



**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В.ЛОМОНОСОВА**

Физический факультет
Лаборатория инженерной физики

**Создание Web-интерфейса для изучения фазовых переходов
второго рода в двумерных структурах малых размеров**

Курсовая работа по программированию студента 2-ого курса Ромшина А.М.

Преподаватель _____ А.А. Алексеев

Москва, 2016

Содержание

Введение

3

Введение

Изучение систем, состоящих из большого числа взаимодействующих частиц, является одной из важнейших проблем современной физики. Особый интерес представляет термодинамическое поведение веществ при возникновении определённого типа упорядочения. Переход системы в более упорядоченное состояние совершается в узкой области температур и называется фазовым переходом.

Проблема фазовых переходов до сих пор остается одной из актуальных проблем теоретической физики. Главные задачи, решаемые статистической теорией фазовых переходов, заключаются в выяснении механизма возникновения фазовых переходов и определении их параметров.

Большой интерес представляют фазовые переходы второго рода, связанные с перестройкой структуры вещества без обмена энергией с окружающей средой. Описание фазовых переходов на основе микроскопической модели вещества представляет большие математические трудности ввиду сложной структуры реальных веществ и сложных потенциалов взаимодействия между атомами. В связи с этим для исследования закономерностей фазовых переходов рассматриваются модели, отображающие основные свойства реального тела и позволяющие провести численное или аналитическое описание системы и таким образом описать фазовый переход.

В данной работе рассматривается переход ферромагнетик—парамагнетик при помощи модели Изинга с его графической Web-реализацией.

Постановка задачи

Основной задачей является визуализация результатов численного моделирования поведения двумерных структур во внешних полях в зависимости от температуры при помощи метода Монте-Карло и алгоритма Метрополиса в виде Web-интерфейса, а именно:

- построение зависимостей энергии системы, приходящейся на один спин, и средней намагниченности от температуры с помощью библиотеки *jQPlot.js*
- представление кристаллической решётки после определённого числа блужданий (в нашем случае оно фиксировано и равно 100) средствами *JavaScript*.

Решение задачи

Теоретическое введение

Модель Изинга представляет собой предельно упрощённую статистико-механическую модель, описывающую как равновесные свойства системы, так и фазовый переход второго рода, происходящий в системе. Данная модель содержит три основных предположения:

- 1) упорядочиваемые объекты фиксированы в узлах кристаллической решётки;
- 2) каждый объект может находиться лишь в двух состояниях;
- 3) учитывается взаимодействие лишь между ближайшими объектами.

Рассмотрим плоскую квадратную решётку, состоящую из N узлов, в каждом из которых находится диполь с осью, перпендикулярной к плоскости решётки. Диполь может иметь две противоположные ориентации, так что общее число возможных конфигураций в решётке равно 2^N . Для описания различных конфигураций поступим следующим образом. С каждым узлом решётки (с координатами $k, l \in \mathbb{Z}$) свяжем переменную σ_{kl} , принимающую два значения ± 1 , соответствующие двум возможным ориентациям диполя. Если ограничиться только учетом взаимодействия между соседними диполями, то энергия конфигурации может быть записана в виде

$$\begin{aligned} E(\sigma) &= -J \sum_{k,l=1}^L (\sigma_{kl}\sigma_{k,l+1} + \sigma_{kl}\sigma_{k,l-1} + \sigma_{kl}\sigma_{k-1,l} + \sigma_{kl}\sigma_{k+1,l}) - \sum_{k=1}^L H_k \sigma_k = \\ &= - \sum_{k,l=1}^L J_{kl} \sigma_k \sigma_l - \sum_k H_k \sigma_k \end{aligned} \quad (1)$$

где L - число узлов в ребре решётки ($N = L^2$). Параметр J определяет энергию взаимодействия пары соседних диполей, равную $-J$ и $+J$ соответственно для одинаковых и противоположных ориентаций диполя. Положим $J > 0$; тогда наименьшей энергией обладает полностью упорядоченная (поляризованная) конфигурация, в которой все диполи ориентированы в одну сторону. Эта конфигурация имеет место при абсолютном нуле, а с увеличением температуры степень упорядоченности убывает, обращаясь в нуль в точке перехода, когда обе ориентации каждого диполя становятся равновероятными. Определение термодинамических величин требует вычисления статистической суммы

$$Z = \sum_{(C)} e^{-E(\sigma)/T} = \sum_{(\sigma)} \exp \left\{ \theta \sum_{k,l} \sigma_k \sigma_l + \sum_k H_k \sigma_k \right\}, \quad (2)$$

взятой по всем 2^N возможным конфигурациям (здесь $\theta = J/T$).

