Физика и материаловедение

УДК 51-73: 519.245: 004.942

И.Л. Детченков, А.Г. Масловская

ПРИМЕНЕНИЕ АЛГОРИТМА МЕТРОПОЛИСА В ЗАДАЧАХ РАСЧЕТА ХАРАКТЕРИСТИК ФЕРРОМАГНИТНОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ВТОРОГО РОДА

Работа посвящена модельному расчету физических величин, характеризующих ферромагнитный фазовый переход второго рода. Вычислительная схема реализация модели основана на эффективном алгоритме Метрополиса для двумерной модели Изинга. Представлен результат вычисленного эксперимента для тестовой задачи.

Ключевые слова: ферромагнетик, фазовый переход, модель Изинга, алгоритм Метрополиса, моделирование.

CHARACTERISTIC COMPUTATION OF FERROMAGNETIC SECOND ORDER PHASE TRANSITION WITH USE OF METROPOLIS ALGORITHM

The paper is devoted to model calculation of physical quantities characterizing ferromagnetic second order phase transition. The computational scheme was based on Metropolis algorithm for Ising model. The result of numerical experiment was demonstrated to express the solution of test problem.

Keywords: ferromagnetic, phase transition, Ising model, Metropolis algorithm, simulation.

Введение

В настоящее время моделирование фазовых переходов – одна из важнейших прикладных задач статистической теории [1-2]. Использование концепций стохастического моделирования критических явлений в макроскопических системах и применение технологии вычислительного эксперимента позволяют исследовать поведение намагниченности и процессы релаксации в окрестности температуры фазового перехода, интерпретировать условия аномального поведения теплоемкости и магнитной восприимчивости.

Одним из широко используемых методов стохастического моделирования является метод Монте-Карло, известный своими приложениями в самых различных научных областях: математическом анализе, численных методах, оптимизации, статистической физике, химии, биологии и др. Особую роль метод Монте-Карло играет в статистическом моделировании поведения характеристик макроскопических систем, поскольку предусматривает относительно несложную процедуру определения средних величин в каноническом ансамбле.

Статистическая формализация модели физической системы и проведение вычислительного эксперимента в ряде случаев оказываются возможными при условии, что заданы законы взаимодействия между отдельными элементами системы. Такая модель для изучения магнитных фазовых переходов была предложена в 1920 г. В. Ленцем [1] и вошла в историю науки с именем его ученика Изинга. Она представляет собой простейшую и одну из самых распространенных физических моделей фазового перехода. Статистическая теория модели Изинга нашла применение при рассмотрении самых разнообразных магнитных и немагнитных систем (ферромагнетики, антиферромагнетики, бинарные смеси и сплавы, решеточная модель жидкости, адсорбция на поверхности и др.) [1-4]. Кроме того, неожиданным оказалось использованием этой модели в ряде прикладных задач – таких как решение задачи коммивояжера и распознавании образов [4].

Цель настоящей работы – разработка базовой прикладной программы, предназначенной для расчета основных физических величин, характеризирующих ферромагнитный фазовый переход второго рода в сложных магнитных системах, на основе программной реализации двухмерной модели Изинга с применением алгоритма Метрополиса.

Основные концепции модели Изинга

Модель Изинга используется для моделирования поведения канонических ансамблей и представляет собой решеточную модель, в которой рассматриваются локальные взаимодействия – взаимодействия между узлами решетки. Под каноническим ансамблем традиционно понимают физическую систему, не изолированную от окружающей среды. В самом простейшем случае предполагается, что система находится при постоянной температуре. В магнитных системах локальные взаимодействия обусловлены спинами, расположенными в узлах решетки.

Рассмотрим d-мерную решетку, содержащую $N=L^d$ узлов, где L – характерный размер решетки. С каждым узлом решетки i связан спин s_i, который может принимать значение $s_i = +1$, если спин сонаправлен с осью OZ, и значение $s_i = -1$, если спин направлен противоположно. Любая конфигурация задается набором переменных $s_1, s_2, ... s_N$. Энергия системы при наличии магнитного поля будет определяться по формуле [1, 2]:

$$E = -\sum_{\langle i,j \rangle}^{N} J_{i,j} s_i s_j - \mu_B \sum_{i=1}^{N} B_i \cdot s_i \text{, эВ,} \tag{1}$$

где $J_{i,j}$ – потенциал взаимодействия спинов, Дж; B_i – магнитное поле в месте расположения спина, Тл; $\mu_B = \dfrac{e\bar{h}}{2m_e}$ – магнетон Бора, Дж/Тл.

