2mean = mean(SpM.^2) / Nspin; % Mean square magnetization per spin

Cv = (E2mean - Emean^2) / (T^2); % Heat capacity
Chi = (SpM2mean - SpMmean^2) / T; % Magnetic susceptibility

```

```

% Display results
disp(['Середня енергія на спін: ', num2str(Emean)]);
disp(['Середня намагніченість на спін: ', num2str(SpMmean)]);
disp(['Теплоємність: ', num2str(Cv)]);
disp(['Магнітна сприйнятливість: ', num2str(Chi)]);

```

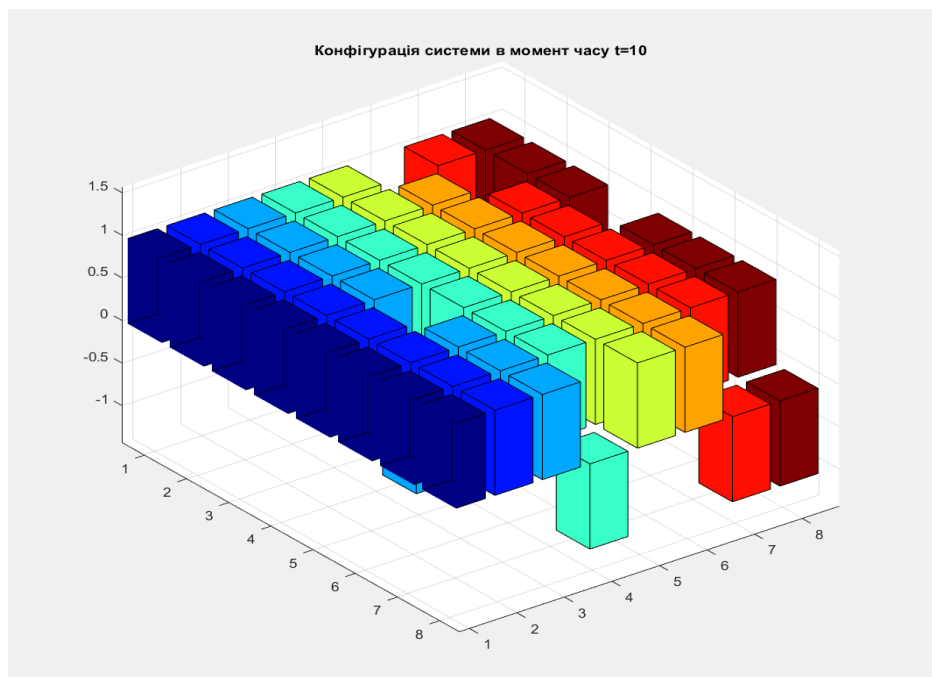


Рис. 1. Конфігурація системи в момент часу $t=10$.

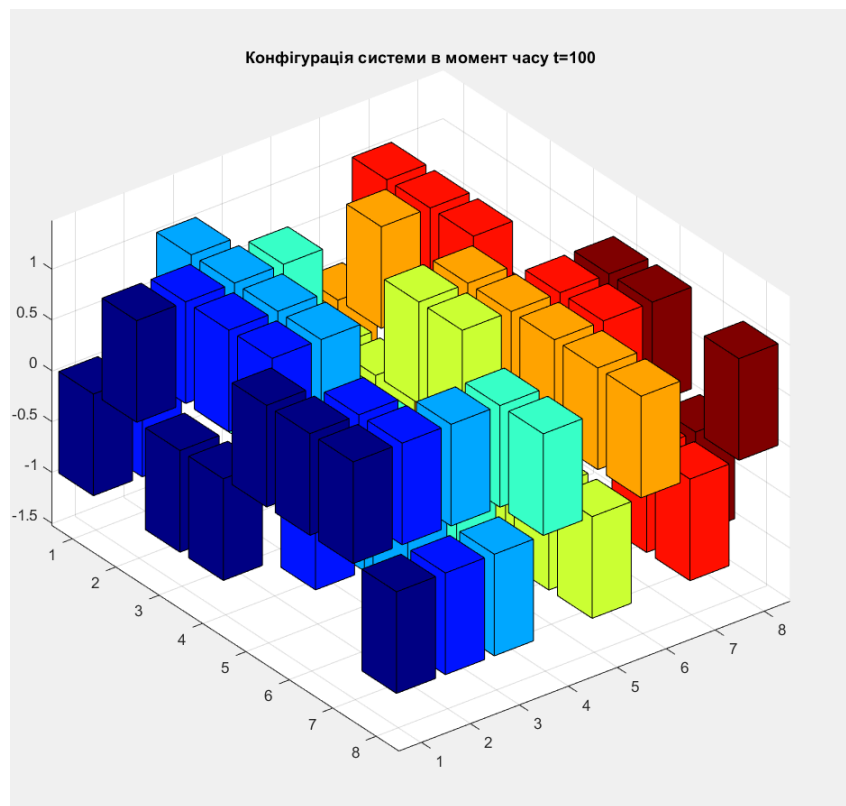


Рис. 2. Конфігурація системи в момент часу $t=100$.