При $h = 0$ каждый энергетический уровень дважды вырожден в силу инвариантности энергии взаимодействия относительно "переворота" всех диполей (изменения знака всех σ_k). Преобразование $\sigma_k \rightarrow -\sigma_k$ вместе с тождественным преобразованием образует группу симметрии Z_2 . Фазовые переходы в модели Изинга связаны со спонтанным нарушением этой симметрии. Включение внешнего поля нарушает симметрию Z_2 . Вероятность нахождения системы в состоянии с энергией $E\{\sigma\}$ определяется распределением Гиббса:

$$P\{\sigma\} = \frac{1}{Z} \exp(-\beta E\{\sigma\})$$

где $\beta = (k_B T)^{-1}$, Z - статистическая сумма.

Использование метода Монте-Карло в статистической физике

Основная задача статистической физики — вычисление с помощью модельного гамильтониана $\hat{H}$ требуемых средних характеристик системы. Термодинамическое усреднение любой наблюдаемой величины $A(\sigma)$ определяется как:

$$\overline{A(\sigma)} = \frac{1}{Z} \int A(\sigma) \exp[-H(\sigma)/k_B T] d\sigma \quad (3)$$

Выражение $P(\sigma) = \frac{1}{Z} \exp[-H(\sigma)/k_B T]$ считается плотностью вероятности, описывающей статистический вес конфигурации σ в термодинамическом равновесии.

Применение метода Монте-Карло в равновесной статистической физике основано на идее аппроксимации уравнения (3), где интегрирование осуществляется по всем состояниям $\{\sigma\} = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_k\}$ с соответствующими весами $P(\sigma)$, а также на выборе вероятностей перехода системы из одного состояния в другое.

Выбор состояния системы осуществляется путем сэмплирования по *схеме Гиббса* (алгоритм Метрополиса или выборка по значимости). В соответствии с ней каждое следующее состояние $\{\sigma_{k+1}\}$ получается из предыдущего $\{\sigma_k\}$ при помощи функции $P_1(\sigma_k \rightarrow \sigma_{k+1})$ (вероятности перехода). Причем вероятность $P_1(\sigma_k \rightarrow \sigma_{k+1})$ выбирается так, что при $N \rightarrow \infty$ функция распределения состояний стремится к равновесному состоянию. Для этого достаточно выполнения принципа детального равновесия:

$$P(\sigma_k)P_1(\sigma_k \rightarrow \sigma_{k+1}) = P(\sigma_{k+1})P_1(\sigma_{k+1} \rightarrow \sigma_k)$$

Полученное соотношение означает, что отношение вероятностей прямого и обратного переходов зависит только от $\delta E = E\{\sigma_k\} - E\{\sigma_{k+1}\}$:

$$\frac{P_1(\sigma_k \rightarrow \sigma_{k+1})}{P_1(\sigma_{k+1} \rightarrow \sigma_k)} = \exp(-\beta \delta E)$$

Поэтому функция $P_1(\sigma_k \rightarrow \sigma_{k+1})$ берётся в следующем виде: $P_1(\sigma_k \rightarrow \sigma_{k+1}) = \exp(-\beta \delta E)$.

Описание и реализация алгоритма Метрополиса в виде программы на языке C++

В данной работе рассматривается магнитная интерпретация модели Изинга. А значит в узлах кристаллической решётки располагаются магнитные диполи(спины), принимающие два возможных значения: ± 1 . Также

Вершины кристаллической решётки располагаются в ячейках таблицы заданного размера с двумя возможными системами соседства. Каждой конфигурации системы приписывается энергия $E\{\sigma\}$ в соответствии с формулой (20).

