



الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي



رقم الترتيب:

رقم التسلسل:

جامعة الشهيد حمه لخضر بالوادي

كلية العلوم الدقيقة

قسم: الفيزياء

مذكرة تخرج لنيل شهادة

ماستر أكاديمي

مجال: علوم المادة

تخصص: فيزياء تطبيقية إشعاعات و طاقة

من إعداد: خنوفه نورالدين

غومة حنان

الموضوع

مونتي كارلو التكامل على المسار للهزازات الكمية

نوقشت يوم: 2024/06/23

أمام لجنة المناقشة المكونة من الأساتذة

رئيس	أستاذ تعليم عالي	أ.د. ضو جمال
مناقشة	أستاذ مساعد أ	أ. سوداني شيرين
مؤطر	أستاذ محاضر ب	د. احميم رشيد
مدعو	أستاذ محاضر ب	د. بسر الزبير

الموسم الجامعي 2024/2023

تنطوي طريقة مونت كارلو على عدة خوارزميات تعتمد كلها على دراسة المسائل من خلال إستعمال المعاينة العشوائية. ومن أهم أوجه كفاءتها هي قدرتها على حساب التكاملات المعقدة متعددة الأبعاد وكذلك محاكاة نماذج لأنظمة معقدة قصد إستنباط عديد الكميات الفيزيائية من خلال متوسط العينة. في هذه المذكرة سنكتشف استخدام طريقة مونت كارلو ومزاياها في محاكاة النظم المعقدة التي تحكمها قوانين الفيزياء الاحصائية، واخترنا لهذا الغرض نموذج أيزينغ لتمثيل تفاعل العزوم المغناطيسية للذرات المتجاورة ونموذج الهزازات الكمية الذي يدرسها بإستعمال أسلوب التكامل على المسار لفاينمان، حيث سنركز في دراستنا على مراقبة جودة هذه الطريقة في التقريب بمقارنة نتائجها مع القيم المتحصل عليها تحليليا إن وجدت.

في النموذجين سابقى الذكر سوف نستعمل خوارزمية ميتروبوليس كأحد أنواع طريقة مونت كارلو لحساب وقياس مختلف الكميات الفيزيائية، حيث سنرى أن قيم هذه الاخيرة تقارب نظيراتها تحليليا وهو ما يفتح الباب لتطبيقات مستقبلية لتطبيق هذه الطريقة بشكل أوسع على مختلف الأنظمة الكمية.

الكلمات المفتاحية: التكامل على المسار، المنتشر، الهزاز الكمي التوافقي، الهزاز الكمي غير التوافقي، المعاينة الموجهة.

Abstract:

The Monte Carlo method involves several algorithms that all rely on studying problems through the use of random sampling. One of its most significant advantages is its ability to calculate complex multi-dimensional integrals and simulate models of complex systems to derive many physical quantities through sample averages. In this paper, we will explore the use of the Monte Carlo method and its advantages in simulating complex systems governed by the laws of statistical physics. For this purpose, we have chosen the Ising model which represent the interaction of magnetic moments of neighboring atoms, and the quantum oscillators model, which is studied using Feynman's path integral. Our study will focus on monitoring the accuracy of this method in approximation by comparing the results with analytically obtained values when it's possible.

In the aforementioned models, we will use the Metropolis algorithm, a type of Monte Carlo method, to calculate and measure various physical quantities. We will see that the values obtained are close to their analytical counterparts, which opens the door to future prospects for applying this method more broadly to various quantum systems.

Keyword: path integral, Propagator, harmonic oscillator, Anharmonic oscillator, Importance sampling.

إهداء

فهدي هذا العمل إلى:

والدينا الكريمين أطال الله في عمر الأحياء منهم وخفف ورسم اللاموات

إلى كل إخوتنا وأخواتنا الأحباء

إلى كل أفراد العائلة والأقارب

إلى كل الأصدقاء والنزلاء والنزيلات الذين فارقهم العين ولم يفارقهم الوجدان

إلى كل من حملني حمرا أسألتنا الكرماء .

حنيفة نور الدين، غومة حنا

شكر وعرفان

قال اللهم تعال بعدد يسع الله الرحماء الرحيم ﴿قُلْ إِذَا صَلَّيْتُمْ وَقُمْتُمْ لِرَبِّكُمْ فَاعْلَمُوا أَنَّكُمْ كَانْتُمْ لِلَّهِ كَانُفُوتًا﴾، فالحمد لله
الذي هدانا لهذا وما كنا لنهتدي لولا أن هدانا الله والصلوة والسلام على رسوله الكريم معلم الانام، بدراية شكر
الله عز وجل على أن سهل لنا طريقا من طرق العلم والتعلم وأكرمنا بإتمام هذا العمل المتواضع الذي فرجه من الله أن
ينفع به الطلبة ومن أهتم بموضوعه، كما لا يفوتنا أن نقدر بشكرنا لك من ساهم فيه، على رأسهم المتصرف على إنجاز
هذا العمل الدكتور المصطفى رشيد وعلى بذله جهدا كبيرا في توجيهنا للاختيار الأفضل وتخصيص وقت طويل في نقل
المعارف إلينا راجين من الله أن يجازيه علينا خيرا الجزاء ويردعه ذخرنا للعلم وطلبته. كما لا يفوتنا أن نقدر باسمي
عبارا عن الشكر والتقدير لك من الدكتور بسرا الزبير والدكتور سوادني شيرين على إهتمامهما بنا وتقديرهم
الإجابات والتوضيحات لجميع تساؤلاتنا. ودون أن ننسى الأعضاء الملتزمين في مقدمتهم رئيسه البروفيسور ضومال كما
توجه بكامل الشكر لك من علمونا في جامعة عمه نخضر وعلى القائمين عليها وعلى كلية العلوم الرفيعة، ونخص بالذكر
البروفيسور رمومة فرحات على توجيهاته المنهجية هذا العمل والخروج بأفضل صورة ممكنة له، والشكر الخاص للأب
الروحي لفرح الفيزياء على نصائحه القيمة القائمة البروفيسور سعد الله إبراهيم.

فهرس المحتويات

VI	قائمة الاشكال
VII	قائمة المصطلحات العلمية
2	المقدمة
5	1 الفصل الأول: طريقة مونتي كارلو
5	1.1 تمهيد
5	1.1.1 تعريف طريقة مونتي كارلو
5	2.1.1 تطبيقات طريقة مونتي كارلو
6	3.1.1 الخطوات العامة لطريقة مونتي كارلو
6	4.1.1 استخدام طريقة مونتي كارلو في تقدير التكاملات في بعد واحد
7	5.1.1 أنواع المعاينات في طريقة مونتي كارلو
11	2.1 سلاسل ماركوف
12	3.1 خوارزمية ميتروبوليس
14	1.3.1 الخطوات العامة في خوارزمية ميتروبوليس
16	2 الفصل الثاني: طريقة مونتي كارلو على نموذج أيزينغ
16	1.2 تمهيد
16	2.2 المجموعات الإحصائية
17	1.2.2 المجموعة القانونية
20	2.2.2 تحديد الكميات الترموديناميكية المختلفة للنظام
22	3.2 الانتقالات الطورية
22	1.3.2 مفهوم الإنتقالات الطورية
22	2.3.2 معامل الترتيب
23	3.3.2 الإنتقال الفيرومغناطيسي - بارامغناطيسي
24	4.2 المحاكاة العددية لظاهرة المغنطة الحديدية من خلال نموذج أيزينغ
24	1.4.2 وصف نموذج أيزينغ
27	2.4.2 حساب الكميات الفيزيائية في نموذج أيزينغ
29	3.4.2 خوارزمية ميتروبوليس على نموذج أيزينغ
34	4.4.2 نتائج محاكاة نموذج أيزينغ
37	3 الفصل الثالث: التكامل على المسار في نموذج الهزازات الكمية
37	1.3 تمهيد
37	2.3 التكامل على المسار
37	1.2.3 علاقة التكامل على المسار بالتصور التقليدي لميكانيك الكم
38	2.2.3 تكامل فاينمان لميكانيك الكم غير النسبي

40.....	3.3 تحضير التكامل على المسار للمحاكاة العددية
40.....	1.3.3 ربط التكامل على المسار بالإحصاء
40.....	2.3.3 تقطيع المنتشر
42.....	4.3 المحاكاة العددية لنموذج الهزازات الكمية (التوافقية وغير التوافقية)
42.....	1.4.3 وصف النموذج
43.....	2.4.3 المتغيرات بدون أبعاد
43.....	3.4.3 حساب الكميات الفيزيائية في النموذج
46.....	4.4.3 التوازن الحراري
47.....	5.4.3 خوارزمية ميتروبوليس على نموذج الهزازات الكمية:
52.....	6.4.3 نتائج محاكاة نموذج الهزازات الكمية
63.....	الخاتمة
65.....	المراجع

رقم الصفحة	عنوان الشكل	الشكل
10	تغيرات الدالة $f(x)$ في المجال $[0, \pi]$.	(1.1)
10	تغيرات الدالتين f و m على المجال $[0, \pi]$.	(2.1)
11	تغيرات الدوال f و m و f/ρ على المجال $[0, \pi]$.	(3.1)
18	نظام مغمور في خزان حراري.	(1.2)
23	منحنى الكثافة لانتقال الطور.	(2.2)
24	مخطط الانتقال الطوري لمادة فيرومغناطيسية.	(3.2)
25	تمثيل تموضع السبينات في شبكة ذات بعدين $(7*7)$.	(4.2)
25	تمثيل تموضع السبينات في شبكة ذات بعدين $(7*7)$ تأخذ أحد القيمتين $s_i = \pm 1$.	(5.2)
25	الجوار الأول لسبين في بعدين.	(6.2)
26	الجوار الأول لسبين في ثلاثة أبعاد.	(7.2)
28	تغيرات متوسط المغنطة بدلالة T .	(8.2)
35	نتائج محاكاة نموذج أيزينغ من أجل شبكة $(32*32)$.	(9.2)
39	تمثيل أحد المسارات كمنحنى منحرج.	(1.3)
43	دالة الموجة للهزاز التوافقي عند مستويات مختلفة للطاقة.	(2.3)
52	تغيرات معدل قبول الخوارزمية بدلالة قيم الخطوة القصوى من أجل عدة متغيرات للهزاز توافقي.	(3.3)
53	تغيرات معدل قبول الخوارزمية بدلالة قيم الخطوة القصوى من أجل عدة متغيرات للهزاز غير توافقي.	(4.3)
53	خطوات مونتني كارلو لبلوغ حالة التوازن من أجل عدة متغيرات حيث الخطوة القصوى عند 0.2.	(5.3)
54	خطوات مونتني كارلو لبلوغ حالة التوازن من أجل عدة متغيرات حيث الخطوة القصوى عند 1.	(6.3)
55	نتائج محاكاة نموذج هزاز كمي توافقي. من اجل خطوة قصوى قدرها 1.	(7.3)
56	نتائج محاكاة نموذج هزاز كمي توافقي من اجل خطوة قصوى قدرها 0.25.	(8.3)
57	نتائج محاكاة نموذج هزاز كمي توافقي من اجل خطوة قصوى قدرها 1.3.	(9.3)
57	نتائج محاكاة نموذج هزاز كمي توافقي من اجل خطوة قصوى قدرها 2.	(10.3)
58	نتائج محاكاة نموذج هزاز كمي غير التوافقي.	(11.3)
58	تغيرات دالة الكمون بدلالة الموضع بدون أبعاد.	(12.3)
59	تغيرات دالة الترابط في مرحلة التوازن بين المسارين X_i و X_{i+1} .	(13.3)
60	تغيرات دالة الترابط في مرحلة التوازن بين المسارين X_i و X_{i*100} .	(14.3)
60	نتائج محاكاة نموذج هزاز كمي توافقي من اجل قيمة ترابط عالية.	(15.3)
61	نتائج محاكاة نموذج هزاز كمي توافقي من اجل قيمة ترابط شبه معدومة.	(16.3)

قائمة المصطلحات العلمية:

Simple sampling	معاينة بسيطة
Importance sampling	المعاينة الموجهة
Heat reservoir	خزان حراري
Partition function	دالة التجزئة
Quantum states	الحالات الكمية
Lattice	شبكة
Ferro-magnetization	المغنطة الحديدية
Anti ferro-magnetization	ضد المغنطة الحديدية
Spontaneous magnetization	المغنطة التلقائية
Initial state	الحالة الأولية
Path integral	التكامل على المسار
Propagator	المنتشر
Feynman kernel	نواة فاينمان
The Minkowski time	زمن مينكوفيسكي
The Euclidean time	الزمن الإقليدي
Discretization	التقسيم
Dimensionless	بلا أبعاد
Thermalization	التوازن الحراري
Phase space	فضاء الطور
Phases transitions	التحولات الطورية
Magnetic domains	المجالات المغناطيسية
Ordre parameter	وسيط الترتيب
Path	مسار
Output	مخرجات
Input	مدخلات
Master equation	المعادلة الأساسية
Cold start	الإنطلاقة الباردة
Hot start	الإنطلاقة الساخنة
Acceptance rate	معدل القبول
Metropolis time	زمن ميتروبوليس
Monte Carlo time	زمن مونتي كارلو

المقرمة العامة

المقدمة:

ميكانيك الكم كما صاغها شرودينغر وهايزنبرغ وآخرون في عشرينات القرن الماضي، تعتمد على معادلتى شرودينغر وهايزنبرغ [17]. في عام 1930، اقترح ديراك نهجا آخر لميكانيك الكم يعتمد على اللاغرانجى، وهو أن سعة الانتقال في ميكانيك الكم، تتوافق مع الكمية $\exp\left(\frac{iS}{\hbar}\right)$ [13]، حيث S هو الفعل الكلاسيكى الذي يُقِيم على المسار الذي يسلكه الجسيم.

في عام 1948، قام فاينمان بتوسيع أفكار ديراك وصاغ ميكانيكا الكم بناءً على كل المسارات بين الحالات الابتدائية والنهائية. حيث أنه يساهم كل مسار بالوزن $\exp\left(\frac{iS}{\hbar}\right)$ في عبارة المنتشر، كما اقترح ديراك، حيث يتم دمج سعات المسارات وفقا للإجراءات المعتادة في ميكانيك الكم لتراكم السعات، نظراً لأن جمع المسارات يكون عادةً تكاملاً على استمرار المسارات، فإن هذا الإجراء يُعرف الآن باسم طريقة التكامل على مسار.

وفر التكامل على مسار إطاراً جيداً لتفسير عديد جوانب ميكانيكا الكم، فالخاصية الأساسية له هي إستعمال بعض المفاهيم الكلاسيكية للتعبير عن المفاهيم الكمية، فالتكامل على مسار هو تعبير صريح عن سعة الاحتمال، حيث يعتمد الحساب الفعلى لهذه السعات على المسألة محل الاهتمام [3]، في حالات نادرة، مثل الهزاز التوافقى، يمكن تقييم التكامل على مسار بدقة، ولكن عادة ما يتم البحث على حل تقريبي أو إستعمال نظرية الاضطراب، ومع ذلك، هناك حالات تكون فيها الحلول التقريبية غير فعالة. من بين الأمثلة الأكثر شهرة هي الديناميكا اللونية الكمومية، (QCD) [13] وهي النظرية السائدة للمادة الهادرونية وأحد مكونات النموذج القياسى لفيزياء الجسيمات، في المسائل التي يكون فيها ثابت الاقتران صغيراً، تكون الحسابات المستندة إلى نظرية الاضطراب ناجحة. في حين أنه إذا كان ثابت الاقتران غير صغير فإن نظرية الاضطراب تفشل في مثل هذه الحالات، ويلزم اتباع نهج بديل. في هذه الحالة، يوفر QCD على الشبكة، الذي يتم فيه تقدير النظرية الأصلية على شبكة زمان-مكان، إطاراً للتقييم العددي غير الاضطرابي للسعات وعناصر المصفوفة. أحد أهم الطرق في النهج العددي هي طريقة مونتي كارلو التي تعتمد على سلاسل ماركوف، والتي هي موضوع المذكرة.

في هذه المذكرة سنركز على دراسة نموذجين بطريقة مونتي كارلو العددية، الأول يتمثل في نموذج أيزينغ كخطوة تمهيدية لتسهيل الفهم، والثاني هو نموذج الهزازات الكمية بأسلوب مونتي كارلو التكامل على المسار (PIMC) [4]. وسنناقش التساؤل على ماهية هذه الطريقة وآلية محاكاة الأنظمة الكمية من خلالها؟ وكيف يتم الربط بين الصياغة التحليلية لتكامل على المسار والطريقة العددية؟ وما مقدار نجاح مونتي كارلو في إيجاد الحلول الدقيقة؟ وللوصول إلى إجابة على هذا الإشكال فسنتبّع الخطوات التالية في مذكرتنا:

بداية من المقدمة سنستعرض نظرة عامة عن موضوع المذكرة، وطرح الإشكال المراد حله والوصول الى إجابات له. ثم نستطرد في ثلاثة فصول تحوي الخطوات المتبّعة في دراستنا.

الفصل الأول يحوي الإطار النظري والرياضي لطريقة مونتي كارلو مع أمثلة توضيحية.

الفصل الثّاني نبيّن فيه كيفية تطبيق هذه الطريقة لفهم ظاهرة الفيرومغناطيسية من خلال محاكاة نموذج ايزينغ حيث سنندرج تحت عناوين هذا الفصل من المفهوم النظري للنموذج إلى غاية المحاكاة العددية له، ويعتبر هذا الفصل تمهيدا لفصل ثالث أكثر تعقيد.

الفصل الثالث تتم فيه دراسة نموذج الهزازات الكمية بإسلوب مونتي كارلو التكامل على المسار، وسنندرج ضمن عناوينه من سرد الصيغة التحليلية لتكامل على المسار إلى التطبيق العددي لهذا الأسلوب من خلال المحاكاة بطريقة مونتي كارلو.

وفي كل من الفصلين الثاني والثالث سوف ننهي الدراسة بالنتائج التي تحصلنا عليها من المحاكاة العددية ونحاول مقارنتها بمثيلاتها المتحصل عليها بالطرق التحليلية.

وأخيرا ننهي بحثنا بخاتمة نحوصل فيها نتائج هذا البحث ونقدم خلاصة عامة للعمل.

الفصل الأول

طريقة مونتسي كالمو

1 الفصل الأول: طريقة مونت كارلو

1.1 تمهيد:

تعد الطرق العددية من أحد أبرز الأدوات المستعملة في مجالات متعددة من العلوم، خاصة منها الرياضية والفيزيائية، الهدف منها هو إيجاد حلول تقريبية لمسائل يصعب حلها عادة بالطرق التحليلية الجبرية المعتادة، كمثل على ذلك إيجاد حلول للمعادلات التفاضلية غير الخطية أو تقدير قيمة التكاملات المعقدة خاصة التي تكون في أبعاد عديدة... الخ، كما تستخدم هاته الطرق في فهم سلوك وتصرف الأنظمة متعددة الجسيمات، من خلال وضع نماذج للظواهر التي تتجلى من التفاعلات البينة لجسيمات هاته الأنظمة ومن ثمة محاكاتها حاسوبيا باستخدام هاته الطرق لمحاولة تعميق فهمنا لها وإستنباط الكميات الفيزيائية المراد قياسها.

من أهم هاته الطرق العددية طريقة مونت كارلو التي تعتمد على سلاسل ماركوف (MCMC) والتي تشمل عدة خوارزميات من بينها خوارزمية ميتروبوليس هاستين والهايبريد مونت كارلو (HMC) وتدعى أيضا بالهاميلتونيون مونت كارلو.

1.1.1 تعريف طريقة مونت كارلو:

تعتبر طريقة مونت كارلو تقنية حسابية قوية جدا لها استخدامات عديدة لحل المشكلات الرياضية المعقدة. حيث سميت على إسم كازينو مونت كارلو الشهير في مدينة موناكو، والذي يعتبر من أشهر مواقع الجذب السياحي في موناكو لأن الأسلوب يشترك في نفس السمة العشوائية الموجودة في لعبة الروليت. وتعرف على أنها طريقة إحصائية يتم إستخدامها لتقدير حل مشكلة ما عن طريق توليد عينات عشوائية من خلال إستخدام الأعداد العشوائية ونظرية الإحتمالات [1,18,19].

2.1.1 تطبيقات طريقة مونت كارلو:

تحتوي طريقة مونت كارلو على مجموعة واسعة من التطبيقات في مختلف المجالات مثل المالية والفيزياء والهندسة وعلوم الحاسوب نذكر منها:

- **المالية:** حيث يتم استخدامها لمحاكاة سلوك الأصول المالية مثل الأسهم والسندات كما تُستخدم هذه التقنية لتقدير القيمة المستقبلية للاستثمار عن طريق إنشاء سيناريوهات عشوائية للسوق.
- **الفيزياء:** تُستخدم طريقة مونت كارلو لمحاكاة سلوك الجسيمات في نظام ما لتقدير سلوك الذرات والجزيئات فيه.
- **الهندسة:** تُستخدم لمحاكاة سلوك الأنظمة المعقدة مثل المباني والجسور حيث تستخدم هذه التقنية لتقدير سلوك الهيكل في ظل ظروف مختلفة مثل الرياح والزلازل.
- **علوم الحاسوب:** تُستخدم طريقة مونت كارلو لتقدير أداء الخوارزميات المختلفة من خلال تقدير وقت تشغيل الخوارزمية عن طريق توليد مدخلات عشوائية.

