

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ В РЕШЕТОЧНЫХ СИСТЕМАХ

Панасенко Ф.А., группа АСУ-00а

Руководители:

проф. Скобцов Ю.А., Донецкий национальный технический университет
с.н.с. Коварский В.Л., Донецкий физико-технический ин-т НАНУ

Решеточными системами мы будем называть системы, которые можно представить в виде n -мерной матрицы узлов, причем каждый узел может иметь дискретный набор состояний (далее модели, представляющие решеточные системы, мы будем называть решеточными моделями). Решеточная модель применима во многих областях физики, например, при моделировании процессов стеклования, исследовании закупоривания полупроницаемых мембран, исследовании изменения структуры металла в процессе закалки и т.д..

Модель для исследования процесса стеклования описывает кристаллическую решетку исследуемого материала. Состояния узловых объектов характеризуются переменной S , которую в физике принято называть псевдоспиновой. Исходим из трех возможных состояний:

$S=1$ - в правой потенциальной яме

$S=-1$ - в левой потенциальной яме

$S=0$ - в пространстве между ямами (т. наз. надбарьерное движение)

Наличие энергетического барьера между ямами позволяет исследовать кинетические свойства системы, поскольку конечная его высота предполагает также и конечное время достижения системой термодинамического равновесия.

Стеклообразное состояние – это состояние замороженного структурного беспорядка, т.е. такое состояние, которое, с одной стороны, является разупорядоченным (т.е. псевдоспины узлов направлены хаотично), а с другой - термодинамически стабильным, т.е. отсутствует псевдоспиновая динамика.

Модель может быть описана эффективным гамильтонианом вида:

$$\hat{H}_{ef} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ik} \hat{S}_i \hat{S}_j - T \ln \left(\frac{Z_1}{Z_0} \right) \sum_i \hat{S}_i^2 - TN \ln Z_0, \quad (1)$$

где J_{ik} - константа взаимодействия соседних узлов, T - абсолютная температура, выраженная в энергетических единицах, N - количество узлов, Z_1 , Z_0 - функции температуры:

$$Z_1 = \frac{1}{U_0} \int_0^{U_0} e^{-E/T} g(E) dE, \quad (2)$$

$$Z_0 = \frac{1}{U_0} \int_{U_0}^{\infty} e^{-E/T} g(E) dE, \quad (3)$$

$g(E)$ - плотность состояний с энергией E (определяется конкретной моделью и может задаваться различными функциями), U_0 - высота энергетического барьера.

Первое слагаемое описывает упорядочение модели, второе и третье - в усредненном виде описывает состояние одного узла (фактически, именно благодаря им и появляется возможность исследования стеклообразного состояния).

Моделирование производится по методу Монте-Карло, при этом возникает несколько дополнительных задач. Рассмотрим их подробнее.

Задача выбора следующего узла при моделировании

При моделировании методом Монте-Карло нам необходимо на каждом следующем шаге в пределах одной итерации выбирать следующий узел и рассчитывать его поведение в пределах данной итерации. В моделировании используются три подхода:

- выборка узлов последовательно, изменение состояния в пределах шага; данный метод является наиболее популярным вследствие его простоты;

- выборка узлов случайным образом, изменение состояния в пределах шага; данный метод также широко используется;
- произвольная выборка, изменение состояния в пределах итерации; данный метод наименее популярен в силу большей сложности.

В работе планируется провести сравнительное исследование подходов на простой системе с отсутствующим парным взаимодействием, для которой существует аналитическая модель, после чего выявить их сравнительную репрезентативность. В дальнейшем в работе использовать подход, показавший себя наиболее репрезентативным.

Задача определения фазового перехода

В общем случае фазовый переход в системе (т.е. переход из неупорядоченного состояния в упорядоченное) выражается в появлении доменов, в пределах которых псевдоспины узлов сонаправлены. Данную ситуацию достаточно трудно отследить, т.к. требуется применение какой-либо подсистемы классификации. Обычно модель упрощают введением несимметричных граничных условий, что приводит к общей сонаправленности псевдоспинов всех доменов, т.е. фазовый переход мы можем отслеживать по характеристике $\langle S \rangle$. Тут также существует три подхода:

- введение системы в слабое поле; этот подход позволяет добиться вышеописанных результатов ценой некой погрешности, обусловленной воздействием одновременно на все узлы решетки;
- принятие псевдоспинов всех граничных узлов сонаправленными; при использовании данного подхода создается поле анизотропии, приводящее к тем же результатам, что и в предыдущем методе; теоретически достаточно большой размер решетки позволяет свести к минимуму погрешность, создаваемую этим полем;

- создание подсистемы классификации доменов; теоретически метод не вносит погрешности в эксперимент, но является наиболее сложным в реализации.