Описание алгоритма метода Монте-Карло для заданной модели:

- 1) задание исходной конфигурации
- 2) выбор k -ого узла кристаллической решётки
- 3) вычисление вероятности перехода $P(\sigma_k)$
- 4) генерация случайного числа $R \in [0, 1]$
- 5) если $P(\sigma_k) > R$, то спин меняет знак на противоположный
- 6) если $P(\sigma_k) < R$, то спин не меняет своего знака

Реализация алгоритма. При реализации конфигурацию кристаллической решётки удобно представить в виде двумерного массива. Для этого введём обозначение σ_{kl} - значение спина элемента решётки, находящегося в k -ой строке и l -ом столбце. В случае четырёхугольной системы соседства, соседями узла (k, l) являются узлы $(k - 1, l), (k + 1, l), (k, l - 1), (k, l + 1)$.

В качестве начального состояния системы выбирается случайная конфигурация. Далее выбирается произвольный узел (k, l) , считается энергия данного состояния. Затем значение s спина в данном узле меняется на противоположное и также считается энергия.

Разность энергий $E\{\sigma_{-s}\} - E\{\sigma_s\}$ определяет вероятность перехода, а именно:

- 1) Если $\delta E \leq 0$, то фиксируется состояние, с противоположным значением спина.
- 2) Если $\delta E > 0$, то генерируется случайное число R , которое сравнивается с $P_1(\sigma_k \rightarrow \sigma_{k+1})$. В том случае, когда $R < P_1(\sigma_k \rightarrow \sigma_{k+1})$, результат совпадает с предыдущим, иначе - значение спина в узле не меняется.

Перейдём теперь к описанию непосредственно самой программы. Следующая функция отвечает за энергию конфигурации. В качестве входных данных выступают: указатель на двумерный динамический массив(кристаллическая решётка определённой конфигурации), значение внешнего поля в относительных единицах, ширина и высота решётки, введённые пользователем в файле **index.php**.

Листинг 1: Расчёт энергии конфигурации

```

1  double FindingOfEOC(int** LOS, int h, int Hl, int Wl)
2  {
3      double EOC = 0;
4
5      for (int n = 0; n < Hl; n++)
6          for (int m = 0; m < Wl; m++)
7          {
8              EOC += (-0.5)*(LOS[n][m] * LOS[n][m + 1 - Wl * ((int)(m / (Wl-1)))]
9                  + LOS[n][m] * LOS[n][m - 1 + Wl * ((int)((Wl- 1 - m) / (Wl - 1))]
10                 + LOS[n][m] * LOS[n + 1 - Hl * ((int)(n / (Hl - 1)))] [m] + LOS[n
11                 ][m] * LOS[n - 1 + Hl * ((int)((Hl - 1 - n) / (Hl - 1)))] [m]) - h
                *LOS[n][m];
9          }
10     return (EOC);
11 }

```

Функция представленная ниже производит выборку по значимости (непосредственно алгоритм Метрополиса) магнитного дипольного момента в указанном узле. Входные параметры: текущее значение спина, энергия конфигурации с этим значением, энергия конфигурации с противоположным спином и температура.

Данная функция вызывается для каждого узла кристаллической решётки при заданной температуре. Будем называть такую совокупность вызовов этой функции одним блужданием системы среди вероятных по Больцману состояний. Таким образом, в результате многочисленных блужданий система приходит в одно из вероятных состояний. Как уже упоминалось выше в нашем случае число блужданий равно 100.

Листинг 2: Выборка по значимости

```

1  int SelectionByProbability(int VOE, double EOC, double EONC, double T)
2  {
3      float ExpProbability;
4      float RandProbability;
5
6      ExpProbability = exp((-1)*abs(EONC - EOC) / T);
7      RandProbability = double(rand()) / RAND_MAX * (1);
8
9      if ((EONC - EOC) <= 0)
10         return((-1)*VOE);
11     else
12     {
13         if (RandProbability < ExpProbability)
14             return((-1)*VOE);
15         else
16             return(VOE);
17     }
18 }