В основу модели Изинга положено два упрощающих предположения: 1) кинетическая энергия узлов решетки принимается равной нулю; 2) в выражении (1), описывающем энергию взаимодействия, учитывается вклад от ближайших соседей.

Для описания состояний физической системы вводят равновесные статистические характеристики – среднюю энергию $\langle E \rangle$ и среднюю намагниченность $\langle M \rangle$ с использованием средних по ансамблю значений рассматриваемых физических величин:

$$\langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{p=1}^{P} E_p \exp\left(-\frac{E_p}{k_T \cdot T} \right) \text{, Дж; } \langle M \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{p=1}^{P} M_p \exp\left(-\frac{E_p}{k_T \cdot T} \right) \text{, А/м,} \tag{2}$$

где $Z = \sum_{p=1}^{P} \exp\left(-\dfrac{E_p}{k_T \cdot T} \right)$ – сумма по всем P микросостояниям системы; T – температура системы, К; k_T – постоянная Больцмана, Дж/К.

Макроскопические характеристики системы – теплоемкость C и магнитная восприимчивость χ – могут быть определены следующим образом:

$$C = \frac{\partial\langle E\rangle}{\partial T}, \text{ Дж/К}; \quad \chi = \frac{\partial\langle M\rangle}{\partial H} = \frac{\partial\langle m\rangle}{\Delta V\cdot\partial H}, \ 1, \tag{3}$$

где $\langle m\rangle$ – среднее значение суммарного магнитного системы при нулевом внешнем поле, А·м^2; $H = \dfrac{B}{\mu_0}$ – напряженность магнитного поля, А/м.

Принимая во внимание (2) и используя выражение

$$E_p = E_{p,0} - \sum_{p=1}^{P}\mu_B B_p s_p = E_{p,0} - \sum_{p=1}^{P}\mu_0 H_p \cdot m_p,$$

соотношения (3) можно записать в виде:

$$C = \frac{1}{k_T\cdot T^2}\left(\langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2\right), \text{ Дж/К}, \ \chi = \frac{\mu_0}{\Delta V\cdot k_T\cdot T}\left(\langle m^2\rangle - \langle m\rangle^2\right), \tag{4}$$

где μ_0 – магнитная постоянная, Н/А^2.

Алгоритм Метрополиса

Метод Монте-Карло объединяет группу методов статистического моделирования, каждый из которых базируется на замене стохастических переменных сгенерированными случайными значениями и последующим усреднением результатов многих испытаний. Расчет характеристик магнитных систем возможен на основе реализации алгоритма Метрополиса, предложенного для описания поведения канонического ансамбля [2, 4]. Общая структура этого алгоритма включает следующий набор шагов:

1) генерируется решетка с начальной конфигурацией спинов;

2) выбирается случайным образом спин для переворота (опрокидывания);

3) вычисляется изменение энергии системы, вызванное изменением конфигурации спинов: если переворот привел к уменьшению энергии, то новая конфигурация принимается; если переворот привел к увеличению энергии, то новая конфигурация принимается с вероятностью, определенной с помощью распределения Больцмана – $\exp\left(-\dfrac{\Delta E}{k_T T}\right)$;

4) осуществляется повторение шагов 2-3 для получения статистической совокупности значений; вычисляются средние значения по всем конфигурациям;

5) производится расчет характеристик магнитной системы.