В работе планируется провести исследование погрешности, вносимой первыми двумя методами. Для этого необходимо смоделировать систему без парного взаимодействия, т.к. для нее существует аналитическая модель, и определить вносимую погрешность путем сравнения результатов, полученных на модели, с аналитическими. Кроме того, планируется провести исследование поведения системы, смоделированной с использованием первого метода, для разных напряженностей поля и экстраполировать на 0 результаты.

В случае, если определенная после анализа погрешность будет признана недопустимо высокой, предполагается реализовать подсистему классификации доменов.

Задача определения температуры как функции от количества итераций при кинетическом моделировании

Суть кинетического моделирования состоит в том, что при изменении температуры мы не ждем установления термодинамического равновесия, т.е., по сути, изменяем температуру быстрее, чем система успевает стабилизироваться. Примерная функция термодинамической стабилизации от времени приведена на рис. 1.

Проблема в том, что мы при моделировании не можем оперировать понятием «время», т.к. его у нас характеризует количество итераций. Цель алгоритма – определить момент (итерацию), в который следует изменять температуру на ступень. На сегодняшний день в физическом моделировании для этих целей фиксируется количество итераций на каждом шаге изменения температуры. Недостаток данного метода в том, что мы не можем управлять насыщением

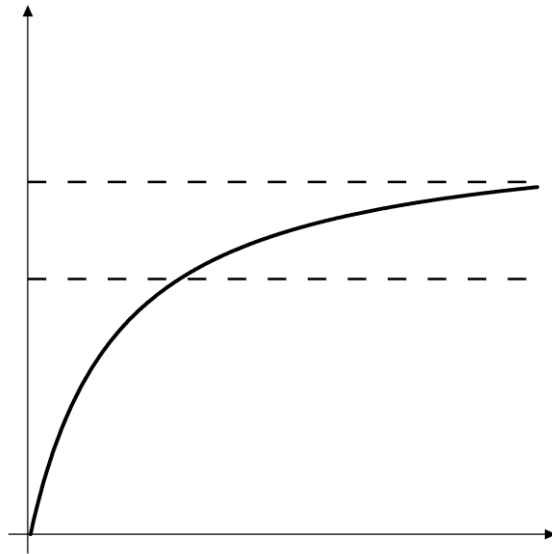


Рис. 1 – Стабілізація системи

системи, а кроме того в том, что постоянство длительности итерации далеко не очевидно. Тут мы можем предложить два пути:

- задать необходимое насыщение системы (скажем, 75%); после этого при моделировании доводить систему до термодинамического равновесия (тут мы можем определить уровень насыщения системы – верхняя прямая на графике – для данной температуры), а затем возвращать ее на необходимый уровень насыщения;
- попытаться определить время как функцию от количества итераций; для этого необходимо смоделировать систему без парного взаимодействия, т.к. для нее существует аналитическая модель, и сопоставить полученную экспериментально функцию насыщения от количества итераций и аналитическую функцию от времени. После этого необходимо найти корреляцию между функций от времени для аналитической модели без парного взаимодействия и численной модели.
- доказать постулат о том, что продолжительность итерации во времени эксперимента постоянна. После этого, зная длительность итерации, можно управлять процессом с необходимой точностью.

В работе планируется исследовать первый метод и попытаться реализовать два последних. Кроме того, предполагается получить сравнительные характеристики первого метода и традиционно применяемого.

Перечень ссылок

1. В.Л. Коварский, А.Ю. Кузнецов, А.В. Христов, «Замороженный структурный беспорядок в псевдоспиновой модели с барьерами», ФНТ.
2. Д.В. Хеерман, «Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике», М. «Наука», 1990.
3. C.W. Gardiner, «Handbook of stochastic methods for Physics, Chemistry and the Natural Science», Springer, Berlin-Heidelberg-NewYork-Tokyo (1985).
4. М.В. Волькенштейн, О.Б. Птицын, «Релаксационная теория стеклования», Доклады АН СССР, **103, 5** (1955).
5. W. Kob, R. Schilling, «Dynamics of a one-dimensional ‘glass’ model: Ergodicity and nonexponential relaxation», Phys. Rev. A, **42, 9** (1990).
6. W. Tschop, R. Schilling, «Kinetic-Ising-model description of Newtonian dynamics: A one-dimensional example», Phys. Rev. E, **48, 6** (1993).
7. P. Reichert, R. Schilling, «Glasslike properties of a chain of particles with anharmonic and competing interactions», Phys. Rev. B, **32, 9** (1985).
8. А.Ф. Иоффе, «Кинетика стабилизации стекол», Доклады АН СССР, **103, 6** (1955).
9. А.А. Овчинников, И.Л. Шамовский, «Модель кинетических превращений стеклообразной планарной среды», Физ. химия (1986).