3.1.1 الخطوات العامة لطريقة مونت كارلو:

1. تحديد المشكلة وتحديد المتغيرات: الخطوة الأولى في إجراء محاكاة مونت كارلو هي تحديد المشكلة التي تريد حلها بوضوح وتحديد المتغيرات المعنية، ومن الضروري تحديد نطاق وتوزيع كل متغير بدقة لضمان أن المحاكاة تنتج نتائج ذات معنى.
2. توليد قيم عشوائية للمتغيرات: بمجرد تحديد المتغيرات، فإن الخطوة التالية هي إنشاء قيم عشوائية لكل منها، ويجب أن يعتمد نطاق هذه القيم وتوزيعها على البيانات التاريخية أو آراء الخبراء أو أي معلومات أخرى متاحة ذات صلة.
3. إجراء المحاكاة: مع القيم العشوائية التي تم إنشاؤها، يمكن الآن تشغيل محاكاة مونت كارلو، يتضمن ذلك أخذ عينات متكررة من قيم المتغيرات وتقييم نتيجة المشكلة التي حددتها. يمثل كل تشغيل للمحاكاة سيناريو محتمل قد يحدث.
4. تحليل النتائج وتفسيرها: بمجرد إكمال المحاكاة، من المهم تحليل النتائج وتفسيرها، حيث يتضمن ذلك فحص توزيع النتائج، وتحديد مؤشرات الأداء الرئيسية، وتقييم مستوى عدم اليقين في النموذج الخاص بك [18,19].

4.1.1 استخدام طريقة مونت كارلو في تقدير التكاملات في بعد واحد:

من أبسط الأمثلة على استعمال طريقة مونت كارلو هي تقدير التكاملات في بعد واحد من خلال المعاينة البسيطة لدالة $f(x)$ عند N نقطة x_i مأخوذة بشكل عشوائي، ثم يتم أخذ متوسط قيم الدالة عند نقاط المعاينة المولدة:

لنفرض انه لدينا التكامل التالي:

$$F = \int_a^b f(x) dx \quad (1.1)$$

نريد حسابه بطريقة مونت كارلو من خلال المعاينة البسيطة، حيث أنه يتم توليد N نقطة عشوائية ذات القيمة x_i بتوزيع منتظم فيكون احتمال مساهمتها في التكامل ($w_i = 1$) إذا كانت داخل مجال المكاملة $[a, b]$ ، وإحتمال مساهمتها في التكامل ($w_i = 0$) إذا كانت خارج المجال. ومن ثم نستبدل التكامل بالجمع على قيم الدالة عند كل نقطة مولدة بشكل عشوائي فتكون القيمة التقديرية لتكامل كالتالي [16,1]:

$$F = \int_a^b f(x) dx = \frac{(b-a)}{N} \sum_{i=1}^N w_i f(x_i) \quad (2.1)$$

$$F = (b-a) \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w_i f(x_i) \right] = (b-a) \langle f \rangle \quad (3.1)$$

يمكن توليد N نقطة عشوائية x_i مباشرة داخل المجال $[a, b]$ حيث تكون $w_i = 1$ ويكون التكامل مباشرة من الشكل:

$$F = \int_a^b f(x) dx = \frac{(b-a)}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) = (b-a) \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \right] \quad (4.1)$$

$$= (b-a)\langle f \rangle$$

تسمى هذه الطريقة بطريقة متوسط العينة.

ويمكن تعميمها بالنسبة للتكاملات ذات أبعاد عديدة عبر الجمع على حجم التكامل V :

$$F = \int_V dx_1 dx_2 \cdots dx_n f(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (5.1)$$

$$= \frac{V}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i^1, x_i^2, \dots, x_i^n) H(x_i^1, x_i^2, \dots, x_i^n)$$

حيث أن:

$$\begin{cases} H(x_i^1, x_i^2, \dots, x_i^n) = 1 & \Leftarrow (x_i^1, x_i^2, \dots, x_i^n) \in V \\ H(x_i^1, x_i^2, \dots, x_i^n) = 0 & \Leftarrow (x_i^1, x_i^2, \dots, x_i^n) \notin V \end{cases}$$

5.1.1 أنواع المعاينات في طريقة مونت كارلو:

المفهوم العام للمعاينة هو طريقة إختيار جزء من المجتمع الإحصائي الكبير جدا حتى يقوم الباحث بدراسته وتحليله وإستنباط الكميات المراد قياسها من خلاله، وهي تقسم لعدة أنواع هي:

- 1- المعاينة العشوائية البسيطة
- 2- المعاينة الطبقيّة العشوائية
- 3- المعاينة المنتظمة
- 4- المعاينة متعددة المراحل (المعاينة العنقودية)
- 5- المعاينة القصدية (أو المعاينة الموجهة)

نهتم في هاته المذكرة بنوعين أساسيين لكثرة إستخدامهما في طريقة مونت كارلو لمعالجة الظواهر الفيزيائية المختلفة:

✓ المعاينة العشوائية البسيطة: وهي أبسط أنواع العينات ويتم إختيار أفرادها بطريقة عشوائية وغير مقصودة وتستخدم عندما يكون المجتمع متجانسا بالنسبة للغرض المطلوب أو الخاصية التي تتعلق بالدراسة، كمثال نذكر توليد النقاط العشوائية الداخلة في حساب التكاملات البسيطة في بعد واحد الموضحة في العنوان السابق حيث أن هاته النقاط لها نفس المساهمة في تقدير التكامل دون تفضيل مجموعة على أخرى.

✓ المعاينة القصدية (أو الموجهة): تعتمد على العينات الشبه عشوائية والتي يتم إختيارها بصورة متعمدة ومقصودة من قبل الباحث لتلبية إحتياجات بحثه.
وتقسم إلى:

العيينة المقصودة: - وهي العينة التي يتم إختيارها في حالة المجتمعات المتجانسة حيث يختار الباحث المفردات بطريقة مقصودة.

العيينة الحصصية: - وهي نفس العينات المستخدمة في المعاينة الطبقيّة العشوائية حيث يتم إختيارها في حالة المجتمعات الغير متجانسة التي تكون مكونة من طبقات مختلفة، الفرق الوحيد أن الباحث عند تقسيمه للمجتمع الاحصائي إلى طبقات يكون إختياره للعينات ضمن كل طبقة بطريقة مقصودة وغير عشوائية [19,18].

كمثال على المعاينة القصدية والمغزى من إستعمالها في طريقة مونتى كارلو سوف نحاول بنفس الطريقة تقدير التكامل السابق المبين في المعادلة (1.1) لكن نعتبر في هاته الحالة أن الدالة ضيقة عند فترات معينة ضمن المجال $[a,b]$ بمعنى أن النقاط التي لديها مساهمة كبيرة في قيمة التكامل تكون موزعة بشكل غير منتظم على طول مجال المكاملة $[a,b]$ [16,4].

فعند حسابنا لقيمة الإنحراف Var في المثال السابق لمعرفة مدى دقة النتيجة للطريقة المستخدمة ومدى إنحرافنا على القيمة الحقيقية نجد أن [16,4]:

$$Var = \sigma^2 = \left\langle \left(\frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^N f_i \right)^2 \right\rangle - \left(\left\langle \frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^N f_i \right\rangle \right)^2 \quad (6.1)$$

$$\sigma^2 = \frac{(b-a)^2}{N} \left[\left\langle \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i \right)^2 \right\rangle - \left(\left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i \right\rangle \right)^2 \right] \quad (7.1)$$

$$\sigma^2 = \frac{(b-a)^2}{N} (\overline{f^2} - \bar{f}^2) \quad (8.1)$$

من خلال ما سبق نلاحظ أن الإنحراف يتناسب عكسا مع العدد الكلي لنقاط المعايرة العشوائية أي:

$$Var \propto \frac{1}{N}$$

حيث أنه كلما زدنا في نقاط المعايرة كلما كانت القيمة التقديرية لتكامل عن طريق مونتى كارلو أكثر دقة بشرط أن هاته النقاط المولدة تساهم بشكل متجانس في قيمة التكامل (بمعنى أن قيم الدالة عند جميع النقاط تكون ذات توزيع منتظم). [16,1]

لكن عندما تكون الدالة f ضيقة عند فترات معينة في المجال الذي نريد حساب التكامل عليه، يكون عدد النقاط المولدة بشكل عشوائي والتي لديها مساهمة ضئيلة في قيمة التكامل كبير، مما يزيد في نسبة الخطأ لأننا نعتمد على متوسط قيم الدالة عند كل النقاط، لتصحيح هذا نقوم بتوجيه نقاط المعايرة وفق توزيع معين $\rho(x)$ حتى تكون عدد النقاط التي لديها مساهمة معتبرة في التكامل أكبر ما يمكن وبالتالي تقل نسبة الخطأ، حيث أنه من الضروري أن يحقق هذا التوزيع [16]:

✓ أولاً شرط المعايرة على المجال $[a, b]$.

$$\int_a^b \rho(x) dx = 1, \quad \rho(x) > 0 \quad \forall x \in [a, b] \quad (9.1)$$

✓ ثانياً يكون هذا التوزيع ρ مشابه الى حد ما الدالة f بحيث تكون النسبة (f/ρ) شبه ثابتة أو بمعنى أدق تغييرها يكون متجانس (بطيء) خلال كل مجال المكاملة، هكذا يمكن كتابة التكامل على هذا النحو:

$$\int_a^b dx f(x) = \int_a^b dx \rho(x) \left[\frac{f(x)}{\rho(x)} \right] \quad (10.1)$$

حيث أن:

1. الدالة الجديدة $\left[\frac{f(x)}{\rho(x)} \right]$ تكون متجانسة (بطيئة التغير على كامل مجال المكاملة $[a, b]$).
2. وتمثل القيمة $\rho(x)$ الوزن الإحتمالي للنقاط المولدة بشكل عشوائي، بمعنى اخر أنه يمكننا توليد نقاط عشوائية وفق التوزيع ρ لتقييم التكامل.

ومن ثمة يمكن تقدير التكامل بالشكل التالي:

$$F_N = \frac{(b-a)}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f(x_i)}{\rho(x_i)} \quad (11.1)$$

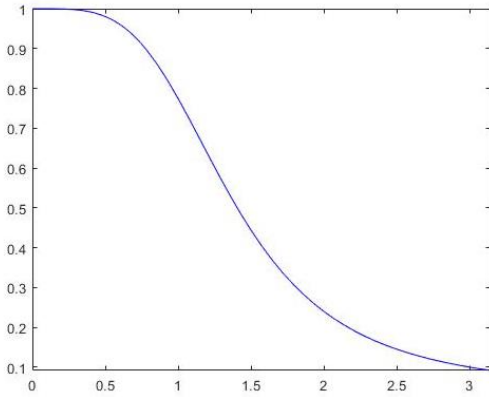
لتقريب الفكرة أكثر سوف نعتبر المثال العددي التالي:

نعتبر الدالة $f(x)$ حيث:

$$f(x) = \frac{1}{x^2 + \cos^2(x)} \quad (12.1)$$

نريد تقييم تكامل الدالة f على المجال $[0, \pi]$ حيث:

$$I = \int_0^{\pi} f(x) dx = \int_0^{\pi} \frac{1}{x^2 + \cos^2(x)} dx \quad (13.1)$$



الشكل (1.1): تغيرات الدالة $f(x)$ في المجال $[0, \pi]$.

عند رسم المنحنى البياني لدالة على مجال المكاملة الشكل (1.1)، نجد أن النقاط التي سيتم توليدها داخل المجال $[0, \pi]$ تنقسم إلى قسمين تقريبا، قسم يساهم بشكل كبير في قيمة التكامل يكون ضمن المجال $[0, 1.5]$ ، وقسم لا يساهم بشكل كبير في قيمة التكامل يكون ضمن المجال $[1.5, \pi]$. وبما أن طريقة مونت كارلو تعتمد على متوسط قيم الدالة عند النقاط المولد فحتما ستكون النتيجة بعيدة نوعا ما على القيمة الحقيقية، لذلك سنلجأ لتعريف دالة أخرى $\rho(x)$ حيث:

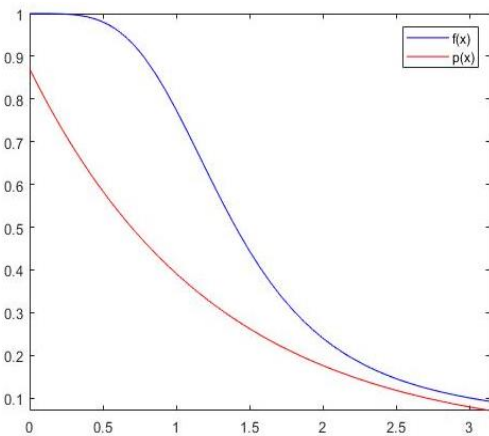
$$\rho(x) = A \exp(-0,8x) \quad (14.1)$$

A يمثل معامل التنظيم لأن الدالة $\rho(x)$ لا بد أن تكون منظمة على المجال $[0, \pi]$ كما أسلفنا الذكر حيث يكون لدينا:

$$\int_0^{\pi} \rho(x) dx = 1 \Rightarrow \int_0^{\pi} A \exp(-0,8x) dx = 1 \Rightarrow A = \frac{0,8}{1 - \exp(-0,8\pi)} \quad (15.1)$$

فتكون الدالة $\rho(x)$ من الشكل:

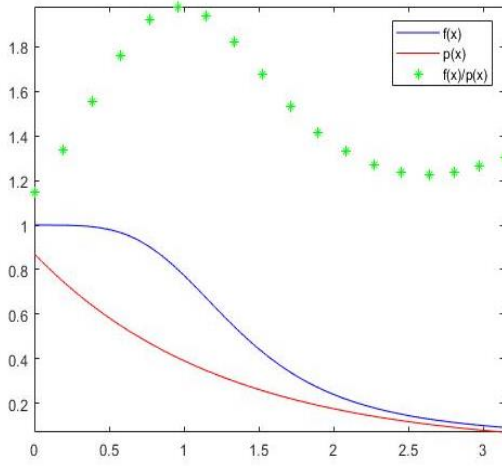
$$\rho(x) = \frac{0,8 \exp(-0,8x)}{1 - \exp(-0,8\pi)} \quad (16.1)$$



الشكل (2.1): تغيرات الدالتين f و ρ على المجال $[0, \pi]$.

كذلك الدالة $\rho(x)$ تحقق الشرط أنها موجبة في كل المجال $[0, \pi]$ وشكلها يشابه الدالة $f(x)$ أنظر الشكل (2.1).

الآن يمكن تقييم الدالة الجديدة والتي تكون من الشكل $\left[\frac{f(x)}{\rho(x)} \right]$ بطريقة مونت كارلو بحيث أن النقاط المولدة بشكل عشوائي وبتوزيع $\rho(x)$ تساهم بشكل متجانس في قيمة تكامل لأن الدالة الجديدة تكون بطيئة التغير على المجال الكلي $[0, \pi]$ أنظر الشكل (3.1).



الشكل (3.1): تغيرات الدوال f و p و f/p على المجال $[0, \pi]$

ملاحظة: معظم مولدات الاعداد العشوائية في أجهزة الحاسوب تستخدم التوزيع المنتظم في المجال $[0,1]$ لأنه يضمن عدم ترابط أكثر في سلسلة الاعداد العشوائية، وبالتالي من المستحسن استخدام هذا التوزيع، لتحقيق ذلك نلجأ إلى التغيير الرياضي التالي [16]:

$$\text{نضع: } dP(x) = \rho(x) dx$$

$$\text{فيكون لدينا: } P(x) = \int \rho(x) dx$$

بما أن $\rho(x)$ منظمة على المجال $[a, b]$ هذا يعني أن قيمة التكامل

$P(x)$ محصورة بين 0 و 1 عند كل النقاط الموزعة بانتظام على هذا المجال، وبالتالي يمكن أن نضع:

$$r = P(x) \text{ حيث } 0 \leq r \leq 1$$

عندها يمكن حساب التكامل

$$F_N = \int_a^b dx f(x) = \int_a^b dx \rho(x) \left[\frac{f(x)}{\rho(x)} \right] = \int_a^b dP(x) \left[\frac{f(x)}{\rho(x)} \right] \quad (17.1)$$

$$dP(x) = dr \Rightarrow x = P^{-1}(r) \text{ و } r \in [0,1] \quad (18.1)$$

وبالتالي يكون:

$$F_N = \int_a^b dP(x) \left[\frac{f(x)}{\rho(x)} \right] = \int_0^1 dr \left[\frac{f(P^{-1}(r))}{\rho(P^{-1}(r))} \right] \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f(P^{-1}(r_i))}{\rho(P^{-1}(r_i))} \quad (19.1)$$

بهذا التحويل يمكن تقدير التكامل عن طريق الاعداد العشوائية المولدة في المجال $[0,1]$ بتوزيع منتظم عن طريق مولدات الاعداد العشوائية لجهاز الحاسوب [16].

2.1 سلاسل ماركوف:

بما أننا سنركز على طريقة مونت كارلو التي تعتمد على سلاسل ماركوف الزمنية كان لزاماً علينا سرد ولو فكرة عامة على هاته السلاسل، حيث تعود هذه الفكرة إلى عالم الرياضيات الروسي (انديرافيتش ماركوف 1856 – 1922) الذي صاغها لتسهيل حسابات التنبؤ بأسلوب السلاسل الزمنية. فبعدما كان يشرك في حسابات التنبؤ جميع قيم المشاهدات للظاهرة المدروسة (المتغير العشوائي قيد الدراسة)، حيث يكون الحصول على القيم التنبؤية صعب جداً خاصة عندما تكون السلسلة طويلة وذات أرقام كبيرة، لذلك أستحدث ماركوف طريقة جديدة والتي تنص على الآتي: [في تحليل السلاسل الزمنية يكفي الإعتماد على القيم الحالية للتنبؤ بقيم السلسلة في المستقبل وعدم الإعتماد على القيم السابقة أو القيم التاريخية للسلسلة المدروسة] [9].

إستنادا لما سبق تعرف سلاسل ماركوف على أنها سلاسل من حالات النظام (x_1, x_2, \dots, x_n) (والتي تمثل قيم المتغير العشوائي) حيث أن الحالة المتوقعة (x_{i+1}) لا تتعلق إلا بالحالة الحالية للنظام (x_i) وبتعبير رياضي واضح

$$P_{jk} = P_r \{x_{i+1}=k / x_i=j, x_{i-1}=j_1, x_{i-2}=j_2, x_{i-3}=j_3, \dots, x_0=j_{i-1}\}$$

تُهمل حسب منطق ماركوف

أي يمكن كتابة هذه المعادلة وفقاً لمنطق ماركوف كما يلي:

$$P_{jk} = P_r \{x_{i+1}=k / x_i=j\}$$

ويمكن تعريف بعض الرموز:

P_{jk} : يمثل إحتمال العملية العشوائية (التصادفية) في القيمة j في الخطوة (i) وسوف تكون في القيمة (k) في الخطوة $(i+1)$ ، وهذا يعني وبكل وضوح أن هناك فضاء معلمه منقطع للعملية العشوائية (التصادفية) أي:

$$[X_i, n = 0, 1, 2, 3, 4, \dots]$$

$X_i=j$: يعني أن العملية العشوائية (التصادفية) في الحالة أو القيمة (j) في الوقت أو الخطوة (i) .

$X_{i+1}=k$: يعني أن العملية العشوائية (التصادفية) في الحالة أو القيمة (k) في الوقت أو الخطوة $(i+1)$ وهكذا يمكن تعريف سلاسل ماركوف بشكل واضح ودقيق كالآتي:

((سلاسل ماركوف يقصد بها خاصية للأنظمة تكون فيها الحالة المحتملة للنظام في المستقبل تعتمد فقط على الحالة الحالية للنظام وليس الحالات السابقة أو التاريخية)) [9,4].

3.1 خوارزمية ميتروبوليس:

إن الأنظمة المدرجة ضمن هاته المذكرة كمثل على استعمال طريقة مونتي كارلو لدراستها وتعميق فهمنا لها يمكن محاكاتها حاسوبيا من خلال خوارزمية تدعى بخوارزمية ميتروبوليس، ففي هذه الأنظمة يكون من الصعب الوصول الى حالة التوازن من خلال معاينة كل التشكيلات المحتملة لذلك نستخدم طريقة المعاينة القصدية (المعاينة الموجهة) انطلاقا من حالة ابتدائية x_0 مأخوذة بشكل عشوائي لنصل الى حالة التوازن x_n (التوزيع المستهدف) بعد N خطوة من المحاكاة، كون هذه الخوارزمية ستتقارب نحو التوزيع الصحيح من خلال تطبيق شرط القبول أو الرفض للانتقال الى الحالة الموالية من حالات النظام انطلاقا من الحالة الحالية.