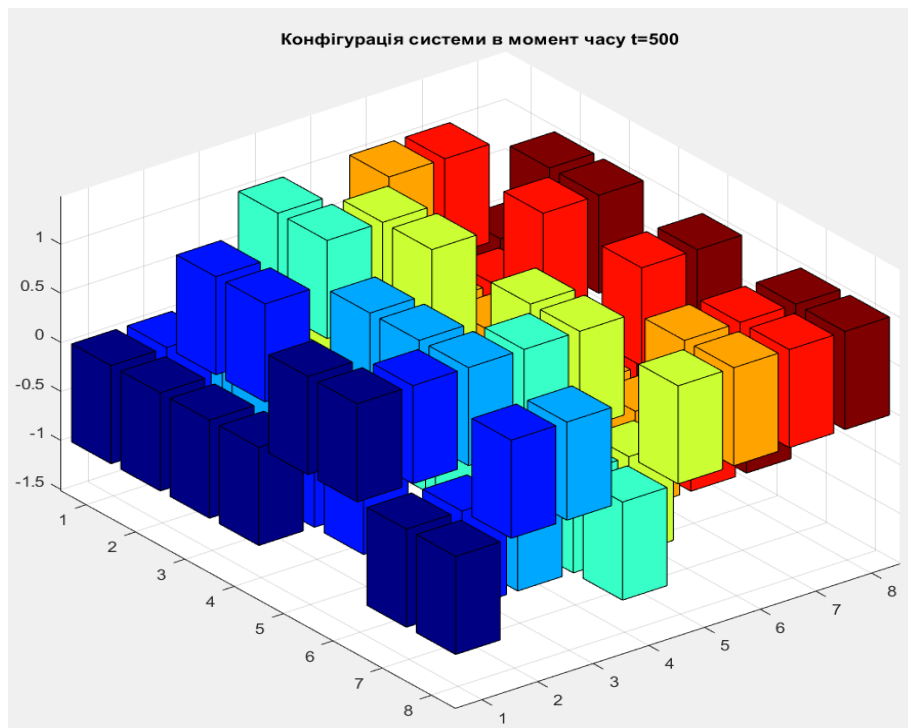


Рис. 3. Конфігурація системи в момент часу $t=500$.

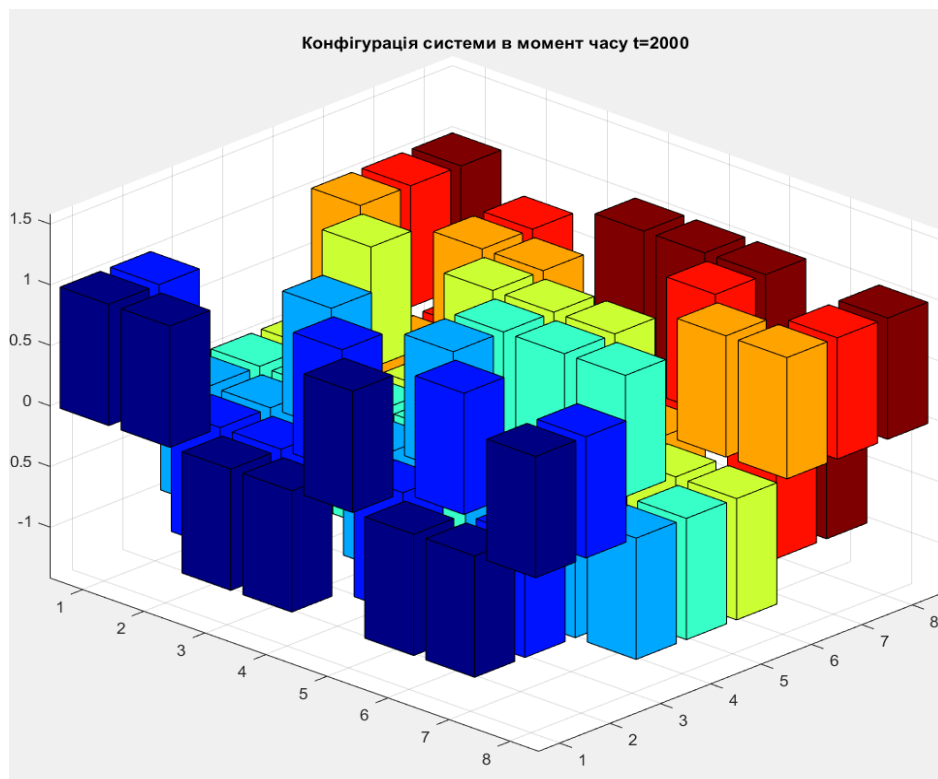


Рис. 4. Конфігурація системи в момент часу $t=2000$.

