

Таким образом, последовательное использование вариационного принципа в теории частичных функций распределения позволяет правильно описать и механизм возникновения фазовых переходов, и возможность существования метастабильных состояний.

Работа выполнена при поддержке Минобразования РФ, грант УР 01.01.002.

ЛИТЕРАТУРА

1. Керзон Хуанг. Статистическая механика. М., 1966. 520 с.
2. Мартынов Г. А.. Проблема фазовых переходов в статистической механике // УФН. Т. 169. № 6. 1999. С. 595-624.
3. Мюнстер А. Теория флуктуаций // Термодинамика необратимых процессов. М., 1962. С. 36-145.
4. Гейликман Б. Т. Статистическая теория фазовых превращений. М., 1954. 119 с.
5. Аринштейн Э. А. Многочастичные плотности // ТМФ. Т. 124. № 1. 2000. С. 136-147.
6. Аринштейн Э. А., Ганопольский Р. М. Многочастичные прямые корреляции // ТМФ. Т. 131. № 2. 2002. С. 278-287.

*Эдуард Абрамович АРИНШТЕЙН —
профессор кафедры моделирования
физических процессов и систем
физического факультета, доктор
физико-математических наук;
Михаил Яковлевич ФЛЯГИН —
доцент кафедры моделирования
физических процессов и систем,
кандидат физико-математических наук*

УДК 530.1

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СЛУЧАЙНЫХ СТРУКТУР

АННОТАЦИЯ. Рассмотрен метод численного моделирования случайной структуры с учетом взаимодействия ее элементов.

A method of stochastic structure numerical modeling is considered. Interaction of its elements is taken into account.

Распределение примесей или дефектов в кристалле, формирование залежей некоторых полезных ископаемых и ряд других аналогичных явлений можно рассматривать как образование случайных структур и моделировать соответствующим заполнением узлов некоторой решетки. Реальный процесс образования случайной структуры протекает через стадию диффузии атомов или иной нерегулярной миграции составляющих ее элементов, но и простейшая модель заполнения решетки путем случайного распределения заданного количества элементов по узлам может дать существенную информацию о свойствах этой структуры.

При моделировании случайной структуры используется генератор случайных чисел (ГСЧ) с постоянной плотностью распределения, входящий в стандартное программное обеспечение ПЭВМ. При размещении элементов в квадратной решетке на каждом шаге может быть использовано как одно случайное число, так и два таких числа. Для плоской квадратной решетки, содержащей N строк и N столбцов, выбор одной из N ячеек путем задания одного случайного числа можно осуществить, присвоив ячейкам первой строки номера от 1 до N , ячейкам второй строки номера от $N+1$ до $2N$, ..., ячейкам последней

строки номера от $N(N-1)+1$ до N^2 . При использовании двух случайных чисел первое из них определяет номер строки, второе — столбца. Аналогично можно построить процесс заполнения трехмерной кубической решетки. Каждая ячейка характеризуется размером, охватом диапазона генерируемых случайных чисел, ячейка заполняется, если случайное число (соответственно — числа) попадает в этот диапазон [1,2]. Рассмотрим методы учета взаимодействия элементов и определения характеристик случайной структуры, генерируемой на плоской квадратной решетке.

Учет взаимодействия

До начала испытаний размеры всех ячеек одинаковы, что обеспечивает одинаковую вероятность заполнения любой ячейки. После заполнения некоторой ячейки вероятность заполнения следующих ячеек должна быть изменена, что обеспечивается изменением их размеров. Простейший способ состоит в том, что при повторном выпадении той же ячейки испытание аннулируется. Это обеспечивает невозможность попадания в одну ячейку двух элементов, однако не учитывает взаимодействия элементов. Отталкивание элементов препятствует возникновению связанной структуры и не представляет интереса. Притяжение элементов может быть учтено следующим образом: при повторном попадании случайных чисел в уже заполненную ячейку заполняется та из соседних незаполненных ячеек, к которой ближе всего расположена случайная точка, выданная ГСЧ [3]. Для выполнения этой операции в программу вводится процедура определения расстояний от точки до всех соседних ячеек и их сравнения. Таким же образом вводится взаимодействие ближайших соседей в решетке. Если площади ячеек следующего слоя соседей не пересчитываются, то это соответствует отсутствию взаимодействия на этом расстоянии. Такой метод учета притяжения ближайших соседей требует минимального использования машинного времени. Усложнение схемы пересчета для учета более далеких взаимодействий потребует довольно значительного увеличения машинного времени. На последующих шагах возможно выпадение занятой ячейки, рядом с которой ячейки также заняты. В этом случае процедура передачи случайного числа в соседнюю ячейку состоит в изменении этого числа на размер ячейки, после чего процедура повторяется. Ясно, что при таком подходе вероятность роста кластера возрастает с увеличением его размера.