وكون هذه الأنظمة تحتوي على كم هائل من الجسيمات ولا يمكن دراستها إلا باستعمال الطرق الإحصائية التي تمكننا من تعيين توزيع الحالات المجهرية للنظام، حيث أنه من خلال معرفة هذا التوزيع يمكن حساب المتوسطات للمتغيرات الترموديناميكية المختلفة (E, C_v, \dots) . ولا يتأتى هذا إلا بدراستها ضمن المجموعة الإحصائية المناسبة على حسب وصف النظام أهو معزول أو مفتوح أو موصول بخزان حراري. ففي حالتنا هذه

سندرس هاته الأنظمة ضمن المجموعة القانونية التي سيأتي تفصيلها لاحقا، والتي تعتمد على التوزيع القانوني الموصوف بتوزيع بولتزمان:

$$P(X) \propto \text{EXP}[-\beta E(X)], \beta = 1 / k_B T \quad (20.1)$$

وهكذا عند استعمال طريقة مونتي كارلو من خلال خوارزمية ميتروبوليس المطورة سنة 1953 يمكننا توليد عينات عشوائية من فضاء العينات (Ω) والتي يمكن حساب وزنها الاحصائي من خلال توزيع بولتزمان وقبول الحالات التي تكون فيها الطاقة متناقصة بشكل اسي، لكن عند معاينة الحالات الممكنة للنظام معاينة بسيطة نفع في إشكالية وجود كم هائل من العينات المولدة والتي يتم رفضها مما يؤدي الى مضیعة للوقت والجهد ويجعل من هاته الطريقة غير عملية عند التطبيق، لذلك نلجأ للمعاينة الموجهة واستخدام سلاسل ماركوف حيث يتم توليد العينة الموالية للنظام اعتمادا على العينة الحالية فقط و من ثم يتم قبولها من عدمه وفق توزيع بولتزمان. من الواضح أن الامر كله يتعلق بطريقة توليد العينات التي تمثل الحالات الممكنة لنظام، لذلك قبل اعتبار سلاسل ماركوف في توليد العينات ولفهم أكبر ندرس بشكل عام طريقة توليد عينات عشوائية حقيقية، حيث يعطى احتمال توليد سلسلة غير مترابطة من N قيمة بالعلاقة التالية [4]:

$$P_N(X_1, X_2, X_3, \dots, X_N) = P_1(X_1)P_1(X_2)P_1(X_3) \dots P_1(X_N) \quad (21.1)$$

$P_1(X_N)$ تمثل احتمال توليد القيمة X_N بعد الخطوة الأولى في سلسلة التوليد، لكن عند اعتبار سلاسل ماركوف في توليد القيم يصبح الامر مختلف قليلا لان توليد القيمة الموالية معتمد على القيمة الحالية وبالتالي ندخل ما يسمى باحتمال الانتقال ($T(X \rightarrow X')$) من قيمة X الى قيمة X' وتصبح العلاقة السابقة تصف احتمال توليد سلسلة ماركوف من N قيمة [4]:

$$P_N(X_1, X_2, X_3, \dots, X_N) = P_1(X_1)T(X_1 \rightarrow X_2)T(X_2 \rightarrow X_3) \dots T(X_{N-1} \rightarrow X_N)$$

حيث ان مجموع احتمال الانتقالات الكلية يساوي الى الواحد [4]:

$$\sum_{X'} T(X \rightarrow X') = 1$$

الهدف الان هو كيف نوجه قيم السلسلة المولدة من خلال خوارزمية الحاسوب بعد t خطوة وفق توزيع معين مستهدف (توزيع بولتزمان في هاته الحالة) وذلك بغض النظر على القيمة الابتدائية التي سيبدأ منها التوجيه وموضعها في السلسلة، هذا بالفعل ما تقوم به خوارزمية ميتروبوليس فهي في ظل شروط معينة، تنتج سلسلة ماركوف تتبع توزيع ثابت، على الأقل لفترات طويلة، لأنها تحتاج الى بعض الوقت "لنسيان" التوزيع الأولي المختار. تتمثل هاته الشروط:

أولاً: كل عينة مولدة يمكن الوصول اليها من خلال أي عينة أخرى بعد عدد معين من الخطوات.

ثانياً: التقليل ما أمكن من الدورية في العينات المولدة [1, 4, 9].

1.3.1 الخطوات العامة في خوارزمية ميتروبوليس:

الخطوات العامة المتبعة في هذه الخوارزمية لتتقارب نحو التوزيع المستهدف وليكن $\rho(x)$ هي:

- ✓ إختيار حالة من الحالات الممكنة للنظام بشكل عشوائي (x_i) .
- ✓ يتم توليد حالة متوقعة (y_{i+1}) من خلال إحداث تغيير في الحالة الحالية للنظام (خاصية سلاسل ماركوف الزمنية).
- ✓ نقوم بحساب إحتمال قبول الحالة الجديدة:

$$P(x_i, y_{i+1}) = T(x_i \rightarrow y_{i+1}) = \min \left[\frac{\rho(y_{i+1})q(y_{i+1}, x_i)}{\rho(x_i)q(x_i, y_{i+1})}, 1 \right]$$

- ✓ يتم قبول الحالة الجديدة أو رفضها (x_{i+1}) بإحتمال وفق التالي:

$$x_{i+1} = \begin{cases} y_{i+1} & \text{قبول بإحتمال } P \\ x_i & \text{رفض بإحتمال } 1 - P \end{cases}$$

- ✓ يتم تكرار العملية عدد N من المرات حتى الوصول إلى الحالة الأكثر إحتمالاً [9].

الفصل الثاني

طريقة مونتسوري

على نموذج أيزنبرغ

2 الفصل الثاني: طريقة مونت كارلو على نموذج أيزينغ

1.2 تمهيد:

سندرس في هذا الفصل أحد أهم الظواهر التي تتجلى من خلال تفاعل عدد هائل من الجسيمات فيما بينها ضمن هاته الأنظمة متعددة الجسيمات، والتي تدعى بظاهرة تحولات الطور وذلك عن طريق المحاكاة العددية لتفاعل الجسيمات فيما بينها من خلال خوارزمية ميتروبوليس، الامثلة عديدة في الطبيعة، والتي من أهمها ظهور المغنطة الحديدية في بعض المواد الطبيعية أو المصنعة، مبدئنا سلوكاً مميزاً تجاه المجال المغناطيسي حيث تعتبر هذه المواد جزءاً أساسياً من دراسة المواد الصلبة لأنها تلعب دوراً هاماً في تطبيقات عديدة من الحياة اليومية. وبما أن عدد جسيمات هاته الأنظمة يكون كبيراً جداً، من مضاعفات عدد أفوجادرو ($N_A \approx 6,023 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$) لا يتصور من الناحية العملية أن يتم دراسة كل جسيم على حدة، لذلك كان لزاماً تطوير طرق ونظريات غير كلاسيكية لدراسة وتحليل سلوك الجسيمات في هاته الأنظمة للربط بين الخواص المجهرية للجسيمات التي تتألف منها مع خواصها العيانية، مما يعطينا فكرة عن أصل هذه الخواص المشاهدة في حياتنا اليومية.

لهذا تُعتبر الفيزياء الإحصائية الفرع العلمي الذي يوفر لنا هاته الطرق والنظريات لمعالجة مثل هذه المسائل، ومن أهمها نظرية المجموعات الإحصائية التي قام العالم جيبس Gibbs بطرحها ليصف تجمع عدد كبير جداً من الحالات المجهرية والتي لها نفس الحالة العيانية، وحتى لا نخرج على الإطار العام لموضوع هاته المذكرة، سوف نركز فقط على المجموعة الإحصائية التي سنستخدمها في معالجة ودراسة النماذج المدرجة ضمن هاته المذكرة (نموذج أيزينغ ونموذج الهزازات الكمية)، والتي تدعى **بالمجموعة القانونية**، كون أن الأنظمة التي تصفها هذه النماذج هي أنظمة مغلقة، حيث أن جسيماتها تتفاعل مع الوسط المحيط (الوسط الخارجي) من خلال تبادل الحرارة فقط دون المادة [21].

2.2 المجموعات الإحصائية:

في نظرية المجموعات الإحصائية يوجد ثلاثة أنواع كل نوع يصلح لأنظمة معينة على حسب المتغيرات الترموديناميكية لوصف النظام قيد الدراسة:

أولاً المجموعة القانونية المجهرية: يعرّف فيها النظام من خلال ثبات عدد الجسيمات، الحجم، والطاقة، فهي إذا أنظمة معزولة. ويكون محور البحث كيفية تحديد عدد الحالات المجهرية المسموح بها باعتبار قيمة محددة للطاقة E ، أي إيجاد عدد الحالات $\Omega(N, V, E)$ ، ومن ثم استخداماً لإشتقاق المتغيرات الديناميكية الحرارية [21].

ثانياً المجموعة القانونية: إن معظم الأنظمة الفيزيائية في الواقع المعاش لا تكون معزولة بشكل تام، مما يضمن عدم تبادلها الطاقة مع الوسط الخارجي، لذلك تبدو فكرة تثبيت الطاقة للنظام الفيزيائي غير عملية لسببين هما:

✓ صعوبة قياس طاقة النظام الكلية E .

✓ صعوبة المحافظة على النظام تحت المراقبة الفيزيائية.

في المقابل يمكن من الناحية العملية أن نضمن ثبات درجة الحرارة T للنظام الفيزيائي من خلال وضع النظام في خزان حراري، وبذلك يعمل التبادل الحراري بينهما على المحافظة على درجة الحرارة (اتزان حراري). هكذا يمكننا تعريف النظام في المجموعة القانونية من خلال ثبات عدد الجسيمات، الحجم، ودرجة الحرارة (N, V, T) ، أي أن النظام يكون مغلق [21].

ثالثا المجموعة القانونية الكبرى: وهي تصف الأنظمة المفتوحة والتي تتبادل مع الوسط الخارجي كل من الطاقة وعدد الجسيمات [21].

1.2.2 المجموعة القانونية:

كما أشرنا سابقا، إن الأنظمة التي تصفها هاته المجموعة تكون في حالة إتزان حراري مع الوسط الخارجي الذي يعتبر كخزان حراري يوفر لها عدد لا نهائي من النسخ التصورية (الحالات المجهرية) تكون فيه الطاقة E متغيرة، ويمكنها أن تأخذ القيم $(0 \rightarrow \infty)$ [21].

من خلال هذا يتبادر إلى الذهن السؤال التالي: ما هي الحالة المجهرية ذات الطاقة E_r التي يمكن لنظام التواجد فيها؟، على حسب نظرية تساوي الإحتمالية والتي تنص على "أن النظام يمكنه التواجد في كل الحالات المجهرية بنفس احتمال الحدث"، بمعنى أنه سيزور كل الحالات المجهرية الممكنة بنفس الاحتمال، لكن يبرز إشكال آخر وهو احتمال تواجد النظام (Pr) عند كل حالة من الحالات المجهرية أثناء زمن القياس، بمعنى آخر وتيرة زيارة النظام لكل الحالات المجهرية الممكنة، على اعتبار ان النظام يكون في حالة اتزان حراري مع الخزان الحراري عند درجة حرارة مشتركة T [21].

يوجد طريقتان لتحديد Pr اعتماد على E_r ، وهما [21]:

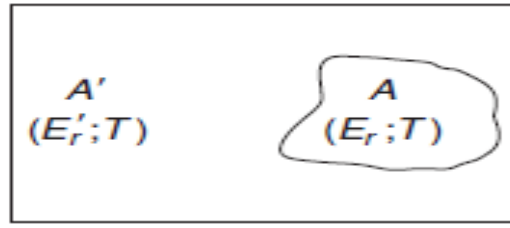
✓ الطريقة الأولى: تعتمد على دراسة احصائية لتبادل الطاقة بين النظام والخزان الحراري.

✓ الطريقة الثانية: تعتمد على اعتبار ان النظام والوسط الخارجي يشكلان معا نظاما معزولا تكون فيه الطاقة وكمية المادة محفوظة (N, V, E) ، ويقتصر الامر فقط على تبادل جزء من الطاقة E ناتجة عن مساهمة N جسيم من النظام ككل، ومن ثم تتم الدراسة الإحصائية لعملية المساهمة.

على العموم إذا ما تم تحديد (Pr) ، فإن اشتقاق قوانين الحركة الحرارية تصبح سهلة في كلتا الطريقتين، وتكون النتائج واحدة في النهاية [21].

1.1.2.2 اتزان النظام مع الخزان الحراري:

لنفرض ان نظاما فيزيائيا ما (A) في توازن حراري مع الوسط الخارجي (A') الذي يعتبر كخزان حراري له الشكل (1.2)، وان طاقة الجملة المؤلفة من النظام والخزان $(A^{(0)} = A' + A)$ تساوي $E^{(0)}$.



الشكل (1.2): نظام مغمور في خزان حراري [21].

كذلك نعتبر أن الجملة ككل نظاما معزولا ونفرض في لحظة ما تأخذ طاقة النظام قيد الدراسة القيمة (E_r) ، بينما طاقة الخزان الحراري تأخذ القيمة (E_r') ، حيث

$$E_r + E_r' = E^{(0)} = const \quad (1.2)$$

ومن المتوقع ان القيمة العملية لطاقة الوسط الخارجي (الخزان الحراري) اكبر بكثير من طاقة النظام المدروس، فتكون نسبة E_r الى $E^{(0)}$ كسرا أصغر من الواحد. بإستخدام معادلة (1.2)، نجد ان

$$\frac{E_r}{E^{(0)}} = \left(1 - \frac{E_r'}{E^{(0)}}\right) \ll 1 \quad (2.2)$$

إن إحصائية تواجد الجملة ككل (النظام المدروس + خزان حراري) متناسبة طردا مع عدد الحالات المجهرية $\Omega'(E_r')$ المتاحة للخزان الحراري والتي تتوافق مع الطاقة (E_r') ، وذلك بسبب أن طاقته أكبر بكثير من النظام المدروس وأن تواجد الجملة عند كل حالة من الحالات الممكنة والمتوفرة (عند قيمة معينة للطاقة) على الأرجح متساوية الحدث (فرضية تساوي الإحصائية) [21].

وهذا يعني أن

$$P_r \propto \Omega'(E_r') \equiv \Omega'(E^{(0)} - E_r) \quad (3.2)$$

عند نشر معادلة (3.2) حول القيمة $E_r \sim 0$ ، اي عندما تقترب $E_r' \rightarrow E^{(0)}$ ، ولكي يكون النشر تقاربي، نعتمد على نشر تايلور للوغاريتم الدالة كما يلي

$$\begin{aligned} \ln(\Omega'(E_r')) &= \ln(\Omega'(E^{(0)})) + \left. \frac{\partial \ln \Omega'}{\partial E'} \right|_{E=E^{(0)}} (E_r' - E^{(0)}) + \dots \\ &\cong const - \beta' E_r \end{aligned} \quad (4.2)$$

ولدينا من معادلة بولتزمان للأنتروبي، $\beta = \left(\frac{\partial \Omega}{\partial E}\right)_{N,V}$ ، اذن:

$$\beta' = \beta = 1/k_B T \quad (5.2)$$

من المعادلتين (4.2) و (5.2) نحصل على ما يلي:

$$P_r \propto \exp(-\beta E_r) \quad (6.2)$$

بمعايير دالة الاحتمالية، نجد ان الصورة الرياضية لهذه الدالة تكون كما يلي

$$P_r = \frac{\exp(-\beta E_r)}{\sum_r \exp(-\beta E_r)} \quad (7.2)$$

حيث يكون التجميع في مقام المعادلة (7.2) على كل المستويات المتاحة للنظام A.

2.1.2.2 الأهمية الفيزيائية للكميات الإحصائية في المجموعة القانونية:

لنبدأ باستخدام التوزيع القانوني التالي:

$$P_r \equiv \frac{\langle n_r \rangle}{N} = \frac{\exp(-\beta E_r)}{\sum_r \exp(-\beta E_r)} \quad (8.2)$$

حيث، نحدد الطاقة الداخلية لنظام U بالمعادلة التالية

$$U = \frac{\sum_r E_r \exp(-\beta E_r)}{\sum_r \exp(-\beta E_r)} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left\{ \sum_r \exp(-\beta E_r) \right\} \quad (9.2)$$

لدراسة استنباط الخواص العيانية لنظام ما على اساس النتائج الإحصائية، تكون البداية من علاقات الديناميكا الحرارية المتعلقة بطاقة هولمهلنز الحرة (F) والتي تعرف كما يلي [21]:

$$dF = dU - T dS - S dT = -S dT - P dV + \mu dN \quad (10.2)$$

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{N,V}, P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{N,T}, \mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{V,T} \quad (11.2)$$

$$U = F + TS = F - T \left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{N,V} = T^2 \left[\frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{F}{T}\right) \right]_{N,V} = \left[\frac{\partial (F/T)}{\partial (1/T)} \right]_{N,V} \quad (12.2)$$

وعند مقارنة معادلتنا (9.2) و (12.2) يمكن التنبؤ بوجود علاقات وثيقة بين كميات الديناميكا الحرارية ونتائج الميكانيكا الإحصائية، وعلى الخصوص، العلاقات التالية:

$$\beta = \frac{1}{k_B T}, \quad \ln \left\{ \sum_r \exp(-\beta E_r) \right\} = -\frac{F}{k_B T} \quad (13.2)$$

حيث k_B ثابت بولتزمان. وتشكل معادلة (13.2) النتيجة الاساسية لنظرية المجموعة القانونية، ويمكن اعادة صياغتها على الشكل التالي:

$$F(N, V, T) = -k_B T \ln(Z_N(V, T)) \quad (14.2)$$

حيث

$$Z_N(V, T) = \sum_r \exp\left(-\frac{E_r}{k_B T}\right) \quad (15.2)$$

3.1.2.2 تعريف دالة التجزئة في المجموعة القانونية:

تسمى الكمية $Z_N(V, T)$ دالة التجزئة للمجموعة القانونية، وتعني التجميع على كل الحالات الممكنة للطاقة وهذه الدالة تعتمد على درجة حرارة النظام T ، كما يكون اعتمادها على N ، V ضمناً من خلال القيم الخاصة للطاقة E_r .

كما تكون الكميات $F(N, V, T)$ ، $\ln(Z)$ كميات تمديدية لأنها تتناسب مع كمية المادة في النظام قيد الدراسة [21].

2.2.2 تحديد الكميات الترموديناميكية المختلفة للنظام:

إذن بتحديد دالة التوزيع ومعرفة طاقة هولمهلتر الحرة، يمكن إيجاد باقي الكميات الديناميكا الحرارية مباشرة، بينما استخدام المعادلة (11.2) يعطي الإنتروبي (S)، الضغط (P)، الجهد الكيماوي (μ)، وكذلك فبالنسبة إلى:

✓ الحرارة النوعية عند الحجم الثابت (C_V) تكون كما يلي:

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{N,V} = -T \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2}\right)_{N,V} \quad (16.2)$$

✓ طاقة جيبس الحرة، G ، *Gibbs free energy* تحدد كما يلي:

$$G = F + PV = F - V \left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{N,T} = N \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{V,T} = N\mu \quad (17.2)$$

✓ الضغط يحدد باستخدام المعادلتين (11.2)، (13.2)، ويكون كما يلي:

$$P = \frac{\sum_r \frac{\partial E_r}{\partial V} \exp(-\beta E_r)}{\sum_r \exp(-\beta E_r)} \quad (18.2)$$

وعليه:

$$P dV = - \sum_r P_r dE_r = -dU \quad (19.2)$$

في معادلة (19.2)، يكون الطرف الأيمن مساوياً للتغير في معدل طاقة النظام (في المجموعة)، والنتج من عملية تبديل مستويات الطاقة E_r بدون تغيير الاحتمالية.

✓ كما يتم تحديد انتروبي النظام بدلالة الاحتمالية كما يلي:

حيث تعطى إحصائية تواجد النظام عند الحالات المجهرية المعرفة بقيمة الطاقة E_r كما يلي:

$$P_r = \frac{\exp(-\beta E_r)}{Z} \quad (20.2)$$

وعليه:

$$\langle \ln P_r \rangle = -\ln Z - \beta \langle E_r \rangle = \beta(F - U) = -S/k_B \quad (21.2)$$

اي ان:

$$S = -k_B \langle \ln P_r \rangle = -k_B \sum_r P_r \ln P_r \quad (22.2)$$

تعني المعادلة (22.2) ان انثروبي النظام يمكن تحديدها بدلالة الإحصائية.

ان صلاحية المعادلة (22.2) تنطبق على المجموعة القانونية، حيث كل حالة مجهرية في هذه المجموعة تكون على الأرجح متساوية الحدث، اي ان ($P_r = 1 / \Omega$) وعليه تؤول المعادلة (22.2) الى التالي:

$$S = k_B \sum_{r=1}^{\Omega} \frac{1}{\Omega} \ln \Omega = k_B \ln \Omega \quad (23.2)$$

ملاحظة:

إن دراسة الأنظمة الكلاسيكية من الناحية الإحصائية يتم في فضاء يسمى **فضاء جاما**، او احيانا يسمى **فضاء الطور** وعند استخدامه نستبدل التجميع على الحالات الكمية بالتكامل على هذا الفراغ. لنفرض ان كمية فيزيائية مثل $f(q, p)$ معرفة عند جميع نقاط فراغ الطور، يكون متوسط هذه الكمية في المجموعة القانونية كما يلي:

$$\langle f \rangle = \sum_i f_i P_i = \frac{\sum_i f(E_i) g_i e^{-\beta E_i}}{\sum_i g_i e^{-\beta E_i}} \rightarrow \frac{\int_0^{\infty} f(E) e^{-\beta E} g(E) dE}{\int_0^{\infty} e^{-\beta E} g(E) dE} \quad (24.2)$$

لنفرض ان دالة كثافة الحالة $\rho(q, p)$ تشير الى النقاط الممثلة للنظام في فراغ الطور، وان المجموعة في حالة استقرار. تكون هذه الدالة مقياسا لإحصائية تواجد نقطة ممثلة في جوار (محيط) النقطة (q, p) وهذه الدالة تقابل قيمة دالة هاملتون $H(q, p)$ للنظام، أي:

$$\rho \propto e^{-\beta H(p, q)} \quad (25.2)$$

بالمقارنة بين المعادلتين (25.2) و (6.2) تصبح الصيغة الرياضية لمتوسط الكمية الفيزيائية في النظام كما يلي:

$$\langle f \rangle = \frac{\int f(q, p) e^{-\beta H} d\omega}{\int e^{-\beta H} d\omega} \quad (26.2)$$

يكون العنصر الحجمي في فراغ الطور لنظام مكون من N من الجسيمات بدلالة ثابت بلانك كما يلي:

$$\frac{d\omega}{N! h^{3N}} \quad (27.2)$$

وعليه، تؤول دالة التجزئة الى الصيغة التالية [21]:

$$Z_N(V, T) = \int \frac{d\omega}{N! h^{3N}} e^{-\beta H(q,p)} \quad (28.2)$$

علما ان التكامل في المعادلة (28.2) يمتد على كامل فراغ الطور حيث $d\omega = dp^{3N} dq^{3N}$

قبل الإستطراد في المحاكاة العددية لنموذج أيزينغ الذي يصف تفاعل العزوم المغناطيسية لكم هائل من الذرات فيما بينها، سنخرج في العنوان الموالي على مفهوم الإنتقالات الطورية التي تبرز خلال هذا التفاعل.