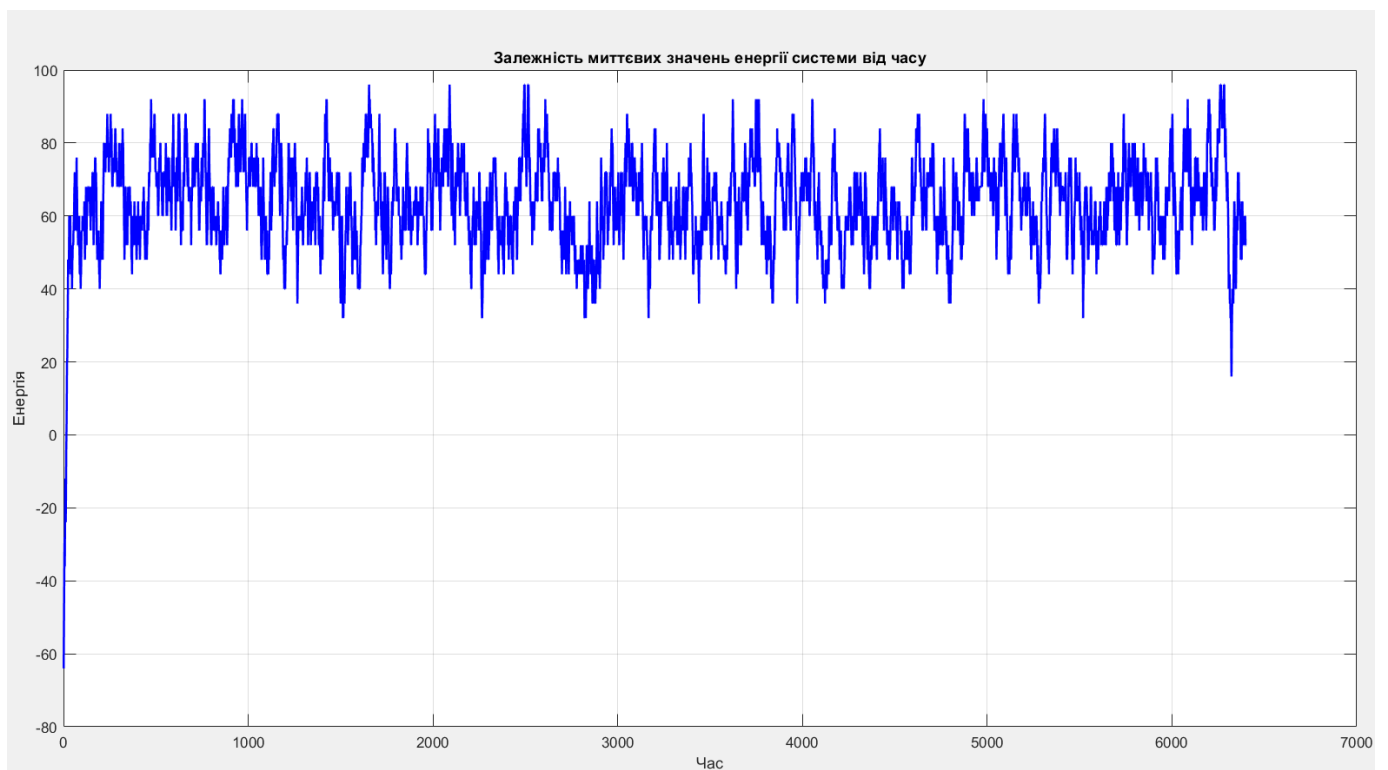


Рис. 5. Залежність миттєвих значень в енергії системи від часу.