При моделировании поведения канонического ансамбля требуется учитывать, что симулируемая система имеет конечные размеры, для уменьшения влияния которых требуется задать условия на границах объекта. Один из вариантов задания граничных условий, соответствующих поведению объемных систем, – это задание периодических граничных условий:

$$\varphi(M_j) = \varphi(M_j + R_j), \tag{5}$$

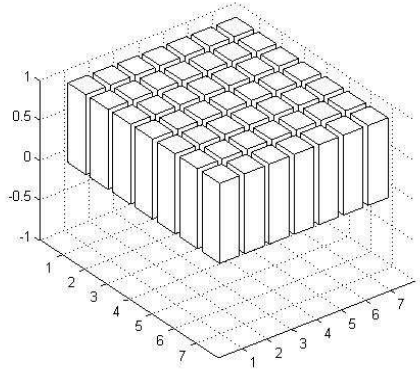
где $M_j = (M_x, M_y, M_z)$, $R_j = (R_x, R_y, R_z)$ – линейные размеры объекта.

Вычислительный эксперимент и результаты расчета характеристик для тестовой модельной задачи

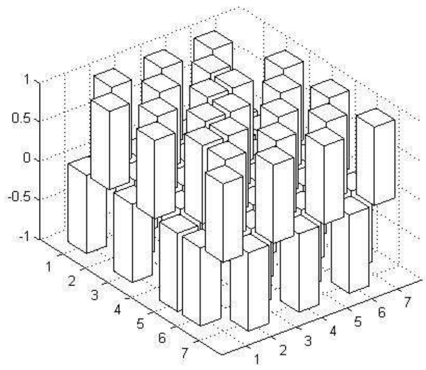
Программная реализация алгоритма проведена в виде трех модулей: файл, создающий начальную решетку; файл, вычисляющий энергию заданной конфигурации спинов; файл, приводящий систему к минимальной энергии.

Моделирование проводилось с использованием нормированных параметров. Значения параметров k_T, μ_0, μ_B, ΔV полагались равными единице; энергия измерялась в единицах температуры; при значении внешнего магнитного поля B=0 с целью экономии машинного времени выбор изменения энергии ΔE проводился из пяти возможных для этого случая значений $\{-8J,-4J,0,4J,8J\}$. В качестве входных параметров требуется инициализировать: число узлов решетки N, константу обменного взаимодействия J, величину внешнего магнитного поля B, температуру системы T (или массив значений температур) и количество испытаний P для реализации метода Монте-Карло.

Модельные представления конфигурации системы в начальный момент времени и спустя продолжительное время продемонстрированы на рис. 1. Рис. 2 иллюстрирует результаты расчета мгновенных значений магнитного момента от времени при тех же значениях модельных параметров.



А



б

Рис. 1. Конфигурация системы в момент времени t=0 – *а*, t=2000 отн. ед. – *б* (значения параметров: N=100, J=1, B=0, T=1.5, P=1000).

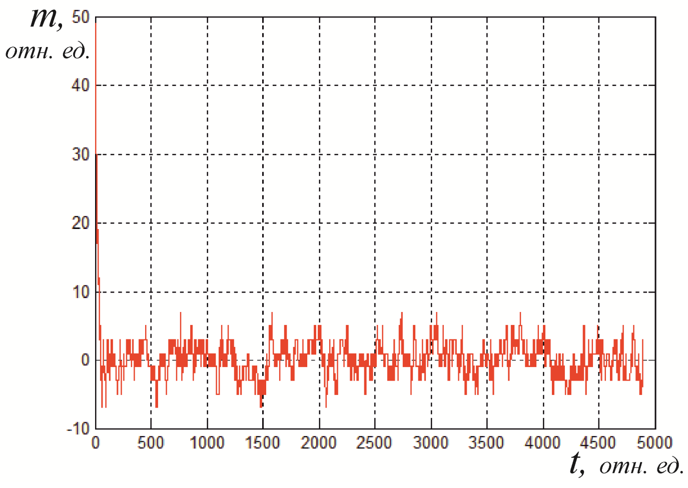
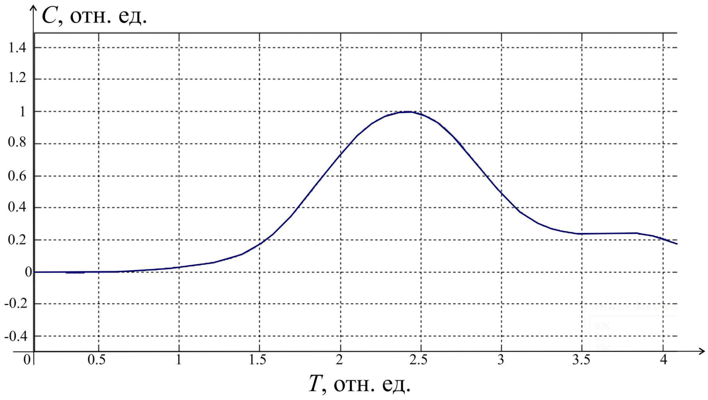


Рис. 2. Зависимость мгновенных значений магнитного момента системы от времени.

