۹. شبیه سازی آنسامل کانونی NVT[۳۱]

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 آنسامبلی[۳۲] بدست آورد. احتمال حضور سیستمی که در تعادل ترمودینامیکی با یک منبع گرمایی به دمای T است در یکی از ریز حالت[۳۳] های آن با تابع احتمال بولتزمن[۳۴] داده میشود. فرض کنید نقطه‌ی در فضای فاز این سیستم را با $\vec{x}$ نشان دهیم. دراین صورت $\vec{x}$ 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. ۳ 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.

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

که در اینجا $\beta = 1/k_B T$ است که درآن $k_B = 1.38\times10^{-23}\ \mathrm{m^2 kg\, s^{-2} K^{-1}}$، ثابت بولتزمن است. انتگرال بر روی تمام فضای فاز سیستم، Ω، است. عبارت مخرج تابع پارش[۳۵] 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:

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

به این ترتیب متوسط گیری بالا به شکل آشنای

$$\langle A\rangle = \int_\Omega A(\vec{x})\, p(\vec{x})\, \mathrm{d}v$$

[31] Canonical ensemble
[32] Ensemble averaging
[33] Micro state
[34] Boltzmann
[35] 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.

۹,۱. استفاده از آلگوریتم 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 ها ی مورد نظر را در طی شبیه سازی ثابت نگه دارد. به طور مثال در آینده به شبیه سازی آنسامبل میکرو کانونی[۳۶]، NVE، خواهیم پرداخت و نشان میدهیم 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 آلگوریتم را به شکل زیر باز نویسی کنیم.

[36] Microcanonical ensemble

آلگوریتم متروپولیس برای آنسامبل NVT:

1. $\vec{x} = \vec{x}_0$
   "یک آرایش ابتدایی برای سیستم پیش نهاد میکنیم."
2. $\vec{y} = \vec{x} + \vec{R}$
   برداری کاتوره ای با حد اکثر طول برابر با طول قدم است. $\vec{R}$
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 می‌کنید، 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 نمیگنیم. در حقیقت نیازی به محاسبه ی ان نداریم. آن چیزی که نیاز مندیم نمونه هایی با تابع توزیع بولتزمن است، و برای بدست اوردن 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 مطمئنا انرژی را میتوانیم بدست اوریم. 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 خودِ 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 یکه کنیم که در نتیجه به جواب بدیهی $1 = 1$ میرسیم.

۹,۲.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 متغییر 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.

۹,۳. 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 درنقاط مختلف فضای فاز غیر صفر باشد.

۹,٤. 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 سیستم 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 آلگوریتم مرتبه آلگوریتم 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 کافیست که انرژی حالت قبل با ΔE جمع شود.

نکته ۱:

در خیلی از مسایل محاسبه ΔE کمی پیچیده است. در این گونه مسایل توصیه میشود که در مراحل دیباگ کردن کُد انرژی را از هر دو روش محاسبه کنید و در هر قدم با هم مقایسه کنید ودر 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.