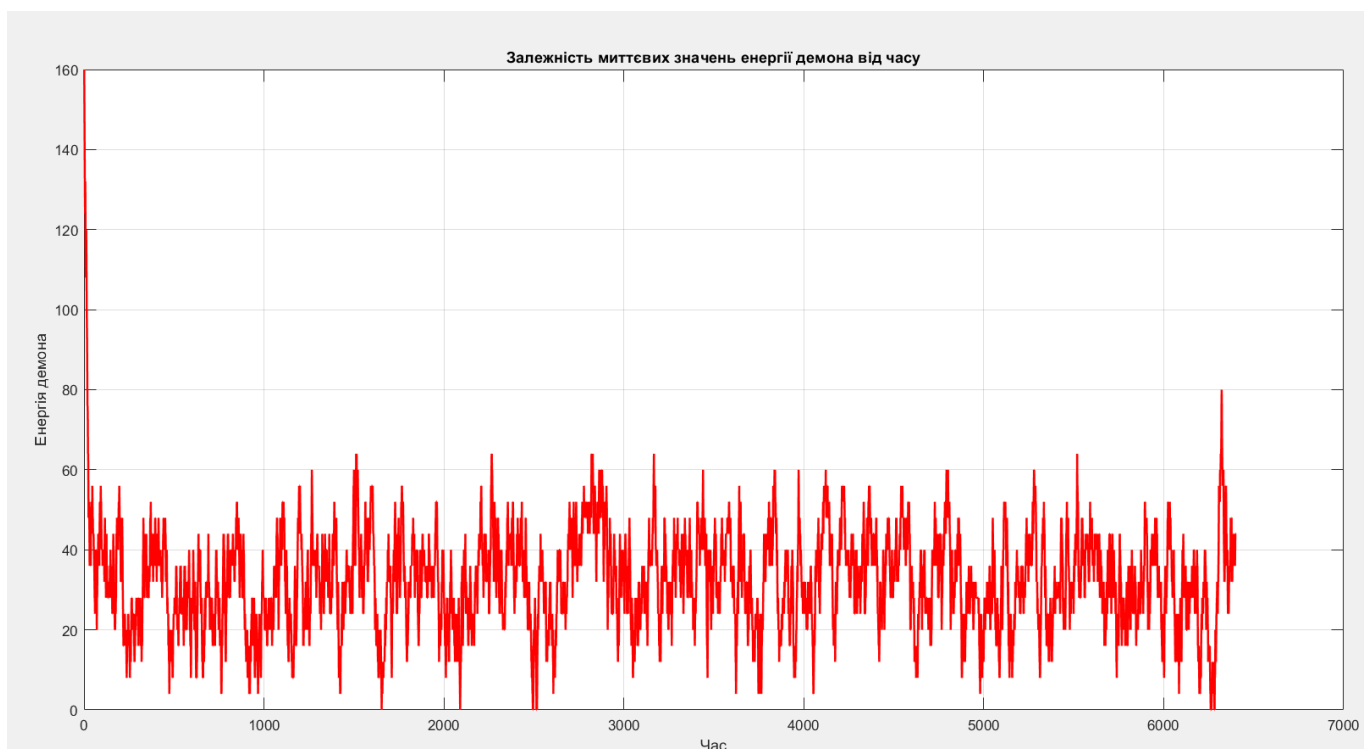


Рис. 6. Залежність миттєвих значень енергії демона від часу.

Результати обрахунків фізичних величин:

```
Середня енергія на спіні: 0.99345  
Середня намагніченість на спіні: 0.0066591  
Теплоємність: 28.7052  
Магнітна сприйнятливність: 0.73241
```

ВИСНОВОК. Динаміка конфігурації системи: на 1-му, 2-му, 3-му, 4-му графіках показані тривимірні конфігурації системи в різні моменти часу. Спостерігається поступова зміна конфігурації від більш впорядкованого стану на початку до більш хаотичного розподілу в пізніший час. Це може вказувати на еволюцію системи, де початкова структура змінюється зі збільшенням часу, можливо, внаслідок теплового впливу або інших факторів, що ведуть до зростання ентропії.

Енергетичний стан системи: 5-ий графік показує коливання енергії системи в часі. Видно, що енергія системи змінюється у широкому діапазоні, але має певний

рівень стабільності навколо середнього значення. Це може вказувати на наявність рівноважного стану системи, однак із значними флуктуаціями.

Енергетичний стан демона: 6-ий графік показує коливання енергії демона в часі. Відмічається, що хоча значення енергії демона також значно змінюються, загальний рівень флуктуацій є нижчим порівняно з енергією системи. Це може свідчити про різні механізми обміну енергією між системою і демоном.

Загалом, ці графіки демонструють, як змінюються конфігурація та енергетичний стан системи й демона з часом.