3.2 الانتقالات الطورية:

1.3.2 مفهوم الإنتقالات الطورية:

يعتبر الطور حالة فيزيائية متجانسة للمادة، ويحدث التغيير فيه نتيجة لتغير الكميات الترموديناميكية لنظام، حينها يبرز مفهوم الانتقالات الطورية، وتبعاً لذلك يكون التساؤل المطروح هو سبب حدوثها؟. في الواقع يعود سبب حدوث هذه الانتقالات الى تغيير النظام نفسه نحو تكوين أو حالة أخرى له، حيث يتم خلاله تقليل الطاقة الحرة الى الحد الأدنى لها، وبذلك تكون الأنثروبي كبيرة لأنه يوجد تناسب عكسي فيما بينهما: $\max S \Leftrightarrow \min F$ [15,8].

2.3.2 معامل الترتيب:

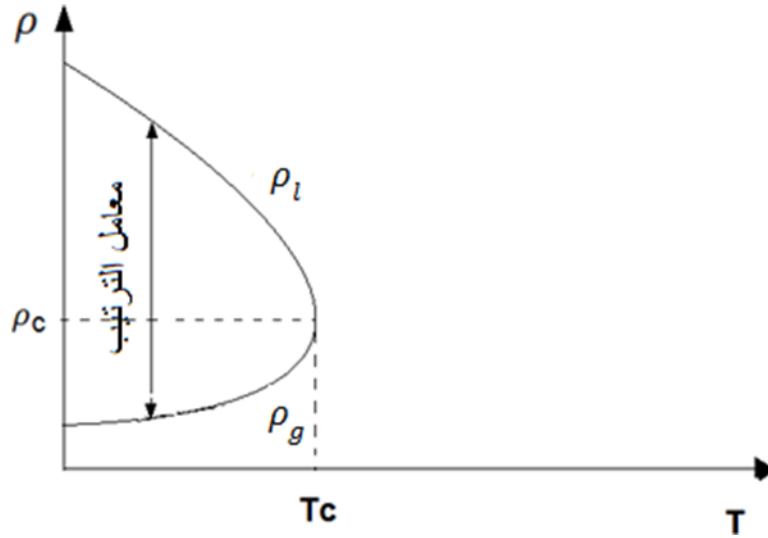
إن السمة الأساسية والمميزة في نظرية العالم دافيدوفيتش لانداو التي يصف فيها الانتقالات الطورية هي أنها ظاهرية، أي أنها على عكس النظرية المجهرية لا تهتم بتفاصيل التفاعلات على المستوى الذري، بل تهتم فقط بتناظر النظام على المستوى الجهري، حيث يصف الانتقال الطوري الذي يؤدي إلى التغيير في هذا التناظر من خلال وسيط يدعى بوسيط الترتيب [5].

تعتمد نظرية لانداو على بناء كمية تعرف باسم الطاقة الحرة للاندو \mathcal{F} ، هذه الأخيرة تصف طاقة النظام في محيط الانتقال الطوري، وتعتبر عادة قيمة تقريبية للطاقة الحرة لهولمهلترز أو جيبس لكل وحدة حجم. تتعلق الطاقة الحرة للاندو بدرجة الحرارة والضغط وأي كمية خارجية أخرى (الحقل الكهربائي، الحقل المغناطيسي)، كما تتعلق أيضا بجميع وسائط الترتيب التي لها صلة بالنظام [5].

يمكن وصف ما سبق بأنه تخفيض منهجي لتناظر النظام بحيث يُفترض ضمناً وجود مرحلة عالية التناظر في تصور لانداو، تكون في مكان ما من مخطط الطور، والموافقة لدرجة حرارة عالية [5].

ويوافق هذا التخفيض للتناظر تغيراً في وسيط الترتيب، والذي تزداد قيمته عند التحرك بشكل أعمق في المرحلة المطلوبة، الى ان يصل لحالة تكون فيها جميع وسائط الترتيب ذات القيمة صفر، وهي الحالة الموافقة لكسر تناظر النظام ولنقطة التحول. والمميز في هذا أن وسائط الترتيب يمكن ملاحظتها فيزيائياً [5].

وكمثال على ما تقدم ذكره رسم كثافة السائل والغاز على طول منحنى التبخر بدلالة درجة الحرارة، الذي ينتج دورة مبينة في الشكل (2.2) حيث يقل الفارق بين الكثافتين بزيادة درجة الحرارة الى ان ينعدم عند درجة الحرارة الموافقة لنقطة تدعى النقطة الحرجة، وهذا الفارق بين الكثافتين هو نفسه وسيط الترتيب للانتقال من الحالة السائلة إلى الحالة الغازية للنظام $\rho_L - \rho_g = 0$ [22].



الشكل (2.2): منحنى الكثافة لإنتقال الطور [22].

3.3.2 الإنتقال فيرومغناطيسي - بارامغناطيسي:

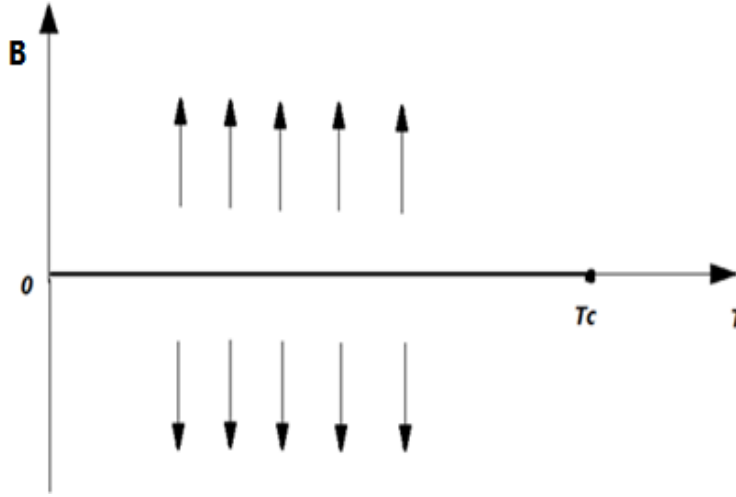
سنحاول ضمن هذا العنوان إعطاء لمحة بسيطة على أحد أهم الانتقالات الطورية الملاحظة في الطبيعة، والتي سوف تظهر أثارها عددياً من خلال محاكاة نموذج أيزينغ، الا وهي الإنتقال من الحالة الفيرومغناطيسية إلى الحالة البارامغناطيسية، قبل التطرق لهذا الانتقال نعرض بصورة مبسطة عن مفهوم كل من الطورين.

إن الذرات التي تحتوي على الكترونات غير متزاوجة تتصرف كمغناطيس صغير، ولديها عزم مغناطيسي، لذلك فالعناصر التي تتشكل من هذا النوع تظهر انجذاباً طفيفاً للمغناطيس تسمى بالبارامغناطيسية، مع ذلك هناك عدد قليل من العناصر في الجدول الدوري وعددها أربعة (Fe, Ni, Gd, Co) تمتلك ذرات لديها الكترونات غير متزاوجة لكنها تظهر جاذبية قوية للمغناطيس وتدعى الفيرومغناطيسية. على المستوى المجهرى فسّر هذا الاختلاف بأن الفرق بين الحالتين يكمن في كون العناصر البارامغناطيسية تشكل الذرات فيها عزوم مغناطيسية ذات اتجاهات عشوائية يلغي بعضها البعض، وعند تعريضها الى حقل مغناطيسي خارجي تتجه عزوم الذرات نحو اتجاه الحقل الخارجي، وقدرة الحقل على توجيه العزوم وفق اتجاهه تعتمد على مدى قوته وعلى درجة الحرارة، حيث أنه في درجات حرارة مرتفعة تهتز الذرات فيصعب بذلك محاذاتها في اتجاه الحقل الخارجي، وتبعاً لذلك تكون المغنطة ضعيفة لهذه المادة. وعند التخلص من مصدر الحقل فإن الذرات تعود الى عشوائيتها وتفقد المغنطة الناتجة [8].

أما في حالة المواد الفيرومغناطيسية فإنها تتكون من مجالات مغناطيسية صغيرة هذه المجالات أثبتت لاحقاً من خلال ميكانيك الكم وتدعى بمجالات فايس. سنكتفي بقبول أنها ظاهرة ميكانيكية كمومية دون التطرق لتفاصيلها، هذه المجالات لها اتجاهات مختلفة لكل منها، وخلافاً للمواد البارامغناطيسية فإن العزوم فيها لا تكون بشكل

عشوائي، بل تترتب بشكل تلقائي دون تدخل خارجي. وعند تطبيق حقل خارجي فإنها تترتب إلى أن تصل إلى درجة التشبع أي ان العزوم الجزئية داخل مجالات فايس تتوجه في اتجاه واحد، بينما المغنطة على المستوى العياني للمادة الفيرومغناطيسية لم تتشبع بعد بسبب أن مجالات فايس ليست موجهة في نفس الإتجاه.

وبزيادة شدة الحقل الخارجي تزداد المغنطة العيانية نتيجة لزيادة حجم مجالات فايس والتداخل مع بعضها مشكلة مجالاً قوياً تتبع فيه العزوم جميعها اتجاه واحداً، في حال التخلص من الحقل نهائياً فإن المادة الفيرومغناطيسية عادة ما يكون سلوكها إما البقاء على حالها (مغنطة دائمة) وتسمى بالمغناطيس الصلب، أو تفقد مغنطتها وتسمى بالمغناطيس الناعم وذلك حسب تاريخ المادة [8].



الشكل (3.2): مخطط الإنتقال الطوري لمادة فيرومغناطيسية [23].

إن تعرض المواد الفيرومغناطيسية إلى درجة حرارة أكبر من درجة كوري T_C ، يؤدي إلى فقدان المادة خصائصها الفيرومغناطيسية، وبالضبط إنعدام المغنطة عند T_C وتتحول إلى بارامغناطيسية. وعند التبريد إلى أقل من هذه الدرجة فإن الخصائص الفيرومغناطيسية تعود من جديد وهو التحول من البارامغناطيسية إلى الفيرومغناطيسية. وتعتبر المغنطة هي ذاتها وسيط الترتيب في هذا الإنتقال [8,15].

تعطى درجة حرارة كوري للعناصر الفيرومغناطيسية كالتالي: $Fe = 770C^0$ ، $Co = 1121C^0$ ، $Ni = 354C^0$ ، $Gd = 20C^0$. يوضح الشكل (3.2) مخطط الانقار الطوري لمادة فيرومغناطيسية.

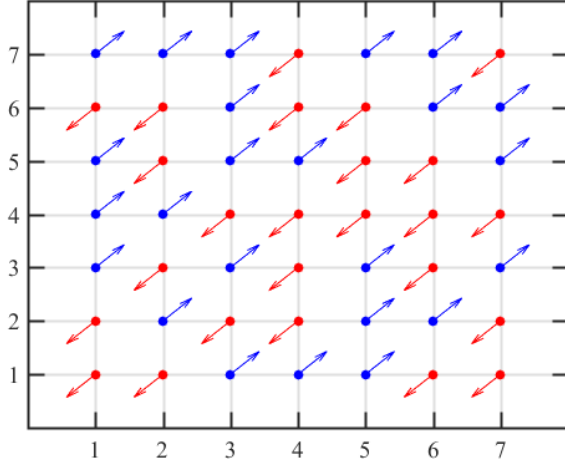
4.2 المحاكاة العددية لظاهرة المغنطة الحديدية من خلال نموذج ايزينغ:

1.4.2 وصف نموذج ايزينغ:

تكتسب بعض المواد في الطبيعة خاصية المغنطة الحديدية من خلال توافق العزوم المغزلية لكم هائل من ذراتها في نفس الاتجاه بحيث تشكل محصلة هذا التوافق عزم مغناطيسي كلي يمكن قياسه ماكروسكوبياً في المختبر، مما يجعلنا نتساءل في تفسير كيف يؤدي تفاعل العزوم المغزلية للذرات على المستوى المجهرى فيما بينها بحيث تنتج لنا خاصية جهرية عيانية يمكن قياسها؟، كذلك نتساءل في كيفية تفسير تعلق ظهور هاته الخاصية من عدمه بتغير درجة الحرارة حيث انها تختفي عند تعدي درجة حرارة معينة [24]؟

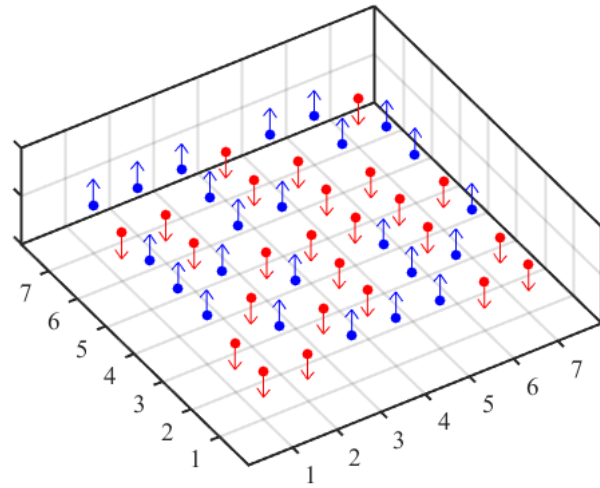
لذلك فإن نموذج أيزينغ الذي كان قد اقترحه ويليام لنز Wilhelm Lenz عام 1920 كموضوع دكتوراه على تلميذه ايرنست أيزينغ Ernst Ising من اجل دراسة التحول نحو أو من الفيرومغناطيسية، يُعتبر أحد أهم النماذج المستخدمة في المحاكاة العددية للظواهر الطبيعية المختلفة ضمن أطر الميكانيكا الاحصائية التي تظهر فيها التأثيرات الجماعية عن طريق التفاعلات المحلية بين جزيئات ذات حالتين [18,19].

لفهم هذا النموذج بشكل مبسط يمكننا إعتبار ذرات المادة المدروسة مرتبة بشكل منتظم ضمن شبكات ثلاثية الابعاد بحيث تتموضع في كل نقطة تقاطع من هاته الشبكات ذرة ذات عزم مغناطيسي في إتجاه معين، ويفصل فيما بين الذرات مسافات بينية موحدة a حيث يكون لكل ذرة جوار أول من رتبة (a) وجوار ثاني من رتبة $(2a)$ الخ. إن المعالجة الكمية الدقيقة للمسألة معقد جدا لا يمكن إدراجه في حدود هاته المذكرة، لذلك سيتم تبسيطها دون الاخلال بالتصرف العام للنظام، ويتيح لنا في نفس الوقت إستنباط جميع المتغيرات الترموديناميكية من خلال القوانين الفيزيائية التي تحكمها. لتبسيط المسألة نفرض عدة تقريبات:



الشكل (4.2): تمثيل تموضع السبينات في شبكة ذات بعدين [24].(7*7)

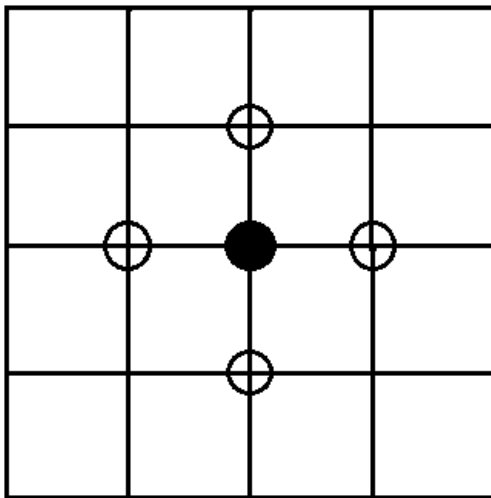
• أولا نعتبر شبكة ذات بعدين $(n*n)$ مربعة كما في الشكل المقابل (4.2)، عند كل عقدة من عقدها تتموضع ذرة ذات عزم مغناطيسي (سبين) معين في إتجاه كفي [24,22].



الشكل (5.2): تمثيل تموضع السبينات في شبكة ذات بعدين $(7*7)$ تأخذ أحد القيمتين $S_i = \pm 1$ [24].

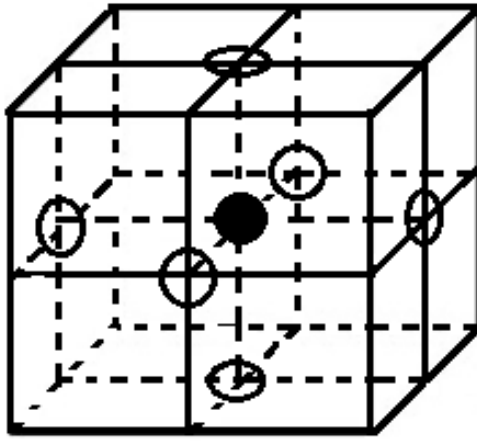
• ثانيا سنفرض أن سبين كل ذرة يأخذ فقط أحد الاتجاهين إما إلى الأعلى أو الأسفل وفق المحور z كما في الشكل المقابل (5.2)، وبالتالي فالسبين S_i حيث $(i = 1, 2, \dots, N)$ الموافق لذرة رقم i يساوي قيمة واحدة من أصل قيمتين ونكتب

$$S_i = \pm 1 \quad [24,22].$$



الشكل (6.2): الجوار الأول لسبين في بعدين [22].

• ثالثا كون أن سبينات ذرات المواد ذات المغنطة الحديدية والمنظمة ضمن هاته الشبكات تتفاعل فيما بينها زوج بزوج على إمتداد مسافات كبيرة داخل المعدن وتكون طاقة التفاعل J أكبر عند الجوار الأول من الرتبة (a) للسبين كما هو موضح في الشكلين (6.2) و (7.2) وتبدأ بالتناقص مع إزدياد رتبة الجوار، سوف نقتصر في هاته الدراسة على طاقة التفاعل من رتبة الجوار الأول فقط [24,22].



ترمز لسبين المجاور ○

ترمز لسبين المراد إظهار جواره ●

الشكل (7.2): الجوار الأول لسبين في ثلاثة أبعاد [22].

و قبل أن نستطرد في الدراسة الإحصائية و العددية لنموذج أيزينغ، من المفيد أن نذكر بكيفية تفاعل السبينات فيما بينها ضمن التقريبات المذكورة انفا حيث أنه يكون لكل سبينين متجاورين طاقة تفاعل مقدارها J . إذا كان لهما نفس الاتجاه، و $J+$ إذا كان لهما إتجاهين متعاكسين، و عليه وبما أن قيمة J تكون موجبة في حالة المواد ذات خاصية المغنطة الحديدية و تكون سالبة في حالة المواد ذات خاصية ضد المغنطة الحديدية فإن الأزواج المتجاورة تحاول دوما الاصطفاف في نفس الإتجاه لخفض هاته الطاقة و تحقيق حالة الاستقرار و مع تكرار هذا النمط على إمتداد جميع سبينات الشبكة نصل في الأخير إلى نمط إتجاهي موحد على كل ذرات النظام، و ينتج عن هذا الفعل الجماعي عزم مغناطيسي كلي عياني يمكن قياسه، و يقال على المواد التي تعرض هذا النمط من التفاعل في غياب حقل مغناطيسي خارجي مطبق عليها أن لها خاصية المغنطة التلقائية. في الواقع هذا النمط من الانتظام طويل المدى ليس نهائيا على طول العينة بل تحد منه الإضطرابات الحرارية التي تشتت هذا التوجه العام في توحيد إتجاه السبينات داخل العينة، و ينتج عن ذلك تناقص خاصية المغنطة لهاته المواد إلى درجة إنعدامها.

لدراسة هذا التأثير نعتبر الوسط الخارجي المحيط بالعينة كخزان حراري يمكنه تبادل الحرارة مع العينة دون تبادل المادة و نعتبر النظام ككل (العينة زائد الوسط الخارجي) نظام معزول، هكذا يمكننا وصف المسألة ضمن إطار المجموعة القانونية و إستنباط المتغيرات الحرارية وفق التوزيع الاحصائي لهاته المجموعة. حيث يؤدي تفاعل الخزان الحراري مع سبينات العينة إلى إكتسابها أو فقدانها للطاقة مغيرتا وفقا لذلك إتجاهها، و بهذا الشكل سيزور النظام عدة تشكيلات مجهرية محتملة بوتيرة عالية، و يعتمد تقدير الكميات الفيزيائية المقاسة على مدى إحصائية و زمن تواجد النظام في تلك التشكيلات المجهرية أثناء زمن القياس الذي يكون كبيرا جدا مقارنة بالزمن الذي ينتقل فيه النظام من تشكيلة مجهرية محتملة إلى أخرى [1,22,24].