```

Следующие методы считают энергию и намагниченность системы после конечного числа блужданий.

```
1  int FindingEOS(double CE, double T, int NOI)
2  {
3      double EOC;
4      double Chis = 0;
5      double StatSum = 0;
6
7      EOC = CE / NOI;
8      Chis = EOC*exp((-1)*EOC / T);
9      StatSum = exp((-1)*EOC / T);
10     return(Chis / StatSum);
11 }
12
13 double FindingMagnetization(int** LOS, int HI, int WI)
14 {
15     double Mag = 0;
16     int N = HI*WI;
17
18     for (int n = 0; n < HI; n++)
19         for (int m = 0; m < WI; m++)
20         {
21             Mag += LOS[n][m];
22         }
23     return(Mag / N);
24 }
25
26 double FindingMagSquaredAverage(double CM, int NOI)
27 {
28     return(pow(CM / NOI, 0.5));
29 }
```


Графическое представление результатов средствами *jQPlot* и *JavaScript*

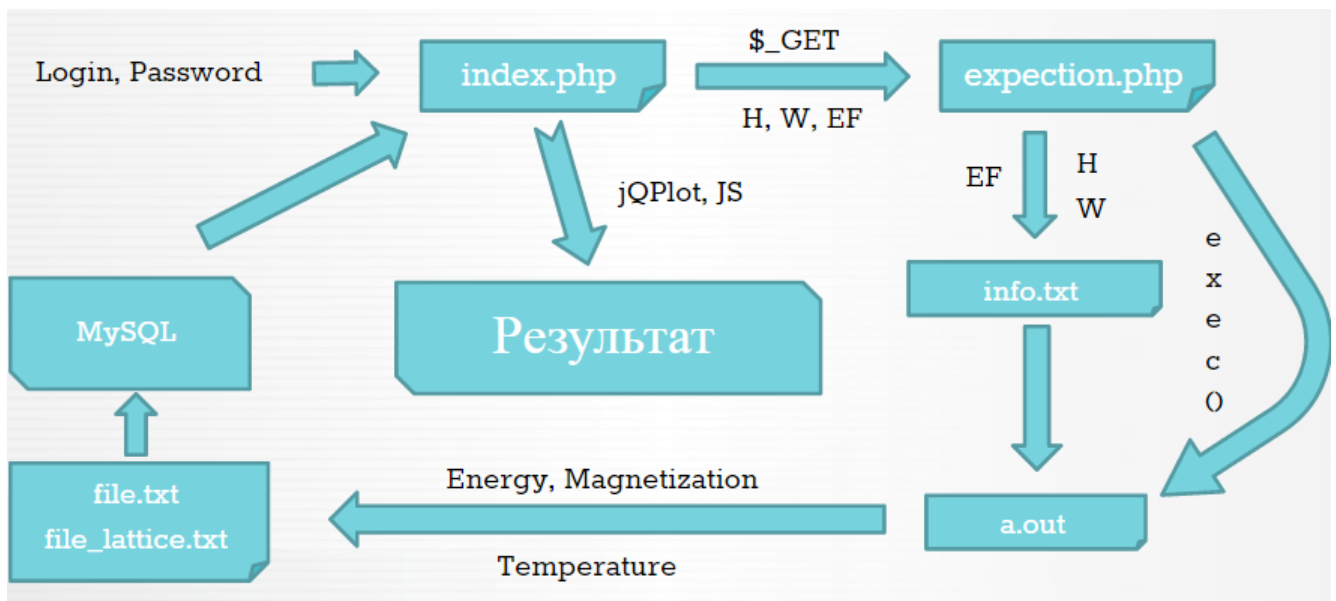


Рис. 1

Рассмотрим устройство Web-интерфейса поэтапно.

1) Пользователь вводит свои регистрационные данные в форму, находящуюся в файле **index.php**, отправляет их методом **POST** обработчику **lib.php**, где происходит идентификация имени пользователя и его пароля в соответствии с ранее внесенными данными в БД MySQL.

Если же регистрационные данные отсутствуют, то пользователю предлагается пройти регистрацию, в процессе которой также происходит обработка формы путём передачи данных методом **POST** файлу **brab.php** с последующим их внесением в БД.