Определение параметров кластера

После заполнения решетки (при заданной концентрации элементов) заполненные ячейки образуют массив, обработка которого позволяет найти параметры структуры данной реализации. Усреднение параметров по ансамблю реализаций дает статистическую информацию о фрактальных свойствах случайных структур.

Каждый кластер образует замкнутую область решетки. Граница кластера находится путем обхода против часовой стрелки, начиная с первой занятой ячейки, встречаемой при сканировании решетки. Следующий кластер находится при сканировании решетки с исключенным первым кластером и аналогично следующие. Внутренняя область кластера также подвергается сканированию для обнаружения замкнутых пор, отделенных от границы одним (и более) слоем занятых ячеек. При обходе границы кластера возникают различные комбинации соседних занятых ячеек, например, возможно возвращение к уже пройденной ячейке по замкнутой петле. Граничные ячейки каждого типа образуют отдельный массив. Итогом такого обхода будут параметры, позволяющие определить фрактальные свойства кластера: длину внешней и внутренней (при наличии пор) границы, его площадь, диаметр (максимальное расстояние между граничными ячейками). Каждое испытание дает массив данных по кластерам, возникшим при этом испытании. Статистическая обработка достаточного количества испытаний позволит определить зависимость фрактальных параметров от концентрации и их изменение при учете взаимодействия. Известные по литературе испытания такого типа проводились без учета взаимодействия элементов. Учет этого взаимодействия позволяет оценить более реалистическую (хоть и не вполне адекватную) модель случайной структуры.

ЛИТЕРАТУРА

1. Хеерман Д. В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. М., 1990. 175 с.
2. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. М., 1990. Т. 1. 349 с. Т. 2. 396 с.
3. Аринштейн Э. А., Пилипенко В. А., Шабаета Н. И., Флягин М. Я. Оценка фрактальной размерности неупорядоченной двумерной структуры // Тез. докл. XV Международной конф. «Математические методы в технике и технологиях». Тамбов, 2002.

Эдуард Абрамович АРИНШТЕЙН — профессор кафедры моделирования физических процессов и систем физического факультета, доктор физико-математических наук;
Владимир Евгеньевич ВЕРШИНИН — старший преподаватель кафедры моделирования физических процессов и систем

УДК 536.75

РАСЧЕТ ОПЕРАТОРА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ПРЕДСТАВЛЕНИИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ОДНОМЕРНОМ СЛУЧАЕ

АННОТАЦИЯ. Показано, что матричные элементы одномерного потенциала в температурном представлении взаимодействия определяются преобразованием Лапласа его координатного представления.

It is shown, that the matrix elements of one-dimensional potential in temperature representation of interaction are defined by Laplas transformation of its coordinate representation.

При описании квантовых систем вся информация о равновесном состоянии содержится в матрице плотности $\rho = e^{-\beta(H_0 + V)}$ либо в связанном с нею операторе температурного рассеяния Мацубары $S = e^{\beta H_0} e^{-\beta(H_0 + V)}$ [1]. К сожалению, в силу того, что операторы $\hat{H}_0 = \sum \frac{\hat{p}_i^2}{2m}$ и \hat{V} взаимодействия не коммутируют между собой и с другими операторами, воспользоваться исходными выражениями для нахождения статистической суммы и термодинамических величин практически невозможно. Этот факт выводит на первое место проблему приближенного вычисления операторов $\hat{\rho}$ и \hat{S} и придания им удобного для расчетов вида. Одним из путей решения указанной задачи является замена дифференциального оператора интегральным. Дифференцирование по обратной температуре приводит к хорошо известному уравнению Блоха для оператора Мацубары:

$$\frac{\partial \hat{S}}{\partial \beta} = -\hat{V}(\beta) \cdot \hat{S}, \quad \hat{S}(0) = 1, \quad (1)$$