على العموم العدد الكلي N لسبينات المتواجدة داخل شبكة ذات d بعد يساوي $N=n^d$ ، يعني أنه في حالتنا هذه يكون لدينا $N=n^2$ ، حيث n تمثل عدد نقاط الشبكة في بعد واحد. و تعطى الطاقة الكلية لشبكة بتشكيلة معينة من الاتجاهات المحتملة لسبيناتها في غياب حقل مغناطيسي خارجي بالعلاقة التالية:

$$E_{config} = -J \sum_{\langle i,j \rangle}^N S_i S_j \quad (29.2)$$

ويكون الجمع على جميع السبينات المتجاورة إلى غاية N العدد الكلي لسبينات كما تقدم تفصيله، هذا ما يشير إليه الرمز $\sum_{\langle i,j \rangle}^N$. وفي وجود حقل مغناطيسي خارجي ذو القيمة H يضاف إلى العلاقة السابقة حد يصف تفاعل السبينات مع هذا الحقل الخارجي وتصير العلاقة كالآتي:

$$E_{config} = -J \sum_{\langle i,j \rangle}^N S_i S_j - H \sum_i^N S_i \quad (30.2)$$

2.4.2 حساب الكميات الفيزيائية في نموذج أيزينغ:

لتقدير الكميات الفيزيائية المختلفة للأنظمة المغلقة التي تكون في توازن حراري مع الوسط المحيط (خزان حراري) نحتاج إلى إيجاد التوزيع الاحتمالي القانوني الموصوف بتوزيع بولتزمان

$$P_{config}(\beta) = \frac{\exp(-\beta E_{config})}{Z} \quad (31.2)$$

$P_{config}(\beta)$: تمثل احتمال تواجد النظام عند التشكيلات التي تأخذ فيها الطاقة القيمة E_{config} ، حيث يكون دالة في درجة الحرارة T وبالتالي دالة في β حيث $\beta = 1 / k_B T$.
 Z : تمثل دالة التوزيع في المجموعة القانونية المعرفة بـ:

$$Z = \sum_{config} \text{EXP}(-\beta E_{config}) \quad (32.2)$$

ويجري الجمع على جميع التشكيلات الممكنة للشبكة التي تمثل حالات النظام المجهرية الممكنة ويمكن تقدير الكمية الفيزيائية A من خلال متوسط هذه الكمية على كل هاته الحالات كما يلي:

$$\langle A \rangle = \sum_{config} A_{config} P_{config}(\beta) \quad (33.2)$$

حيث أن عدد التشكيلات المحتملة في نموذج أيزينغ في بعدين يكون من رتبة N^2 ، حيث يمثل N عدد سبينات الشبكة، الأمر الذي يعقد المسألة في حساب المتوسطات لذلك نلجأ لإستخدام خوارزمية ميتروبوليس بدل الحساب المباشر.

من خلال ما سبق سوف نعرض طريقة حساب هاته المتوسطات من خلال محاكاة النموذج بخوارزمية ميتروبوليس [1, 24]:

✓ متوسط الطاقة $\langle E \rangle$: يحسب متوسط الطاقة في هاته الخوارزمية بالعلاقة التالية:

$$\langle E \rangle = \frac{1}{\text{Therm}} \sum_{i=1}^{\text{Therm}} E_i \quad (34.2)$$

حيث Therm تمثل عدد التشكيلات بعد بلوغ محاكاة النموذج حالة التوازن، و E_i طاقة كل تشكيلة.

✓ متوسط المغنطة $\langle M \rangle$: يحسب متوسط المغنطة في هاته الخوارزمية بالعلاقة التالية:

$$\langle M \rangle = \frac{1}{\text{Therm}} \sum_{i=1}^{\text{Therm}} S_i^{\text{config}} \quad (35.2)$$

تمثل S_i^{config} قيمة جمع سبينات الشبكة الواحدة S_i $\sum_{i=1}^N$

✓ الحرارة النوعية عند ثبات الحجم C_V : حيث تمثل إنحراف الطاقة مضروب في معامل وتعطى بالشكل:

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_{N,V} = \left(\frac{\partial E}{\partial \beta} \cdot \frac{\partial \beta}{\partial T} \right)_{N,V} = -\frac{1}{k_B T^2} \left(\frac{\partial E}{\partial \beta} \right)_{N,V} = \frac{\beta}{T} \left[- \left(\frac{\partial E}{\partial \beta} \right)_{N,V} \right] \quad (36.2)$$

$$\Rightarrow C_V = \frac{\beta}{T} \cdot \text{Var}(E) = \frac{\beta}{T} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (37.2)$$

✓ قابلية المغنطة χ : حيث تمثل إنحراف المغنطة مضروب في معامل وتعطى بالشكل [1]:

$$\chi = \frac{\partial}{\partial H} \langle M \rangle = \beta \cdot \text{Var}(M) = \beta (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \quad (38.2)$$

على العموم هناك تقريب لحل نموذج أيزينغ في بعدين يمكّننا من عرض السلوك العام للنظام بشكل عام وميسر، ويكون ضمن نظرية مستخدمة بكثرة في المجالات الفيزيائية تدعى بنظرية متوسط الحقل، حيث تعتمد على تقريب الكمية الفيزيائية المراد حسابها بمتوسط لها بشكل مناسب، وينتج تطبيقها على نموذج أيزينغ التوصل للعبارتين التاليتين للطاقة الحرة والمغنطة على التوالي [24]:

$$F = -k_B T N \ln(2 \cosh(\beta H_{\text{eff}})) \quad (39.2)$$

$$\langle M \rangle = N \langle S \rangle = N \tanh(\beta H_{\text{eff}}) \quad (40.2)$$

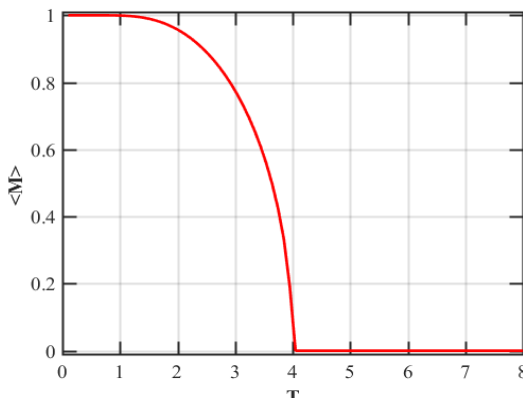
حيث أنه ضمن تقريب معين يعتمد على إعتبار المتوسط الحراري $\langle S \rangle$ هو نفسه لجميع السبينات، تأخذ قيمة طاقة تفاعل سبينات الجوار H_{eff} العبارة التالية:

$$H_{\text{eff}} = - (qJ \langle S \rangle + H) \quad (41.2)$$

حيث q تمثل عدد الجوار الأول، وبذلك تصبح المعادلة (40.2) في حالة إنعدام قيمة الحقل المغناطيسي الخارجي ($H = 0$) معادلة من الشكل:

$$\langle M \rangle = N \langle S \rangle = N \tanh(\beta H_{\text{eff}}) = N \tanh(qJ \langle S \rangle) \quad (42.2)$$

$$\Rightarrow \langle S \rangle = \tanh(qJ \langle S \rangle)$$



وهذه المعادلة غير خطية لا يمكن حلها إلا عددياً حيث نستخدم طريقة نيوتن رفسن عند درجات مختلفة من الحرارة، ومن الملاحظ أن القيمة المعدومة للمغنطة ($\langle S \rangle = 0$) تكون حلاً بديهياً حيث يوافق درجات مرتفعة للحرارة.

يمثل الشكل (8.2) نتائج هذا الحل حيث من الملاحظ أن المغنطة تنعدم مع درجات حرارة مرتفعة وتكون حاضرة عند درجات حرارة منخفضة [24].

الشكل (8.2): تغيرات متوسط المغنطة بدلالة T [24].

وهذا يمثل طورين للمادة حيث يكون الانتقال بينهما حاد وبشكل مفاجئ عند درجة حرارة حرجة T_c .

تتنبأ نظرية الحقل المتوسط بقيمة درجة الحرارة الحرجة عند $2.5K$ إذا اعتبرنا $(J / k_B = 1)$.

كما يمكن ملاحظة أن المغنطة تتخامد بشكل حاد مع إقتراب درجة الحرارة T من درجة الحرارة الحرجة T_c ، حيث يمكن تقدير هذا التخامد بشكل تحليلي من خلال نشر الدالة:

$$\tanh(x) \approx x - \frac{1}{3} x^3 \quad (43.2)$$

بجوار T_c حيث تكون تأخذ $\langle S \rangle$ قيمة صغيرة، فنحصل على:

$$\begin{aligned} \langle S \rangle &\approx \beta q J \langle S \rangle - \frac{1}{3} (\beta q J \langle S \rangle)^3 \Rightarrow \\ \langle S \rangle &\left(\langle S \rangle^2 - \frac{3}{T (q\beta J)^3} \left(\frac{qJ}{k_B} - T \right) \right) = 0 \end{aligned} \quad (44.2)$$

وهي معادلة تقبل حلا $\langle S \rangle = 0$ يوافق المغنطة الطردية (بارامغناطيسية) وحلا موجبا يوافق المغنطة الحديدية:

$$\langle S \rangle = \sqrt{\frac{3}{T} \left(\frac{k_B T}{qJ} \right)^3} (T_c - T)^{\frac{1}{2}} \approx (T_c - T)^{\tilde{\beta}} \quad (45.2)$$

حيث $\tilde{\beta} = \frac{1}{2}$ تدعى بالأس الحرج، وتأخذ درجة الحرارة الحرجة القيمة $T_c = \frac{qJ}{k_B}$ [24].

3.4.2 خوارزمية ميتروبوليس على نموذج أيزينغ:

لقد ارتأينا في كتابة السطور البرمجية لهاته الخوارزمية بلغة البايثون نسخة 3.1 عن طريق محرر البرامج باي شارم نسخة 2020.2.3 وذلك لعدة إعتبارات أهمها أن هاته اللغة ذات مصدر مفتوح يمكن لجميع فئات المطورين البرمجيين والفيزيائيين خاصة النظريين منهم استعمالها بكل خصائصها دون قيود، مما يُوقر فضاء واسع جدا عبر العالم لتبادل الخبرات سواءا اكانت تخص اللغة في حد ذاتها وطرق تعلمها أو كانت تخص الموضوع الذي ستعالجه برمجيا بهاته اللغة، كذلك من أهم أسباب إختيارها هو أنها تتوفر على عدد ضخم من المكتبات البرمجية المزودة بدوال تختصر علينا كتابة الاكواد بكل تفاصيلها، وخاصة تلك المكاتب التي تعنى بالحسابات العددية، والإحصائية، وحساب المصفوفات، وكذلك رسم المنحنيات البيانية والمخططات الإحصائية، نذكر منها على سبيل المثال لا الحصر مكتبة نومباي (numpy) والتي تضم عدد كبير من الدوال التي تعنى بالحسابات العددية والشعاعية وكذلك الإحصائية، دون أن ننسى مكتبة ماتبلوتليب (matplotlib) المزودة بدوال خاصة برسم المنحنيات و الاعمدة الإحصائية.

في سردنا لخطوات الخوارزمية لمحاكاة نموذج أيزينغ سنتبع منهج نحاول فيه إدراج كل خطوة من خطوات خوارزمية ميتروبوليس مع ما يقابلها من السطور البرمجية حتى يتمكن القارئ من تحليل عمل البرنامج بكل يسر.

أولا لمحاكاة نموذج أيزينغ الموصوف سابقا والذي هو عبارة على شبكة مربعة (ذات بعدين) يوجد بها N عدد سبينات تأخذ أحد الوضعيتين أعلى أو أسفل نحتاج تمثيل هذه الشبكة عدديا على الحاسوب وذلك يتأتى من خلال مكتبة نومباي (numpy) بإستعمال دالة تولد لنا مصفوفة مربعة $(N*N)$ ، عناصرها تأخذ أحد القيمتين العدديتين ± 1 حيث $+1$ يمثل الوضعية أعلى لسبين و -1 يمثل الوضعية أسفل، ولمحاكاة فرضية تساوي الإحتمال في الإحصاء التي تنص على أن النظام يمكنه أن يحتل أي تشكيلة من هاته التشكيلات (والتي تمثل في الواقع الحالات المجهرية للطاقة) بنفس إحتمال الحدث، سنقوم بإستخدام دالة تولد لنا هاته المصفوفات بتوزيع إحتمالي منتظم [14,9,1].

يوجد عدة طرق لكتابة ما سبق برمجيا منها ما قمنا به من خلال الكود التالي:

```

8 def initialstate(N):
9     # إنشاء مصفوفة مربعة (N*N) قيمها صفرية
10    state = np.empty((N,N), dtype=np.int8)
11    # ملئ المصفوفة السابقة بإحدى القيمتين +1 أو -1 بشكل عشوائي وبكثافة منتظمة
12    for i in range(N):
13        for j in range(N):
14            state[i,j] = 2*np.random.randint(2)-1
15    return state

```

ثانيا من متطلبات الخوارزمية هو هاميلتوني النظام والذي من خلاله يمكن حساب طاقة كل تشكيلة محتملة من التشكيلات الموصوفة حاسوبيا بالمصفوفات المولدة عشوائيا كما تم شرحه في الخطوة السابقة، الصيغة الرياضية لهذا الهاميلتوني المعطاة سابقا في وصف النموذج هي من الشكل:

$$E_{config} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i \quad (46.2)$$

حيث نقوم بتعريف دالة برمجية لحساب هذا المجموع المعقد نوعا ما، بإستخدام ترشيح المصفوفات، حيث تستخدم هذه الطريقة بكثرة في معالجة الصور الرقمية المكونة من عدد هائل من البكسلات التي تمثل عناصر مصفوفة في الحاسوب، وكون تفصيل هذه الطريقة خارج على حدود هاته المذكرة سنكتفي فقط بعرض الدالة البرمجية في الشكل الموالي:

```

12 def get_energy(lattice,J,H):
13     # توليد المرشح المناسب
14     kern = generate_binary_structure(2, 1)
15     kern[1][1] = False
16     # جمع على سبينات الجوار حيث يمثل الحد الاول من الهاميلتوني
17     arr = -J*lattice * convolve(lattice, kern, mode='constant', cval=0)
18     # إضافة الحد الثاني الذي يمثل طاقة التفاعل مع الحقل الخارجي
19     return arr.sum()-H*lattice.sum()

```

لقد عرضنا هاته الدالة البرمجية لحساب طاقة كل تشكيلة، على الرغم من عدم إستعمالنا لها في الخوارزمية الفعلية التي استخدمناها، وذلك كون إستخدام هاته الدالة يقلل من زمن المحاكاة وهو مقصد من مقاصد البرمجة لزيادة الفاعلية ودقة النتائج.

أما عن عدم إستعمالنا لها فهو راجع إلى أن الدالة على الرغم من أنها تعطي نفس النتائج المرجوة من المحاكاة إلا أنها لا تصف الدورية في الشروط الحدية للنظام والذي قد يؤثر على النتائج في بعض النماذج الأخرى، لهذا إستعملنا الدالة البرمجية الموالية على الرغم من أن وقت تنفيذها أطول.

```

18 def get_energy(config, JJ, H):
19     N = len(config)
20     # طاقة الشبكة تكون مجموع قيم كل سبيناتها
21     energy = 0
22     for i in range(len(config)):
23         for j in range(len(config)):
24             # تحديد السبين المعرف عند الحصر (i, j)
25             S = config[i, j]
26             # جمع طاقات الجوار الأول مع الأخذ في الحسبان الدورية في الشروط الحدية
27             nb = config[(i+1)%N, j] + config[i, (j+1)%N] + config[(i-1)%N, j] + config[i, (j-1)%N]
28             # رفع قيمة طاقة الشبكة [طاقة جوار سبين واحد (i, j)]
29             energy += nb*S
30             # طاقة معامل التفاعل JJ و إلغاء التكرار الحاصل عند الجهات الأربعة لسبين
31             # إضافة حد تفاعل السبينات مع الحقل الخارجي H
32     return -JJ*energy/4. -H*np.sum(config)

```

ثالثا سوف نعرف دالة برمجية يمكننا من حساب المغنطة لكل تشكيلة والتي تعطي بالعلاقة التالية:

$$M_{config} = \sum_{i=1}^N S_i \quad (47.2)$$

الجمع هنا يتم على جميع سبينات كل تشكيلة، نقوم بهذا برمجيا من خلال دالة في مكتبة "نومباي" تقوم بجمع عناصر أي مصفوفة معطاة لها:

```

44 def calcMag(config):
45     # الجمع يجري على سبينات كل تشكيلة
46     mag = np.sum(config)
47     return mag

```

رابعا بعدما تم تحضير هذه الدوال البرمجية والتي سنستخدمها كمدخلات ودوال ضمنية للدالة التي ستنفذ خطوات خوارزمية ميتروبوليس، الان سوف نقوم بكتابة السطور البرمجية للدالة الأساسية في برنامج المحاكاة والتي تضم خطوات ميتروبوليس حيث ستوجهنا إلى التشكيلات الأكثر احتمالا لتواجد النظام فيها حيث:

1. نعطي لها كمتغير إدخال المصفوفة المولدة بالدالة في أول خطوة (initialstate).
2. من ثمة نقوم بحساب طاقة هاته المصفوفة E_{old_config} من خلال دالة الخطوة الثانية (get_energy).
3. نقوم بتغيير إتجاه سبين واحد من سبينات المصفوفة يُأخذ بشكل عشوائي وبتوزيع منتظم من أجل ضمان عدم التحيز لتشكيلات معينة دون أخرى والذي تحتمه علينا فرضية تساوي إحتمال الحدث.
4. نقوم بعدها بحساب طاقة التشكيلة الجديدة، E_{new_config} ومن ثمة نحسب الفرق الطاقوي بينها وبين التشكيلة القديمة حيث $(\Delta E = E_{new_config} - E_{old_config})$.
5. الان نقوم بفحص قابلية إنتقال النظام إلى الحالة الجديدة من خلال قبول أو رفض هاته الحالة حيث:

← إذا كانت قيمة $\Delta E < 0$ يتم قبول الحالة الجديدة لأن النظام يحاول دائما الذهاب إلى حالة الاستقرار والتي تكون ذات طاقات دنيا.

← إذا كانت قيمة $\Delta E > 0$ نولد عدد عشوائي r بتوزيع منتظم في المجال $[0,1]$ نقارنه بالقيمة $\exp(-\beta\Delta E)$ حيث إذا كان $(r \leq \exp(-\beta\Delta E))$ يتم قبول الانتقال إلى التشكيلة الجديدة بإحتمال قدره $P_r = \exp(-\beta\Delta E)$ وإذا كان $(r > \exp(-\beta\Delta E))$ يتم رفض الانتقال إلى التشكيلة الجديدة بإحتمال قدره $(1 - P_r)$.

6. سنقوم بتكرار الخطوات من 1 إلى 5 عدة مرات حتى يتم معايرة جميع سبينات الشبكة، يشكل هذا التكرار زمن ميتروبوليس بحيث في كل مرة إذا ما تم قبول الانتقال إلى التشكيلة الجديدة (*new_config*) تأخذ مكان التشكيلة القديمة في التكرار التالي، ماعدا ذلك نعاود التكرار بنفس التشكيلة القديمة (*old_config*)، حيث أن زمن ميتروبوليس كله يمثل خطوة واحدة من خطوات مونت كارلو.