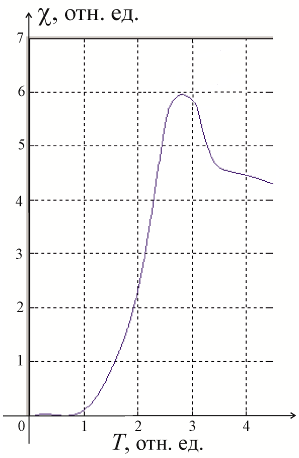
Программная реализация двухмерной модели Изинга позволяет рассчитать макроскопические характеристики физической системы. В данном вычислительном эксперименте: теплоемкость – $C = 0.23$ отн. ед.; значение магнитной восприимчивости $\chi = 4.60$; среднее значение магнитного момента $\langle m \rangle = -0.32$.

Чтобы рассчитать зависимость макроскопических характеристик магнитной системы от температуры (4), требуется провести серию подобных экспериментов, определив интервал изменения температуры. Примем, что температура системы меняется в диапазоне [0.1; 4.1] отн. ед. с шагом ΔT=0.5.

На рис. 3 показаны графики температурных зависимостей теплоемкости C и магнитной восприимчивости χ.



а



б

Рис. 3. Графики температурной зависимости теплоемкости (*а*) и магнитной восприимчивости (*б*) моделируемой двухмерной системы (при значениях параметров: N=100, J=1, B=0, P=1000).

Температурные зависимости характеристик магнитных систем обнаруживают максимум в области температуры фазового перехода.

Заключение

Таким образом, в работе проведена программная реализация двухмерной модели Изинга, которая позволяет рассчитать макроскопические характеристики магнитной системы. Проведенный модельный расчет для тестовой задачи показал возможности вычислений температурных зависимостей теплоемкости и магнитной восприимчивости, которые обнаруживают аномальное поведение вблизи температуры фазового перехода. Одна из сложностей программной реализации алгоритма Метрополиса заключается в ресурсоемкости проводимых вычислений, поскольку для адекватного описания реальных физических объектов требуется рассмотрение системы, состоящей из большого количества спинов. Разработанная прикладная программа является прототипом для выполнения следующего этапа исследований – моделирования магнитокалорического эффекта в сложных магнитных системах [5] (таких как сплав Гесслера $Ni_{50}Mn_{34}In_{16}$). Решение этой модельной задачи требует вычисления температурных зависимостей теплоемкости и магнитной восприимчивости в размерных величинах с использованием описанных подходов и программных реализаций на основе данных *ab initio*-расчета параметров обменного взаимодействия.

Хеерман, Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике / пер. с англ., под ред. С.А. Ахманова. – М.: Наука. Гл. ред. физ-мат. лит., 1990. – 176 с.

Прудников, В.В., Вакилов, А.Н., Прудников, П.В. Фазовые переходы и методы их компьютерного моделирования. – М.:ФИЗМАТЛИТ, 2009. – 224 с.

Тарасевич, Ю.Ю. Математическое и компьютерное моделирование. Вводный курс: Учебное пособие. – Изд. 4-е, испр. – М.: Едиториал УРСС, 2004. – 152 с.

Поршнев, С.В. Компьютерное моделирование физических процессов в пакете MATLAB. – М.: Горячая линия – Телеком, 2003. – 592 с.

Buchelnikov, V.D., Sokolovskiy, V.V., Taskaev, S.V., Khovaylo, V.V., Aliev, A.A., Khanov, L.N., Batdalov, A.B., Entel, P., Miki, H. and Takagi, T. Monte-Carlo Simulations of the magnetocaloric effect in magnetic Ni-Mn-X (X = Ga, In) Heusler alloys // J. Phys. D: Appl. Phys., 2011. – V. 41. – P. 064012-064026.