2) После процесса идентификации пользователя ему представляется возможность выбрать размер кристаллической решётки, физические характеристики которой он хочет получить, и значение внешнего поля. Нажимая кнопку "Рассчитать всё, что можно!" введённые данные отправляются методом **GET** обработчику **expectation.php** следующей функцией *JavaScript*:

Листинг 4: Функция перенаправления с передачей параметров

```
1 window.location.href = 'http://test2.ru/expectation.php?Height='+Height+
2 '&Width='+Width+'&ExternalField='+ExternalField +
3 '&username=php echo $_SESSION['login']; ?' ;
```

3) На странице **expectation.php** происходит считывание данных из глобального массива **GET** и последующая их передача программе, написанной на языке *C++*, путём записи в файл. При помощи функции **exec()** программа запускается и по выполнении создает два текстовых файла, характеризующих состояние системы при заданных условиях. Скрипт **expectation.php** ожидает выполнения внешней программы, а после - заносит полученные файлы в БД, одновременно перенаправляя пользователя на страницу **index.php**, где выводятся графические результаты пользовательских запросов.

4) С помощью модуля *jqPlot* на странице **index.php** отображаются две графические зависимости. Рассмотрим более детально работу этого модуля.

Листинг 5: Модуль jqPlot

```
1      plot_magnetization = $.jqplot('Magnetization', [magnetization], {
2          title: 'Relatance Energy Of Temperature',
3          axes: {
4              xaxis: {
5                  tickOptions: {
6                      formatString: '%.1f'
7                  }
8              },
9              yaxis: {
10                 tickOptions: {
11                     formatString: '%.1f'
12                 }
13             }
14         },
15         highlighter: {sizeAdjust: 7.5},
16         cursor: {show: false}
17     });
```

На вход ему подается двумерный массив чисел **[x,y]**, а в теле метода **.jqplot** указываются характеристики объекта(графической зависимости):

- **title** отвечает за название графика
- **axis,xaxis** и **yaxis** дают возможность подписывать оси

Графический вывод кристаллической решётки осуществляется в виде таблицы, каждая ячейка которой соответствует узлу решётки. В соответствии с моделью Изинга спин в каждом узле может принимать лишь два значения: *"+1"* - зелёная ячейка, *-1* - красная ячейка.

5) На странице графического вывода пользователь также имеет следующие возможности:

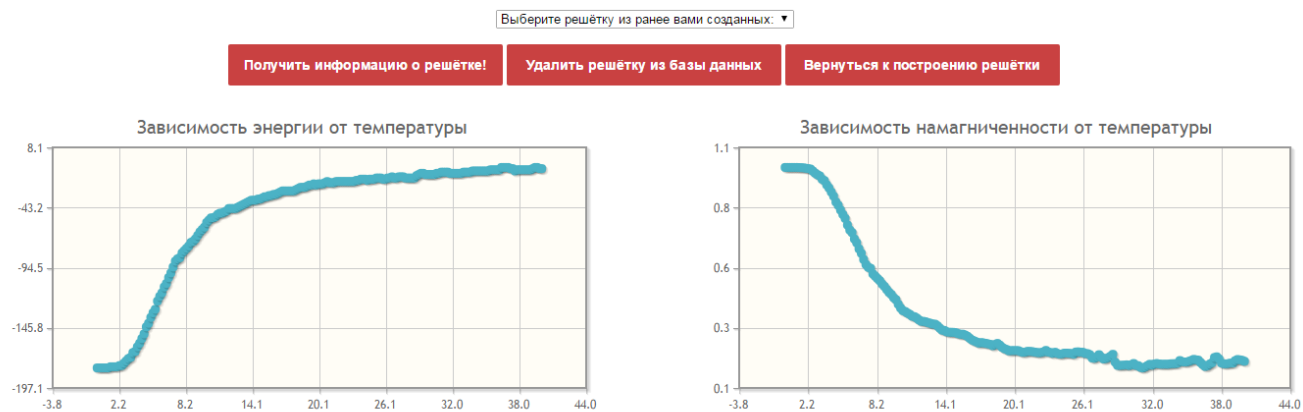
- получать данные о ранее созданных системах
- удалять эти данные
- вернуться к созданию новых систем

Результат работы

В результате получен Web-интерфейс, дающий возможность визуализировать фазовый переход второго рода в двумерных структурах.

К сожалению, полученная программа удобна лишь для моделирования фазового перехода второго рода в системах малых размеров при малых внешних полях. При увеличении размеров увеличивается время ожидания, однако результат в таком случае лучше коррелирует с теоретическим.