7. نكرر الخطوات من 1 إلى 6 عدة مرات حتى الوصول إلى حالة التوازن، يشكل هذا التكرار زمن مونت كارلو. سنوضح في الشكل التالي الدالة البرمجية التي تمثل خطوات ميتروبوليس، لكن نود أن نشير إلى أن الفرق الطاقوي ΔE محسوب في هاته الدالة بشكل مباشر دون استخدام الدالة (*get_energy*) لتقليل زمن المحاكاة.

```

41 def metropolis(config, beta):
42     # تحديد عدد عناصر الشبكة N في بعد واحد
43     N = len(config)
44     # تكرار خطوات ميتروبوليس على عدد سبينات الشبكة الكلي N*N لضمان المرور عليها لأن توزيع الإختيار منتظم
45     for i in range (N*N):
46         # إختيار سبين من الشبكة المعرف ب (x,y) مأخوذ بشكل عشوائي ويتوزع منتظم
47         x = np.random.randint(0,N)
48         y = np.random.randint(0,N)
49         # تخزين وضعية السبين الذي تم إختياره للرجوع إليه في حالة الرفض
50         spin_i = config[x,y]
51         # تغيير وضعية السبين المختار (حالة جديده للنظام محتملة)
52         config[x,y]=-spin_i
53         # تعيين جوار السبين المختار الذي تم تغيير وضعيته لحساب الفرق الطاقوي
54         nbs = config[(x+1)%N,y] + config[x,(y+1)%N] + config[(x-1)%N,y] + config[x,(y-1)%N]
55         # تعيين الفرق الطاقوي بين التشكيلة الأولى قبل تغيير وضعية السبين والتشكيلة الثانية بعد التغيير
56         dE = 2*spin_i*nbs
57         # إختيار مرور النظام من الحالة القديمة إلى الحالة الجديدة
58         if np.random.rand() > np.exp(-beta*dE):
59             # إذا تم الرفض نرجع التشكيلة للحالة الإبتدائية في أو الحلقة
60             config[x,y]=spin_i
61             # إذا تم القبول نغير الحالة الجديده هي حالة إبتدائية للتكرار الموالي
62     return config

```

خامسا سنقوم الان ببرمجة دالة تقوم بتكرار الدالة السابقة التي تجسد خطوات خوارزمية ميتروبوليس إلى غاية الوصول إلى حالة الإتزان الحراري، ومن ثمة أخذ عدد كافي من تشكيلات هاته الحالة لإجراء عملية حساب المتوسطات الفيزيائية المختلفة وتعاد هاته العملية من أجل درجات حرارة مختلفة، الشكل الموالي يوضح السطور البرمجية لهاته الدالة:

```

65 def ISING_model(nT, N, JJ, H, burnin, mcSteps):
66     # تحديد شعاع يتكون من nT قيمة لدرجة الحرارة T
67     T = np.linspace(1.2, 3.8, nT);
68     # إنشاء مصفوفة فارغة للكيمات الفيزيائية المختلفة لتخزين النتائج
69     energy = []
70     mag = []
71     cv = []
72     capa = []
73     # تكرار خوارزمية ميتروبوليس من أجل درجات الحرارة المحددة في الشعاع السابق
74     for temperature in range(nT):
75         # إنشاء المصفوفة الابتدائية
76         lattice = initialstate(N)
77         # إنشاء متغيرات وبسيطة لحساب الطاقة والمغطة
78         E1 = M1 = E2 = M2 = 0
79         # تحديد قيمة بيتا لحساب الوزن الاحصالي وفق معامل بولتزمان
80         beta = 1/T[temperature]
81         # تكرار خوارزمية ميتروبوليس للوصول إلى حالة الإتزان الحراري (thermalisation)
82         for _ in range(burnin):
83             metropolis(lattice, beta)
84         # تحريك خطوات مونت كارلو ضمن تشكيلات حالة الإتزان لحساب المتوسطات
85         for i in range(mcSteps):
86             metropolis(lattice, beta)
87             enr = get_energy(lattice, JJ, H)
88             mg = calcMag(lattice)
89             E1 += enr
90             M1 += mg
91             M2 += mg**2
92             E2 += enr**2
93         # حساب متوسط الطاقة
94         energy.append(E1/mcSteps)
95         # حساب متوسط المغطة
96         mag.append(M1/mcSteps)
97         # حساب متوسط السعة الحرارية
98         cv.append(((E2/mcSteps)-(E1/mcSteps)**2)*(beta/T[temperature]))
99         # حساب متوسط قابلية المغطة
100        capa.append(((M2/mcSteps)-(M1/mcSteps)**2)*beta)
101    return T, energy, mag, cv, capa

```

4.4.2 نتائج محاكاة نموذج أيزينغ:

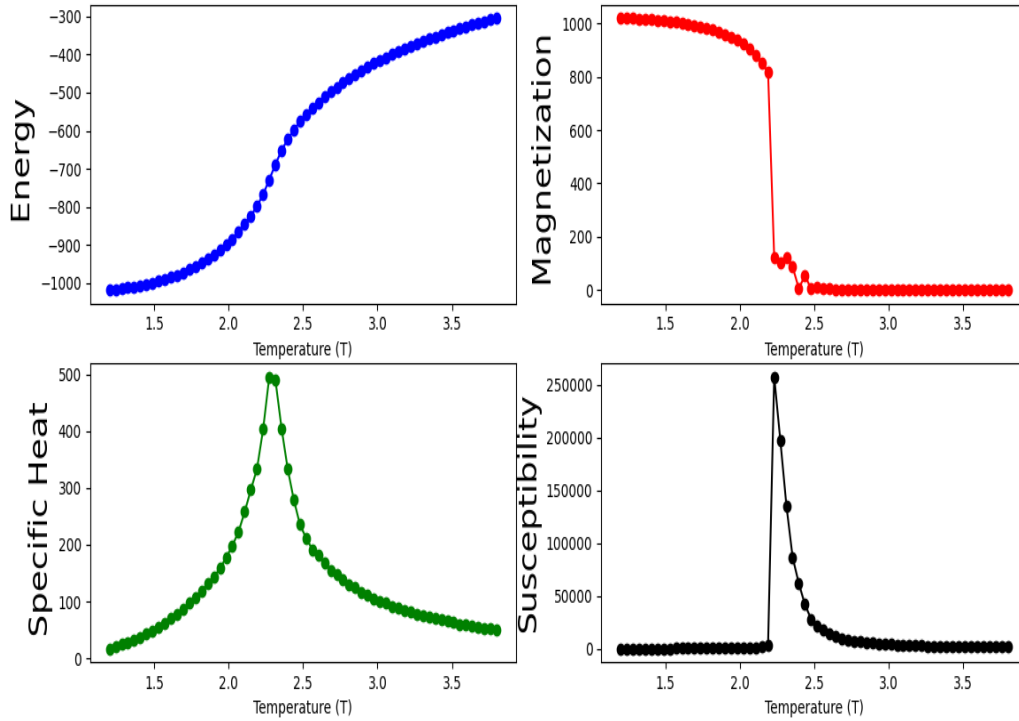
عند محاكاة النموذج من أجل مصفوفة مربعة (32*32) حيث $(\beta = \frac{1}{T}, k_B = 1)$ وفي غياب حقل مغناطيسي خارجي وكذلك بأخذ قيمة معامل تفاعل الجوار ($J=1$)، نتمكن من حساب بعض الكميات الفيزيائية، وفيما يلي سنعرض السطور البرمجية للدالة الأساسية التي ستقوم بتشغيل كل الدوال السابقة من أجل متغيرات نموذج أيزينغ المراد محاكاته، وتقوم كذلك برسم المنحنيات البيانية الموضحة في الشكل (9.2).

```

104 def main():
105     # تحديد بعد الشبكة المراد محاكاتها
106     N = 32
107     # تحديد قيمة معامل تفاعل الجوار الاول و قيمة الحقل المغناطيسي الخارجى
108     JJ=1
109     H =0
110     # تشغيل العداد الزمني الخاص بالحاسوب لقياس زمن المحاكاة
111     start_time = timer()
112     # إستدعاء دالة المحاكاة
113     T,E,M,C,X = ISING_model(nT=64, N=N, JJ=JJ, H=H, burnin=10**5, mcSteps=10**5)
114     # توقيف العداد الزمني لحرض زمن المحاكاة
115     end_time = timer()
116     # عرض زمن المحاكاة
117     print("Elapsed time: %g seconds" % (end_time - start_time))
118     f = plt.figure(figsize=(18,10));
119     # رسم مختلف المنحنيات البيانية
120     f.suptitle(f"Ising Model: 2D Lattice\nSize: {N}x{N}", fontsize=20)
121     # منحنى تغير متوسط الطاقة بدلالة درجة الحرارة
122     _ =f.add_subplot(2,2,1)
123     plt.plot(T, E, '-o', color='Blue')
124     plt.xlabel("Temperature (T)", fontsize=10)
125     plt.ylabel("Energy ", fontsize=20)
126     plt.axis('tight')
127     # منحنى تغير متوسط الممغطة بدلالة درجة الحرارة
128     _ =f.add_subplot(2,2,2)
129     plt.plot(T, np.abs(M), '-o', color='Red')
130     plt.xlabel("Temperature (T)", fontsize=10)
131     plt.ylabel("Magnetization ", fontsize=20)
132     plt.axis('tight')
133     # منحنى تغير متوسط السعة الحرارية بدلالة درجة الحرارة
134     _ =f.add_subplot(2,2,3)
135     plt.plot(T, C, '-o', color='Green')
136     plt.xlabel("Temperature (T)", fontsize=10)
137     plt.ylabel("Specific Heat ", fontsize=20)
138     plt.axis('tight')
139     # منحنى تغير متوسط قابلية الممغطة بدلالة درجة الحرارة
140     _ =f.add_subplot(2, 2, 4 )
141     plt.plot(T, X, '-o', color='Black')
142     plt.xlabel("Temperature (T)", fontsize=10)
143     plt.ylabel("Susceptibility", fontsize=20)
144     plt.axis('tight')
145
146     plt.show()
147
148 if __name__ == '__main__':
149     main()

```

Ising Model: 2D Lattice
Size: 32x32



الشكل (9.2): نتائج محاكاة نموذج أيزينغ من أجل شبكة (32*32).

- ◀ متوسط الطاقة (E): سوف نحسب متوسط الطاقة عند درجات مختلفة من الحرارة كما يوضحه المنحنى باللون الأزرق حيث نلاحظ أن طاقة النظام ترتفع مع ارتفاع درجة الحرارة كما هو متوقع.
- ◀ متوسط المغنطة (M): من الملاحظ أن المغنطة تنخفض مع ارتفاع درجة الحرارة كما يبينه المنحنى باللون الأحمر، حيث أن هذا الانخفاض يكون بشكل حاد عند درجة حرارة تقارب 2.5K حيث تنعدم تماما ويتحول طور المادة من المغنطة الحديدية (فيرومغناطيسية) إلى المغنطة الطردية (بارامغناطيسية)، تدعى درجة الحرارة هذه كما رأينا بدرجة الحرارة الحرجة.
- ◀ الحرارة النوعية عند حجم ثابت C_V (السعة الحرارية): من الملاحظ أن المنحنى الخاص بالحرارة النوعية C_V باللون الأخضر له مستقيم مقارب معادلته من الشكل ($T=T_c=2.4 \approx 2.5K$)، حيث أن الحرارة النوعية تؤول إلى مالانهاية عند درجة الحرارة الحرجة T_c ، هذه النقطة تمثل نقطة التحول في طور المادة.
- ◀ قابلية المغنطة χ : كما يبينه المنحنى باللون الأسود فإن قابلية المغنطة تكون معدومة وتظهر بشكل حاد عند حدود درجة الحرارة الحرجة.

الفصل الثالث

طريقة موقتي كالمرو

علمي الحزب انزل الالكسية

3 الفصل الثالث: التكامل على المسار في نموذج الهزازات الكمية:

1.3 تمهيد:

يعتبر الحل التحليلي لعدة مسائل بالتكامل على المسار معقد في معظم الأحيان، لذا نلجأ إلى الطرق العددية، ومن أهمها، طريقة مونتي كارلو. في هذا الفصل سنستخدم خوارزمية ميتروبوليس لإجراء محاكاة مونتي كارلو على مسألة الهزازات الكمية بإسلوب التكامل على المسار، إذ تعتبر هذه المسألة خياراً جيداً بسبب توفر حلها التحليلي، مما يجعل التأكد من نجاعة الطريقة متاحاً، من خلال المقارنة بين النتائج التحليلية والعددية [13,3].

2.3 التكامل على المسار:

يعرّف التكامل على المسار كطريقة أخرى لصياغة ميكانيكا الكم، تختلف عن صياغة شرودينغر وهايزنبرغ. بالرغم من أن هذه الطريقة لا تقدم ميزة من المنظور الرياضي، إلا أنها توفر صورة أفضل للفهم، نظراً لعدم انفصالها الجذري عن الميكانيك الكلاسيكي، ويعتبر استخدامها أكثر فائدة في حل المسائل الفيزيائية [12].

1.2.3 علاقة التكامل على المسار بالتصور التقليدي لميكانيك الكم:

قبل الخوض في مفهوم التكامل على المسار بشكل دقيق، سنعرّج بداية عن مقارنة بسيطة بين صياغتي شرودينغر وهايزنبرغ لميكانيك الكم، والرابط بينهما وبين التكامل على المسار.

يصف شرودينغر ميكانيك الكم من خلال المعادلة:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle_s = \hat{H}(\hat{p}, \hat{q}) |\Psi(t)\rangle_s \quad (1.3)$$

حيث \hat{H} هو مؤثر الطاقة الذي يصف النظام، والحرف s نسبة لكلمة Schrodinger .

\hat{p}, \hat{q} هما مؤثرا الفضاء وكمية الحركة على الترتيب، يخضعان لعلاقة التبديل $[\hat{p}, \hat{q}] = -i\hbar$.

حل معادلة شرودينغر هو إيجاد دالة الموجة التي تواكب الجملة، ويعبر عن تطورها بالعلاقة التالية:

$$|\Psi(t')\rangle_s = U(t', t) |\Psi(t)\rangle_s \quad (2.3)$$

يرمز $|\Psi(t)\rangle_s$ لشعاع الحالة، و $\psi(q, t)$ لدالة الموجة:

$$\psi(q, t) = \langle q | \Psi(t) \rangle_s \quad (3.3)$$

$$U(t', t) = e^{-i\hat{H}(t'-t)/\hbar} \quad (4.3)$$

حيث U هو مؤثر التطور

بأخذ العلاقة (2.3)، والتأثير على $|\Psi(t')\rangle_s$ بمقلوب الأساس $\langle q' |$ وإدخال علاقة تمام الأساس

$$1 = \int dq |q\rangle \langle q|$$

$$\langle q' | \Psi(t') \rangle_s = \int dq \langle q' | e^{-i\hat{H}(t'-t)/\hbar} | q \rangle \langle q | \Psi(t) \rangle_s \quad (5.3)$$

ومنه يمكن كتابة:

$$\psi(q', t') = \int dq K_S \psi(q, t) \quad (6.3)$$

$$K_S = \langle q' | e^{-i\hat{H}(t'-t)/\hbar} | q \rangle \text{ حيث}$$

يعرف الكائن K_S بسعة الانتقال ويدعى أيضا بالمنتشر في صياغة شرود ينغر [12,3].

أما في صياغة هايزنبرغ، تعطى العلاقة $\psi(q', t') = \langle q', t' | \Psi \rangle_H$ وبإدخال $1 = \int dq |q\rangle \langle q|$ نجد:

$$\psi(q', t') = \langle q', t' | \Psi \rangle_H = \int dq \langle q', t' | q, t \rangle \langle q, t | \Psi \rangle_H \quad (7.3)$$

$$\psi(q', t') = \int dq K_H \psi(q, t) \quad (8.3)$$

حيث: $K_H = \langle q', t' | q, t \rangle$. يتضح من العلاقتين (6.3) و (8.3) أن $K_H = K_S$ ، أي:

$$\langle q', t' | q, t \rangle = \langle q' | e^{-i\hat{H}(t'-t)/\hbar} | q \rangle \quad (9.3)$$

من خلال هذه المقارنة، بات من الواضح أن التكامل على المنتشر يؤدي للحصول على دالة الموجة، وبعبارة أخرى حل معادلة شرود ينغر دون الرجوع الى المؤثرات أو فضاء هيلبرت الشعاعي، ويعبر عن المنتشر أيضا بنواة فاينمان، نسبة للعالم الذي طور صياغة التكامل على المسار [12,7,3].

2.2.3 تكامل فاينمان لميكانيك الكم غير النسبي:

يتطلب الوصول إلى صياغة تكامل فاينمان، حساب المنتشر $\langle q' | e^{-i\hat{H}T} | q \rangle$ [13,7]. وللقيام بذلك يقسم محور الزمن إلى أجزاء صغيرة متساوية [13,3]. أي يقسم T إلى N خطوة بحجم δt حيث $N\delta t = T$ وكنتيجة لهذا التقسيم يصبح المنتشر بالشكل التالي [3]:

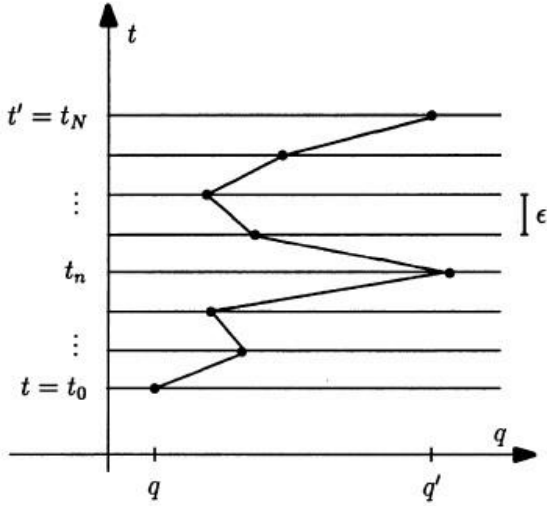
$$\langle q' | e^{-iHT} | q \rangle = \langle q' | e^{-iH\delta t} e^{-iH\delta t} \dots e^{-iH\delta t} | q \rangle \quad (10.3)$$

للتبسيط تستخدم الوحدات الطبيعية في الحسابات ($\hbar = c = 1$) [13]. وبإدخال علاقة تمام الأساس

بين كل دالتين أسيتين في العلاقة (10.3) نجد:

$$\langle q' | e^{-iHT} | q \rangle = \left(\prod_{n=1}^{N-1} \int dq_n \right) \langle q' | e^{-iH\delta t} | q_{N-1} \rangle \langle q_{N-1} | e^{-iH\delta t} \dots \times e^{-iH\delta t} | q_1 \rangle \langle q_1 | q \rangle \quad (11.3)$$

تفسير ما سبق هو تقسيم الزمن إلى شرائح زمنية عددها N ، كخطوة أولى، ثم تحسب السعة الانتقالية $\langle q_{n+1} | e^{-iH\delta t} | q_n \rangle$ للجسيم الذي يترك الموضع q_n في اللحظة t_n ويصل الموضع q_{n+1} في اللحظة t_{n+1} . الخطوة الموالية هي مضاعفة هذه الأخيرة، للحصول على سعة إنتقال جسيم يغادر الموضع q ليصل إلى q' خلال المدة T عبر مسار محدد. تكرر هذه الخطوات لكل المسارات الممكنة وتجمع السعات لكل مسار للحصول على السعة الإجمالية $\langle q' | e^{-iHT} | q \rangle$ [13].



الشكل (1.3): تمثيل أحد المسارات كمنحنى منعرج [4].

يمثل أحد هذه المسارات في الشكل (1.3) كمنحنى منعرج، حيث تأخذ جميع هذه المسارات الممكنة والتي تساهم في سعة الانتقال وفق لمبدأ التراكب في ميكانيك الكم [3].

لحساب سعة الإنتقال الجزئية $\langle q_{n+1} | e^{-iH\delta t} | q_n \rangle$ نتبع سلسلة من الخطوات موجودة بشكل تفصيلي في المرجع [4]. سنكتفي بعرض الصيغة النهائية لها.

لحساب سعة الإنتقال الجزئية $\langle q_{n+1} | e^{-iH\delta t} | q_n \rangle$ نتبع سلسلة من الخطوات موجودة بشكل تفصيلي في المرجع [4]. سنكتفي بعرض الصيغة النهائية لها.

$$\begin{aligned} \langle q_{n+1} | e^{-iH\delta t} | q_n \rangle &= \left(\frac{-im}{2\pi\delta t} \right)^{1/2} \exp \left\{ i\delta t \left[\left(\frac{q_{n+1} - q_n}{\delta t} \right)^2 - V(q_{n+1}) \right] \right\} \end{aligned} \quad (12.3)$$

لدينا الآن سعة إنتقال لجسيم يغادر الموضع q_n ليصل للموضع q_{n+1} في مدة δt ، وبإدخال العلاقة (12.3) في العلاقة (11.3) يمكن الحصول على سعة الاحتمال الاجمالية.

$$\langle q' | e^{-iHT} | q \rangle = \left(\frac{-im}{2\pi\delta t} \right)^{\frac{N-1}{2}} \left(\prod_{n=1}^{N-1} \int dq_n \right) \exp \left[i\delta t \left(\sum_{j=0}^{N-1} \left(\frac{q_{j+1} - q_j}{\delta t} \right)^2 - V(q_{j+1}) \right) \right] \quad (13.3)$$

وبسبب أن الزمن ليس كمية منفصلة، فيجب الأخذ في الاعتبار حد الاستمرارية والذي يجعل δt لا متناهي الصغر، وباعتبار هذه الإستمرارية يمكن تعريف الرموز التالية [7]:

$$\begin{aligned} \left(\frac{-im}{2\pi\delta t} \right)^{\frac{N-1}{2}} \left(\prod_{n=1}^{N-1} \int dq_n \right) &= \int D[q(t)] , & \frac{q_{j+1} - q_j}{\delta t} &= \dot{q} \\ \delta t \sum_{j=0}^{v-1} &\rightarrow \int dt \end{aligned} \quad (14.3)$$

ونكتب:

$$\langle q' | e^{-iHT} | q \rangle = \int D[q(t)] \exp[i \int dt \left(\frac{m\dot{q}^2}{2} - V(q) \right)] \quad (15.3)$$

يلاحظ أن ما داخل الدالة الأسية هو تعريف دالة الفعل. يمكن الآن كتابة السعة الإجمالية في صيغتها النهائية، والتي تمثل التكامل على جميع المسارات الممكنة وفقا لمبدأ التراكب في ميكانيك الكم [2,3,10,12].

$$\langle q' | e^{-iHT} | q \rangle = \int D[q(t)] e^{iS[q(t)]} \quad (16.3)$$

يتم تحديد مساهمة كل مسار من خلال دالة الفعل S [5,8].

$$S(q, \dot{q}) = \int_t^{t'} dt \left(\frac{m}{2} \dot{q}^2 - V(q) \right) = \int_t^{t'} dt L(q, \dot{q}) \quad (17.3)$$

3.3 تحضير التكامل على المسار للمحاكاة العددية:

إنّ الإنطلاق من العلاقة (1.3) لتقييم التكامل على المسار عدديا، لا يعتبر طريقة جيدة، لهذا سيكون الهدف من هذا العنصر، البحث عن صياغة تسهل معالجته عدديا. وذلك عن طريق ربطه بالإحصاء ونزع صفة الإستمرارية عنه من خلال التقطيع [13].

1.3.3 ربط التكامل على المسار بالإحصاء:

الخطوة الأولى للقيام بذلك هو التحوّل من زمن مينكوفيسكي إلى الزمن الإقليدي [3,10,13]. ويقام بهذا الإجراء نظرا لأنه من الناحية العملية لا يمكن الحساب عدديا إلا في الفضاء الإقليدي، وذلك بسبب تذبذبات الدالة الأسية في التكامل، غير المتحكم فيها عدديا. ولحل هذا الإشكال يتم إدخال الزمن التخيلي في الأس، باستبدال الزمن الطبيعي بزمن تخيلي $t \rightarrow -i\tau$. ويتم تدوير الفعل إلى فعل إقليدي من خلال التغيير التالي: $\dot{q}^2 \rightarrow -(\partial_\tau q)^2$. [3].

$$iS \rightarrow -S_E \equiv S_E[q] = \int d\tau L_E(q, \dot{q}) = \int d\tau \left(\frac{1}{2} m (\partial_\tau q)^2 + V(q) \right) \quad (18.3)$$

ومنه يمكن كتابة التكامل على المسار في الفضاء الإقليدي كالتالي:

$$\langle q' | e^{-iH(\tau' - \tau)} | q \rangle = \int \mathcal{D}q e^{-S_E[q]} \quad (19.3)$$

يلاحظ أن لاغرانجيان في التوقيت الإقليدي يمثل الهاملتوني في توقيت مينكوفيسكي، كما أن التكامل أصبح مشابها لدالة التوزيع في الميكانيك الإحصائي، مما يسمح باستخدام الطرق الإحصائية لتقييم التكامل عدديا، والحصول على كميات أخرى قابلة للقياس مثل طاقة الحالة الأساسية للنظام [13].

2.3.3 تقطيع المنتشر:

حتى نتمكن من إجراء المحاكاة العددية من خلال طريقة مونت كارلو لا بد من تحضير متطلباتها، وأولها هو تهيئة شبكة مقطعة تسمح بالإختيار العشوائي للتشكيلة المراد إنشاؤها والمتمثلة في مسار معين.

تحليلياً، بالنسبة لحالتنا هذه الشبكة تمثل التكامل على كل المسارات، وبما أن ميكانيك الكم يعتمد على مبدأ الإرتياب، فإن كل المسارات تأخذ بعين الإعتبار، ولكن لكل مسار احتمالاً على حدا، وهو المغزى من هذا التقطيع بتعبير أدق الهدف من التقطيع هو فصل المسارات للحصول على رابط بين الصياغة التحليلية والمتطلبات العددية، ولتطبيق ذلك ننطلق من علاقة التكامل على المسار في الزمن الإقليدي.

$$\langle q', t' | q, t \rangle = \int D[q(t)] e^{-S[q(t)]} \quad (20.3)$$

حيث تستعمل هذه الصياغة لأن العمل في الفضاء الإقليدي يعد أكثر ملائمة، ويسمح بإجراء حسابات أبسط على أجهزة الكمبيوتر كما سبق الذكر.

يمثل $D[q(t)]$ كل المسارات التي يمكن أن يسلكها الجسم، ويتم ترجيحها (وزنها) بالكمية $e^{-S[q(t)]}$ [14].

للقيام بفصل التكامل، تقسم المسارات المحتملة للجسيم إلى $N - 1$ شريحة زمنية، بحيث في كل مسار يتحرك الجسم على الطول $(q_1, t_1), \dots, (q_N, t_N)$ ، وبالتالي يمكن تقريب تكامل لا نهائي الأبعاد على النحو التالي:

$$\int D[q(t)] = A \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dq_1 \dots dq_{N-1} \quad (21.3)$$

حيث A هو ثابت تنظيم، وباستعمال العلاقة السابقة يمكن كتابة المنتشر بالشكل:

$$\langle q', t' | q, t \rangle = A \int_{-\infty}^{\infty} e^{-S[q_1]} dq_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} e^{-S[q_{N-1}]} dq_{N-1} \quad (22.3)$$

يؤثر التقسيم أيضاً على الفعل، ويركز في هذا الأخير على الشرائح الزمنية. يصبح الفعل كالتالي:

$$\begin{aligned} S[q_j] &= \int_{t_j}^{t_{j+1}} \left(\frac{m}{2} \dot{q}^2 - V(q) \right) dt \\ &= \Delta t \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_{j+1} - q_j}{\Delta t} \right)^2 + \frac{1}{2} (V(q_{j+1}) + V(q_j)) \right] \end{aligned} \quad (23.3)$$

حيث Δt هو طول كل شريحة زمنية $\Delta t = \frac{t' - t}{N}$. بجمع كل شرائح الزمن المنقطع $(N - 1)$ نحصل على مساهمة الفعل لكل مسار.

ويكتب:

$$\langle q', t' | q, t \rangle = A \int_{-\infty}^{\infty} dq_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dq_{N-1} e^{-S[q]} \quad (24.3)$$

حيث:

$$S[q] = \sum_{j=0}^{N-1} \left[\frac{m}{2 \Delta t} (q_{j+1} - q_j)^2 + \Delta t V(q_j) \right] \quad (25.3)$$

في المعادلة السابقة، يتم إخماد وتنشيط مساهمة المسارات بشكل أسّي، لذا فإن المسارات الكمية (المسارات البعيدة من المسار الكلاسيكي) تساهم بشكل ضئيل في التكامل، وذلك بسبب احتمالها المنخفض [14,2].

أسفر هذا العنصر عن تحضير لصيغة التّكامل على المسار، وربطها بدالة التّوزيع الإحصائي لتتوافق مع المتطلبات العددية. وسيعرض في العنصر الموالي التّموذج الثاني الذي سنطبّق عليه دراستنا، كأحد التّماذج التي يمكن حلها بالتّكامل على المسار من خلال طريقة مونت كارلو.

4.3 المحاكاة العددية لنموذج الهزازات الكميّة (التوافقية وغير التوافقية):

1.4.3 وصف النموذج

يندرج هذا التّموذج ضمن مسائل شهيرة تتجلى فيها صفات معينة، كصفة الدورية، ويوفّر هذا الأخير تصورا جيدا للعديد من الظواهر في الطبيعة، منها الأمواج الكهرومغناطيسية، الروابط المهتزة في الجزيئات... الخ. في هذا الجزء سنذكر بعض المبادئ بشكل مقتضب فيما يخص الأنظمة الاهتزازية الكميّة، بهدف حلها لاحقا عدديا بالتّكامل على المسار، وكما ذكرنا سابقا، بسبب توفر الحلول التحليلية لهذا النموذج يجعل منه مثالا جيدا للمعالجة [6].

يعطى الهاملتوني لجسيم كتلته m مرتبط بإمكانية توافقية (خاصية إهتزازية) ذات قوة ثابتة بالعلاقة:

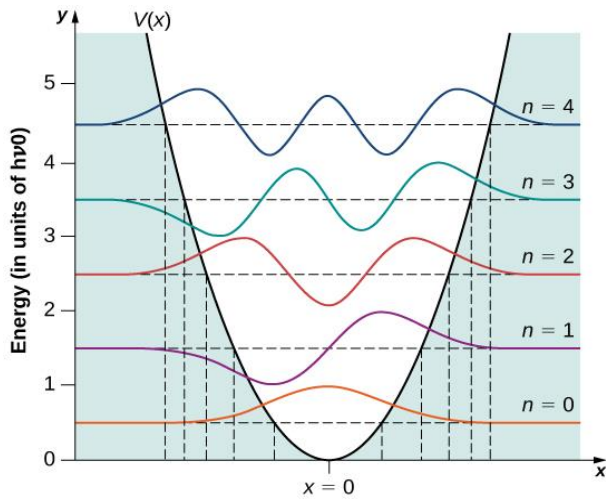
$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{k}{2} \hat{q}^2 = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{q}^2}{2} \quad (26.3)$$

حيث $\omega = \sqrt{k/m}$ تمثل التردد الطبيعي للهزاز. كما أن لاغرانجيان الإقليدي بعد تدوير الفعل لهذا النظام يكتب بالشكل:

$$L = \frac{m}{2} \dot{q}^2 + \frac{m\omega^2 q^2}{2} \quad (27.3)$$

ومنه يعبر عن الفعل كالتالي:

$$S[q_j] = \int_{t_j}^{t_{j+1}} \left(\frac{m}{2} \dot{q}^2 + \frac{m\omega^2 q^2}{2} \right) dt \quad (28.3)$$



القيم الذاتية للطاقة \hat{H} هي:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

يمثل الشكل (2.3) دالة الموجة للهزاز التوافقي في عدة مستويات طاقة.

حيث دالة الموجة للحالة الأساسية هي [20,6]:

الشكل (2.3): دالة الموجة للهزاز التوافقي عند مستويات مختلفة للطاقة [20].

$$\psi_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar} \right) \quad (29.3)$$

2.4.3 المتغيرات بدون أبعاد:

نظرًا لأن شفرة الكمبيوتر لا يمكنها التعامل إلا مع الأرقام، فمن الضروري التعبير عن فيزياء النظام بدون أبعاد، إحدى الطرق للقيام بذلك هي اعتبار جميع الكميات بالوحدات المترية، على سبيل المثال وحدة المتر، لكن عيب هذا الاختيار أنه يؤدي إلى أعداد من رتب كبيرة، ولتجنب هذه المشكلة نعبّر عن جميع المتغيرات بقوة تتناسب مع أبعاد الشبكة التي تكون من رتبة $\delta\tau$. ولتحقيق هذه الغاية نفرض الإعتبار الذي يأخذ بالحسبان الوحدات الطبيعية التالية (1) $(\hbar = C = 1)$ مما يعني أن:

$$[-1 \text{ الطاقة}] = [-1 \text{ الكتلة}] = [\text{الطول}] = [\text{الزمن}]$$

وتبعًا لذلك نقدم المتغيرات التالية $\tilde{m}, \tilde{\omega}, \tilde{x}_i$ التي تكون بلا أبعاد:

$$\tilde{m} = m\delta\tau, \quad \tilde{\omega} = \omega\delta\tau, \quad \tilde{x}_i = \frac{x_i}{\delta\tau} \quad (30.3)$$

ويكتب الفعل (28.3) على هذا الأساس بدون أبعاد بالشكل المتقطع التالي:

$$\tilde{S} = \sum_{i=1}^{N_\tau} \frac{1}{2} \tilde{m} (\tilde{x}_{i+1} - \tilde{x}_i)^2 + \frac{1}{2} \tilde{m} \tilde{\omega}^2 \tilde{x}_i^2 \quad (31.3)$$

نقتصر على الفضاء الجزئي $\tilde{m} = \tilde{\omega}$ من مساحة المتغيرات المتاحة، وبالتالي يمكن اعتبار \tilde{m} على أنها التباعد (الفاصل) الشبكي الفعال للهزاز التوافقي بوحدة الكتلة ووحدة التردد بمعنى أن $(\tilde{m} = \tilde{\omega} = \delta\tau)$ [17].

3.4.3 حساب الكميات الفيزيائية في النموذج:

ناقشنا حتى الآن أنه في الغالب لا يوجد نهج تحليلي ممكن لحل مسألة الهزازات الكمية بأسلوب التكامل على المسار خاصة عندما تكون دالة الكمون معقدة، ولهذا نحن مضطرون لاستخدام الأساليب العددية. وفيما سبق من

عناوين هذا الفصل قمتنا بإعداد هذه الصيغة لتكون مؤهلة للحساب العددي، سنستعرض فيما يلي طريقة مونت كارلو وخوارزمية ميتروبوليس للوصول إلى الهدف المنشود [13].

الهدف من إستخدام هذه الطريقة هو التقريب، أي التوقع من خلال متوسط العينة لدالة المتغيرات العشوائية محل المحاكاة.

كما رأينا سابقا في الفصل الثاني أن القيمة المتوقعة لأي دالة g متعلقة بالمتغير العشوائي X المعرف بدالة كثافة الاحتمال $f_X(x)$ على مجموعة من قيم A ، يمكن كتابتها كمتوسط لقيم X ، والتي تكون في حالة القيم المتقطعة من الشكل [13]:

$$E(g(x)) = \sum_{x \in A} g(x)f(x) \quad (32.3)$$

وتكتب في حالة القيم المستمرة من الشكل:

$$E(g(x)) = \int_{x \in A} g(x)f(x) \quad (33.3)$$

بعد أخذ n عينة من المتغيرات العشوائية X . يمكن حساب متوسط $g(x)$ على العينة

$$\bar{g}_n(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n g(x_i) \quad (34.3)$$

ووفقا لقوانين الأعداد الكبيرة، يجب أن يكون المتوسط الذي تم الحصول عليه قريبا من القيمة المتوقعة. في بحثنا إستخدمنا طريقة مونت كارلو لتقريب التكامل المحدد، والذي يمكن وصفه بالصياغة.

$$\int f(x)Dx \approx \sum f(x_i)\Delta x_i \quad (35.3)$$

حيث x_i هي عناصر مساحتنا.

في هذا النموذج، التشكيلات الإحصائية (المجتمع الإحصائي) التي سوف نقوم بحساب المتوسطات عليها هي عبارة على كل المسارات الممكنة للجسيم وذلك للوصول من موضع ابتدائي q عند لحظة زمنية t إلى موضع نهائي q' عند لحظة زمنية t' بمعنى اخر كل المعادلات الزمنية المحتملة لتغير موضع الجسيم، ويتبع التوزيع الإحتمالي للمسارات توزيع بولتزمان الذي تفرضه صيغة التكامل على المسار حيث يمكن تفسير هذا الاخير على أنه دالة احتمالية للمسارات، ويتم التعامل مع الفعل S فيه كعامل وفقا لما يلي [13]:

$$P(x) \sim \exp(-S) \quad (36.3)$$

يتم إعطاء القيمة المتوقعة لأي كمية فيزيائية بالشكل:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \int A(x) \exp[-S(x)] Dx \quad (37.3)$$

حيث:

$$Z = \int \exp[-S(x)] Dx \quad (38.3)$$

Z : هي دالة التوزيع، وقيم المتغير العشوائي x تمثل تشكيلة من المواضع خلال فترة زمنية قدرها $(T = t_f - t_i)$ بمعنى مسار محتمل.

وبما أن عدد المسارات المحتملة كبير جدا فمن غير المعقول حساب المتوسطات من خلال إحصاء كل التشكيلات (المسارات)، وكذلك تكون طريقة المعاينة العشوائية التي تركز على أخذ عينات عشوائية من المجتمع الإحصائي الممثل في هاته الحالة بكل المسارات المحتملة، غير مجدية لأننا لا نضمن أن يكون إختيارنا لهاته العينات ضمن المسارات المساهمة في قيمة التكامل بسبب العدد الكبير لها وهذا ينعكس على دقة حساب المتوسطات. لذلك سنلجأ إلى المعاينة القصدية (الموجهة) والتي تطرقنا إلى تفصيلها في الفصل الأول حيث نعتمد على خوارزمية ميتروبوليس لتحقيق هذا المقصد، وتقوم هاته الخوارزمية بمقاربة سلسلة المسارات المقترحة كعينة لحساب المتوسطات إلى سلسلة مسارات ضمن التوزيع التالي:

$$P(x) = \frac{\exp[-S(x)]}{\int \exp[-S(x)] Dx} \quad (39.3)$$

مما يقودنا الى الحصول على تقدير مونت كارلو \tilde{A} للقيمة المتوقعة $\langle A \rangle$ كما يلي [13]:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{i=1}^N A(x_i) \quad (40.3)$$

فيما يلي سنتطرق للخطوات العامة لخوارزمية ميتروبوليس المتبعة في محاكاة التكامل على المسار حيث:

• مخرجات الخوارزمية: عبارة عن مجموعة من N مسار $\{\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_{N_\tau}\}$ ذات وزن حسب توزيع

$$\rho[\{\tilde{x}_i\}] \sim \exp[-\tilde{S}[\{\tilde{x}_i\}]]$$

• مدخلات الخوارزمية: عبارة عن مصفوفة مسار تحتوي على N_τ موقع، وعدد حقيقي h والمعلمات \tilde{m}

و $\tilde{\omega}$.

الشروط الحدودية الدورية تلغي الاحتياج للتخلي عن المواقع المتأثرة بحواف الشبكة.

تقوم عملية مسح واحدة الممثلة في زمن خوارزمية ميتروبوليس بزيارة N_τ موقع، وذلك بترتيب عشوائي. بحيث يتم المرور على أحد المواقع عدة مرات أو عدم المرور عليه نهائيا، لكن متوسط عدد المرور بكل موقع في كل عملية مسح يساوي الواحد.

ويتكون كل تحديث (خطوة) للمتروبوليس لموقع معين من أربع مراحل:

1. قم بإنشاء رقم عشوائي u من توزيع منتظم في الفترة $[-h, h]$.

2. اقترح تغيير على الموقع الذي تمت زيارته. $\tilde{x}_i \rightarrow \tilde{x}'_i = \tilde{x}_i + u$.

3. أحسب التغيير في الفعل δS كنتيجة للتعديل السابق.

4. اقبل التغيير مع احتمال الحد الأدنى $\{1, e^{-\delta S}\}$.

يشير الاحتمال الأدنى في الخطوة الرابعة، الى أن كل التعديلات التي تخفض الفعل دوما مقبولة، والتعديل الذي يزيد في الفعل يقبل مع احتمال $e^{-\delta S}$. يتم اتخاذ هذا القرار في خطوة القبول والرفض.

5. تعاد هذه الخطوات عدة مرات حتى الوصول إلى حالة التوازن التي تحكمه المعادلة الأساسية لتوازن التالية:

$$T(\tilde{x}_i \rightarrow \tilde{x}'_i) e^{-S(\tilde{x}_i)} = T(\tilde{x}'_i \rightarrow \tilde{x}_i) e^{-S(\tilde{x}'_i)} \quad (41.3)$$

وبسبب هذه الخاصية، فإن المتوسط المقدر القابل للملاحظة \hat{O} ينخفض إلى متوسط حسابي [17].

وسنقوم في هذا النموذج بحساب متوسط الموضع $\langle x \rangle$ وكذلك متوسط مربع الموضع $\langle x^2 \rangle$ الذي يعطي فكرة على طاقة الحالة الأساسية للهزازات الكمية التوافقية من خلال العلاقات المتحصل عليها تحليليا التالية [6]:

$$\langle x \rangle = 0 \quad (42.3)$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{2} \frac{\hbar}{m\omega} \quad (43.3)$$

$$E_0(n=0) = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{2} \hbar\omega \quad (44.3)$$

حيث من العلاقتين (43.3) و (44.3) نجد [6]:

$$E_0 = m\omega^2 \langle x^2 \rangle \quad (45.3)$$

وهذا سيساعدنا على تقييم نجاعة طريقة مونت كارلو في المحاكاة من خلال خوارزمية ميتروبوليس ودقة نتائجها بالمقارنة مع النتائج التي ستعطيها العلاقات السابقة من أجل نفس المتغيرات m و ω .

4.4.3 التوازن الحراري:

في الحقيقة هذا المصطلح الذي يعبر على مرحلة التوازن بدلالة الحرارة لا يكون ظاهرا صراحة في محاكاة نموذج الهزازات الكمية لأن توزيع الحالات المجهرية يكون على أساس دالة الفعل S للمسارات الذي يلعب فيه الزمن دور وسيط التغيير كما هو الحال لدور مقلوب درجة الحرارة β في نموذج أيزينغ حيث يكون توزيع الحالات المجهرية على أساس الطاقة وتكون الحرارة هي وسيط التغيير في توزيع الحالات المجهرية.

على العموم المقصود من هذا المصطلح في المحاكاة العددية بخوارزمية ميتروبوليس هو الوصول إلى التشكيلات الأكثر احتمالا للنظام بتكرار خطوات مونت كارلو المتضمنة لتكرار خوارزمية ميتروبوليس عدة

مرات حتى الوصول إلى حالة التوازن يكون بعدها معدل الانتقال لنظام بين الحالات المجهرية شبه ثابت يتأرجح ضمن نطاق معين تحكمه معادلة التوازن (41.3).

لذلك من المستحسن التخلص من التشكيلات قبل بلوغ هاته المرحلة، خشية تحريف قيمة المتوسطات المراد حسابها. ويتم ذلك من خلال تكرار ميتروبوليس حتى بلوغ مرحلة التوازن ومن ثمة تكرار ميتروبوليس مرة أخرى من خلال خطوات مونت كارلو للحصول على عدد مناسب من التشكيلات (الحالات المجهرية) وحساب متوسط الكميات الفيزيائية على هاته التشكيلات التي تكون ضمن حالة توازن النظام [17,13].

5.4.3 خوارزمية ميتروبوليس على نموذج الهزازات الكمية:

سنقوم بمحاكاة نموذج الهزازات الكمية عددياً بنفس اللغة البرمجية المتبعة في محاكاة نموذج أيزينغ وذلك لنفس الإعتبارات، كما سنسرد خطوات هاته المحاكاة بنفس المنهج المتبع سابقاً حيث سنقرن كل خطوة من خطوات ميتروبوليس بما يقابلها من السطور البرمجية.