Также данная программа не адаптирована для большого числа объектов, так как на каждую созданную пользователем кристаллическую решётку приходится две таблицы в БД. Число этих таблиц может достигать нескольких тысяч, что влечёт за собой соответствующие проблемы.



Распределение спинов по узлам решётки:

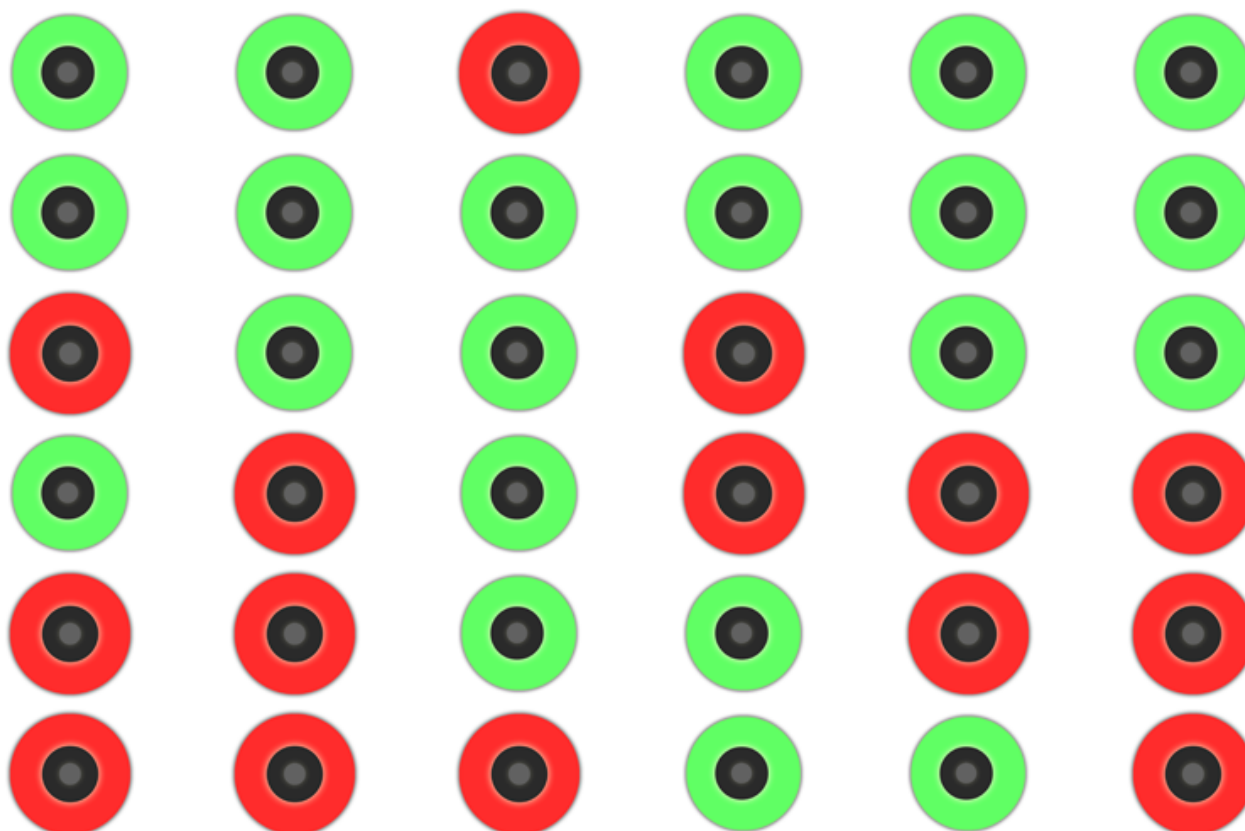


Рис. 2

Руководство по использованию программы

На первом этапе пользователь проходит регистрацию или идентификацию. Описываться этот процесс здесь не будет, так как эта процедура в наше время не представляет никаких сложностей.

По завершении инициализации пользователь выбирает размер кристаллической решётки и значение внешнего поля в относительных единицах.

После этого пользователь переходит на страницу результатов, где представлены зависимости энергии системы и ее намагниченности от температуры. Ниже графиков расположена кристаллическая решётка после конечного числа блужданий. Здесь красный круг отвечает значению спина в узле 1 , а зелёный круг - $+1$



Рис. 3