← **أولاً** لإجراء المحاكاة لابد من توفير تشكيلة ابتدائية التي ولتذكير تمثل حالة من حالات النظام المجهرية وتكون في هاته المحاكاة مسار من المسارات المحتملة للهاز الكمي، وهو في الحقيقة عدد من المواضع المحتملة لنظام عند فواصل زمنية جزئية من الزمن الكلي. يُمكن تمثيل هاته التشكيلة من خلال مصفوفة ذات بعد واحد (شعاع) عناصر هاته المصفوفة يمكن أن تكون صفرية كلها وهذا ما يسمى بالانطلاقة الباردة وهي تعبر فيزيائياً على إن عملية قياس الكمية الفيزيائية بدأت تزامناً مع بداية حركة الهزاز، ويمكن أن تكون عناصر المصفوفة غير صفرية وتأخذ قيم عشوائية موزعة بانتظام ضمن مجال معين يتحدد بالقيمة القصوى للخطوة (التي تمثل المسارات العنصرية) و يُختار بعناية لإعتبارات سيتم شرحها لاحقاً وتسمى في هذه الحالة بالانطلاقة الساخنة، ومن الناحية الفيزيائية فهي تعبر على أن عملية قياس الكمية الفيزيائية بدأت أثناء حركة الهزاز. فيما يلي نعرض السطور البرمجية الموافقة للخطوة الأولى:

❖ Cold Start: تكون من خلال سطر برمجي واحد وليس دالة برمجية على الشكل الموالي

65

```
path = np.zeros(N) # (Gold Start) تشكيل شعاع من N من المواضع تأخذ كلها القيم صفر
```

❖ Hot Start: تكون في شكل دالة برمجية كالآتي

```
7 def hot_star(N,delta):
8     path = np.zeros(N) # تشكيل شعاع من N من المواضع الصفرية
9     for i in range(len(path)):
10        x = np.random.uniform(-delta,delta)
11        path[i] = x # delta+ و delta- إسبدال المواضع الصفرية بمواضع ذات قيم عشوائية بين
12    return path # (Hot Start)
```

← **ثانياً** من متطلبات الخوارزمية هو تعريف دالة الفعل S التي تقوم بتجميع لاغرانجيان الخاص بكل مسار عنصري المعرف بين موضعين متتاليين عند كل فاصل زمني من الشعاع المولد في الخطوة السابقة، حيث تمثل

النتيجة المتحصل عليها قيمة الفعل S للمسار الكلي في المدة الزمنية الكلية، الصيغة الرياضية لهاته الدالة مع الاخذ بالحسبان الحد الذي يضمن الإنتقال من الحالة التوافقية إلى غير التوافقية للهاز تعطى من الشكل [10]:

$$S = \Delta t \sum_{i=1}^{N_\tau} \frac{1}{2} m \left[\frac{(x_{i+1} - x_i)}{\Delta t} \right]^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x_i^2 + \lambda x_i^4 \quad (46.3)$$

وباستخدام المتغيرات اللابعدية تصبح العلاقة (46.3) من الشكل [10]:

$$\tilde{S} = \sum_{i=1}^{N_\tau} \frac{1}{2} \tilde{m} (\tilde{x}_{i+1} - \tilde{x}_i)^2 + \frac{1}{2} \tilde{m} \tilde{\omega}^2 \tilde{x}_i^2 + \tilde{\lambda} \tilde{m}^2 \tilde{\omega}^3 \tilde{x}_i^4 \quad (47.3)$$

سنقوم الان بتعريف دالة برمجية (action) تقوم بحساب هذا المجموع لكل مسار معطى ضمن مدخلاتها حيث تكون من الشكل الموالي:

```

15 def action(path,m,omega,lamda_):
16     S = 0.0 # قيمة الفعل قبل بداية التجميع نبيها يأخذ القيمة المدومة
17     N=len(path) # تحديد العدد الكلي لعناصر الشجاع الممثل للمسار المقترح ليُجرى التجميع عليها
18     for i in range(N):
19         x_i = path[i] # تمثل نقطة بداية المسار العنصري في المجال الزمني dt
20         x_ip1 = path[(i + 1) % N] # تمثل نقطة نهاية المسار العنصري في المجال الزمني dt
21         kinetic = 0.5*m*(x_ip1 - x_i)**2 # حساب قيمة الطاقة الحركية بين الموضعين
22         potential = (0.5*m*omega**2 * x_i**2 + lamda_*m**2*omega**3*x_i**4) # حساب طاقة الكون عند بداية المسار العنصري
23         S += kinetic + potential # رفع قيمة الفعل S من خلال قيمة الهاملتوني الناتج من تويرر الفعل بسبب التحول من فضاء ميكروفيكي إلى الفضاء الإقليدي
24     return S
    
```

← **ثالثا** سوف نعرف دالة برمجية (metropolis) نكتب ضمن سطورها خطوات خوارزمية ميتروبوليس والتي ستوجهنا إلى المسارات الأكثر احتمالا لنظام من خلال خفض قيمة الفعل S .

1. نعطي لها كمتغير إدخال المسار المولد بإحدى الدالتين البرمجيتين المعرفة في الخطوة الأولى (Cold Start) أو (Hot Start).

2. من ثمة نقوم بحساب الفعل S_{old_path} للمسار المعطى باستخدام دالة الخطوة الثانية (action).

3. نقوم بتغيير أحد المواضع x_i على المسار المعطى، حيث يتم إختياره بشكل عشوائي منتظم وذلك من خلال

إضافة مقدار dx مولد هو الاخر بشكل عشوائي منتظم بين القيمتين $delta_x +$ و $delta_x -$.

حيث تمثل $delta_x$ القيمة القصوى لمقدار الخطوة التي يتحرك بها الهزاز لتغيير موضعه خلال فترة زمنية عنصرية قدرها dt . يتم إختيار القيمة القصوى لهاته الخطوة لتحقيق معدل قبول للإنقلات يتناسب مع خصائص النظام (قيمة التردد ω وقيمة الكتلة m).

4. نقوم بعدها بحساب الفعل S_{new_path} للمسار الجديد بعد عملية التغيير، ومن ثمة نحسب قيمة التغيير في

دالة الفعل S حيث $(\Delta S = S_{new_path} - S_{old_path})$.

5. الان نقوم بفحص قابلية إنتقال النظام إلى المسار الجديد من خلال قبول أو رفض هذا المسار حيث:

⇐ إذا كانت قيمة $\Delta S < 0$ يتم قبول المسار الجديد لأن النظام يحاول دائماً سلوك المسار الذي يحقق أدنى فعل ممكن.

⇐ إذا كانت قيمة $\Delta S > 0$ نولد عدد عشوائي r بتوزيع منتظم في المجال $[0,1]$ نقارنه بالقيمة $\exp(-\Delta S)$ ، حيث إذا كان $(r \leq \exp(-\Delta S))$ يتم قبول الانتقال إلى المسار الجديد بإحتمال قدره $P_r = \exp(-\Delta S)$ وإذا كان $(r > \exp(-\Delta S))$ يتم رفض الانتقال إلى المسار الجديد بإحتمال قدره $(1 - P_r)$.

6. سنقوم بتكرار الخطوات من 1 إلى 5 عدة مرات حتى يتم إختبار جميع مواضع المسار، يشكل هذا التكرار زمن ميتروبوليس بحيث في كل مرة إذا ما تم قبول الانتقال إلى المسار الجديد (new_path) يأخذ مكان المسار القديم في التكرار التالي، ماعدا ذلك نعاود التكرار بنفس المسار القديم (old_path)، ويمثل زمن ميتروبوليس المشكل من كامل هاته التكرارات خطوة واحدة من خطوات مونت كارلو.

7. نكرر الخطوات من 1 إلى 6 عدة مرات حتى الوصول إلى حالة التوازن، يشكل هذا التكرار زمن مونت كارلو. سنوضح في الشكل التالي الدالة البرمجية التي تمثل خطوات ميتروبوليس:

```

28 def metropolis(path,delta,m,omega,lamda_,hbar):
29     acceprate=0 # متغير لحساب معد القبول
30     # تحريك الميتروبوليس عند من المرات يساوي عدد عناصر المسار المعطى (ليس بالضرورة) المهم ضمان عدد كافي لإختبار جميع المواضع
31     for j in range(len(path)):
32         i = np.random.randint(0,len(path))# إختيار موضع على المسار بشكل عشوائي منتظم
33         old_x = path[i]# تخزين الموضع المختار للرجوع إليه في حالة الرفض
34         old_action = action(path,m,omega,lamda_)# حساب الفعل للمسار المعطى
35         # تغيير الموضع المختار سابقا بإضافة قيمة ولده بشكل عشوائي منتظم بين (-delta و delta)
36         new_x = old_x + np.random.uniform(-delta,delta)
37         path[i] = new_x # تخزين الموضع المخزن على المسار ليتحول إلى مسار جديد
38         new_action = action(path,m,omega,lamda_) # حساب قيمة الفعل للمسار الجديد
39         # شرط قبول الانتقال إلى المسار الجديد
40         if new_action < old_action or np.random.rand() < np.exp((-1./hbar)*(new_action - old_action)):
41             acceprate +=1/len(path)
42             pass # قبول المسار الجديد
43         else:
44             path[i] = old_x # رفض المسار الجديد
45     return path,acceprate

```

← رابعاً سنقوم الآن ببرمجة الدالة الرئيسية التي ستقوم بتكرار دالة ميتروبوليس (metropolis) إلى غاية الوصول إلى حالة التوازن، ومن ثمة تقوم بتكرار الخوارزمية ضمن تكرار مونت كارلو قصد الوصول إلى عدد كافي من المسارات في حالة التوازن التي سيتم حساب مختلف متوسطات الكميات الفيزيائية عليها، وتقوم هاته الدالة أيضاً برسم المنحنيات البيانية والتخطيط الإحصائي للتوزيع المتحصل عليه وذلك من أجل متغيرات مختلفة تعطى مسبقاً على حسب المسألة، الشكل الموالي يوضح هذه الدالة:

```

48 def main():
49     # Parameters
50     m = 1.0 # الكتلة بدون وحدة
51     hbar = 1.0 # ثابت بلانك بالوحدة الطبيعية
52     omega = 1 # التردد الزاوي بدون وحدة
53     delta = 0.5 # طول الخطوة التصوي على المسار
54     dt = 0.5 # الخطوة الزمنية
55     Nmin = np.int32(4*np.pi/omega) # أقل عدد التقطيعات على الزمن لضمان مبدأ الإرباب
56     N=Nmin+200 # عدد التقطيعات على الزمن
57     T=N*dt # T = 1.0 الزمن الكلي
58     lamda_=1000 # معامل التخماد
59     thermsteps = 200 # عدد الخطوات التي تضمن التوازن الحراري
60     mcsteps = 100000 # عدد خطوات مونت كارلو
61
62     positions = [] # قائمة لحفظ مواضع المسارات X فيها
63     mean_positions = [] # قائمة لحفظ متوسط مواضع المسارات <X> فيها
64     mean_positions_2 = [] # قائمة لحفظ مربع متوسط المسارات <X**2> فيها
65
66     start_time = timer() # عداد لحساب بداية وقت المحاكاه
67
68     path = np.zeros(N) # تشكيل شعاع من N من المواضع تأخذ كلها القيم صفر (Gold Start)
69

```

```

70 #path = hot_star(N,delta) # (Hot Start) -delta و +delta من المواضع التي تأخذ قيم غير صفرية عشوائية بين
71
72 for therm in range(thermsteps): # مرحلة الوصول إلى حالة التوازن
73     path, acr = metropolis(path,delta,m,omega,lamda_,hbar)
74 for mcstep in range(mcsteps): # تكرار خطوات مونت كارلو لأخذ عدد كافي من المسارات لإجراء حساب المتوسطات عليها
75     path, acr = metropolis(path,delta,m,omega,lamda_,hbar)
76     if mcstep == (mcsteps-1):
77         print('acceptance rate =',acr) # طباعة قيمة معدل قبول المسارات الجيدة في خوارزمية ميتروبوليس
78 # حساب متوسط  $X$  و  $X^2$  وتخزينها في القوائم الخاصة بها
79     mean_positions.append(np.mean(path))
80     mean_positions_2.append((np.mean(np.power(path,2))))
81 # تخزين المسارات
82     positions.append(np.copy(path))
83 # تحويل قائمة المواضع إلى مصفوفة متحدة الأبعاد ( $N*mcsteps$ )
84 positions = np.array(positions)
85 # تحويل مصفوفة المواضع السابقة إلى شعاع (مصفوفة من بعد واحد)
86 positions = positions.flatten()
87 end_time = timer() # حداد لحساب وقت نهاية المحاكاة
88 print("Elapsed time: %g seconds" % (end_time - start_time)) # طبع وقت المحاكاة المستغرق
89 # حساب الطاقة الأرضية للهزاز الكمي التوافقي ( $lamda_=0$ )
90 if lamda_ == 0 :
91     x2=np.mean(mean_positions_2)
92     energy= m*omega**2*x2 # علاقة الطاقة الأرضية للهزاز التوافقي بمتوسط مربع الموضع
93     print('energy of ground state =',energy)
94 # رسم المسارات بدلالة الزمن
95 f = plt.figure(figsize=(18,10));
96 _ =f.add_subplot(2,2,2)
97 plt.plot(np.linspace(0, T, N), path,'*')
98 plt.xlabel("Time")
99 plt.ylabel("Position")
100 plt.title("Path Integral of Harmonic Oscillator")
101 # رسم متوسط الموضع بدلالة عدد خطوات مونت كارلو في حالة التوازن
102 _ =f.add_subplot(2,2,1)
103 plt.plot(np.linspace(0, mcsteps-1,mcsteps), mean_positions,'+b')
104 plt.ylabel("Monte Carlo Steps")
105 plt.ylabel("Position of <x>")
106 plt.title("Evolution of <x> in Quantum Harmonic Oscillator")
107 # رسم متوسط مربع الموضع بدلالة عدد خطوات مونت كارلو في حالة التوازن
108 _ =f.add_subplot(2,2,3)
109 plt.plot(np.linspace(0, mcsteps-1,mcsteps), mean_positions_2,'+r')
110 plt.xlabel("Monte Carlo Steps")
111 plt.ylabel("Position of <x**2>")
112 plt.title("Evolution of <x**2> in Quantum Harmonic Oscillator")
113 # رسم توزيع المواضع المتحصل عليها في حالة التوازن
114 _ =f.add_subplot(2, 2, 4 )
115 plt.hist(positions, bins=64, density=True, alpha=0.7, color='b')
116 plt.xlabel("Position")
117 plt.ylabel("Probability Density")
118 plt.show()
119 if __name__ == '__main__':
120     main()

```

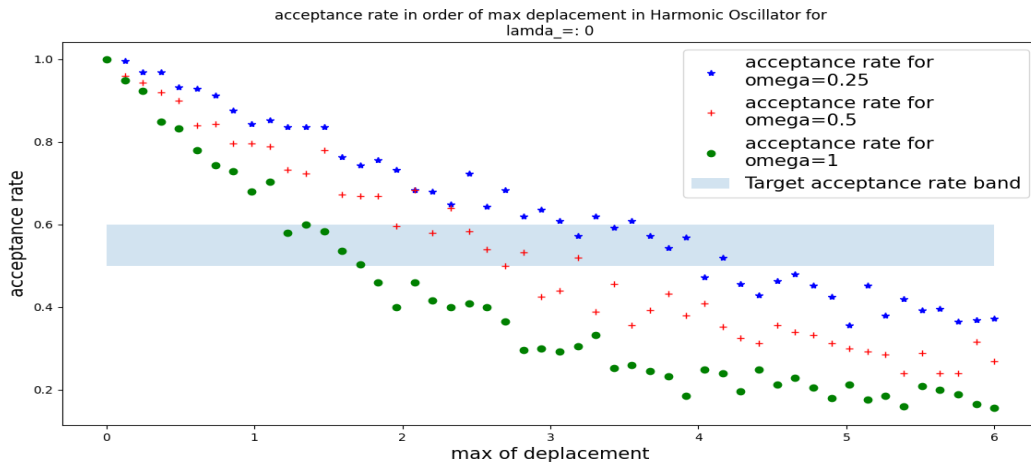
6.4.3 نتائج محاكاة نموذج الهزازات الكمية:

في كل حساباتنا لمحاكاة نموذج الهزازات الكمية سوف نعتبر المتغيرات بدون أبعاد بحيث $(\tilde{m} = \tilde{\omega} = dt)$ وكذلك سوف نعتبر مسارات مقسمة $N_\tau = 250$ هذا يعني أن الزمن الكلي يقدر بـ: $T = dtN_\tau$. نعتبر كذلك دالة الفعل بدون أبعاد \tilde{S} من الشكل التالي [10]:

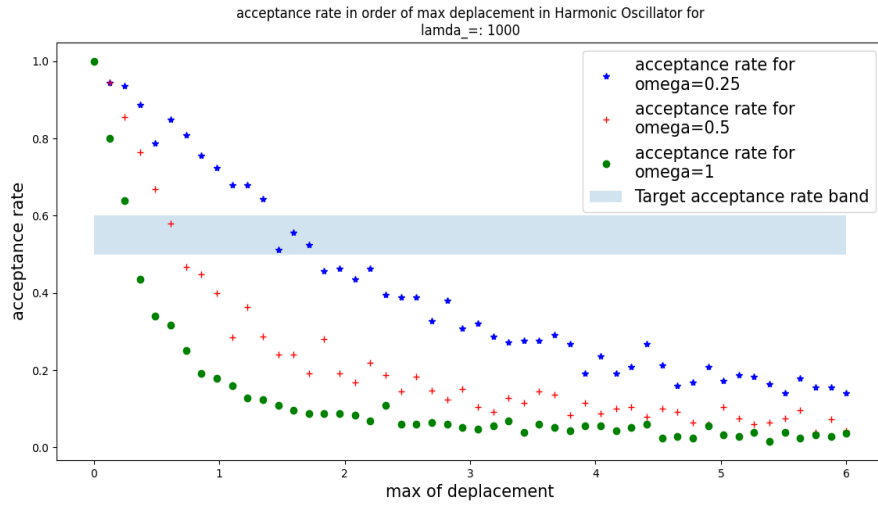
$$\tilde{S} = \sum_{i=1}^{N_\tau} \frac{1}{2} \tilde{m} (\tilde{x}_{i+1} - \tilde{x}_i)^2 + \frac{1}{2} \tilde{m} \tilde{\omega}^2 \tilde{x}_i^2 + \tilde{\lambda} \tilde{m}^2 \tilde{\omega}^3 \tilde{x}_i^4 \quad (48.3)$$

حيث أن $\tilde{\lambda}$ تأخذ القيم $(0, 1, 50, 10^3)$ وبذلك ننتقل من محاكاة الهزازات الكمية التوافقية ($\tilde{\lambda} = 0$) إلى الهزازات الكمية غير توافقية ($\tilde{\lambda} \neq 0$)، وسنبيّن مدى دقة حساب طريقة مونت كارلو من خلال مقارنة قيم متوسط الموضع $\langle x \rangle$ ومتوسط مربع الموضع $\langle x^2 \rangle$ مع نظيرتها المتحصل عليها بالصيغة التحليلية، ونحاول إستنباط مختلف المتغيرات التي من أجلها تعطي طريقة مونت كارلو نتائج أفضل. ومن جهة أخرى سوف نحاول دراسة تغيرات طاقة الحالة الأساسية للهزاز بدلالة وسيط التغير dt من أجل قيم مختلفة لـ $\tilde{\lambda}$.

أولاً نحن استهدفنا في محاكاتنا معدل قبول خوارزمية ميتروبوليس للتغيرات التي نحدثها على المسار محصور ما بين 50% إلى 60% ويمكن رفع هذه النسبة على حسب الحاجة وذلك لتسريع تقارب المسارات نحو التوزيع المستهدف خاصة إذا ما كانت قيمة الفواصل الزمنية N_τ كبير جداً وبالتالي عدد المسارات المحتملة لنظام يكون كبير جداً [10]، وهذا يقلل من زمن المحاكاة. هناك عدة متغيرات تتحكم في معدل القبول وهي على وجه الخصوص في هذا النموذج $(\tilde{m}, \tilde{\omega}, dt, \text{delta}_x)$ وبما أن المتغيرات $(\tilde{m}, \tilde{\omega}, dt)$ تابعة لخصائص الهزاز المدروس، فيبقى لنا الخيار في تعيين قيمة الخطوة القصوى للهزاز delta_x بدلالة معدل القبول من أجل قيم مختلفة لمتغيرات الهزاز. في الشكل (3.3) والشكل (4.3) سوف نرسم تغيرات معدل القبول من أجل حالات مختلفة لتردد الهزاز ونضلل القيم المستهدفة التي إستعملناها.



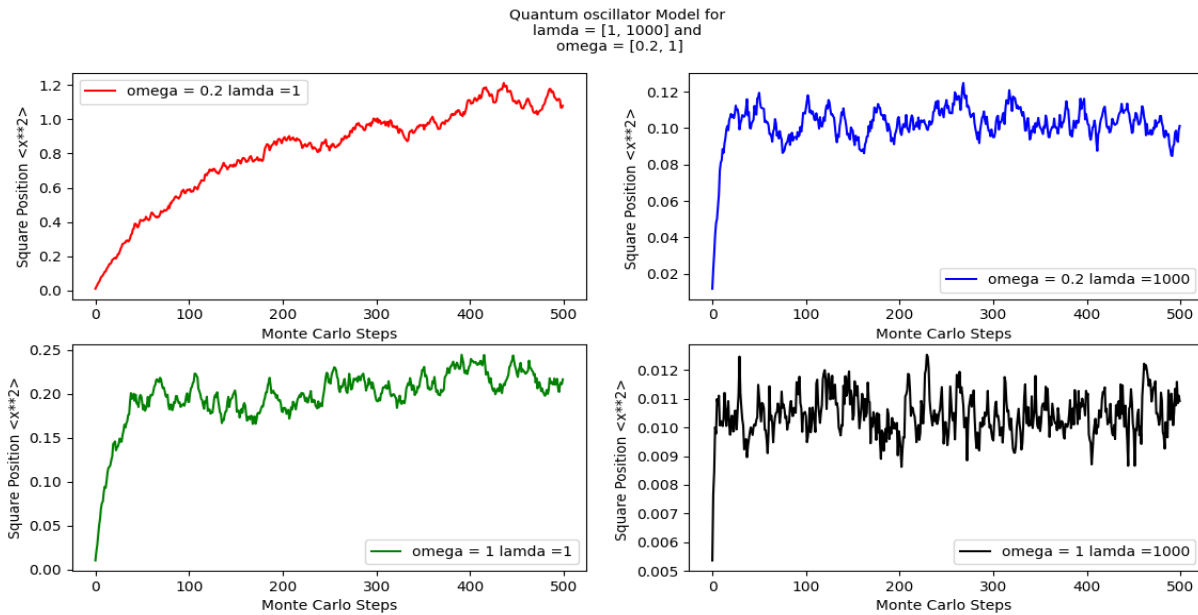
الشكل (3.3): تغيرات معدل قبول الخوارزمية بدلالة قيم الخطوة القصوى من أجل عدة متغيرات للهزاز توافقي.



الشكل (4.3): تغيرات معدل قبول الخوارزمية بدلالة قيم الخطوة القصوى من أجل عدة متغيرات للهزاز غير توافقي.

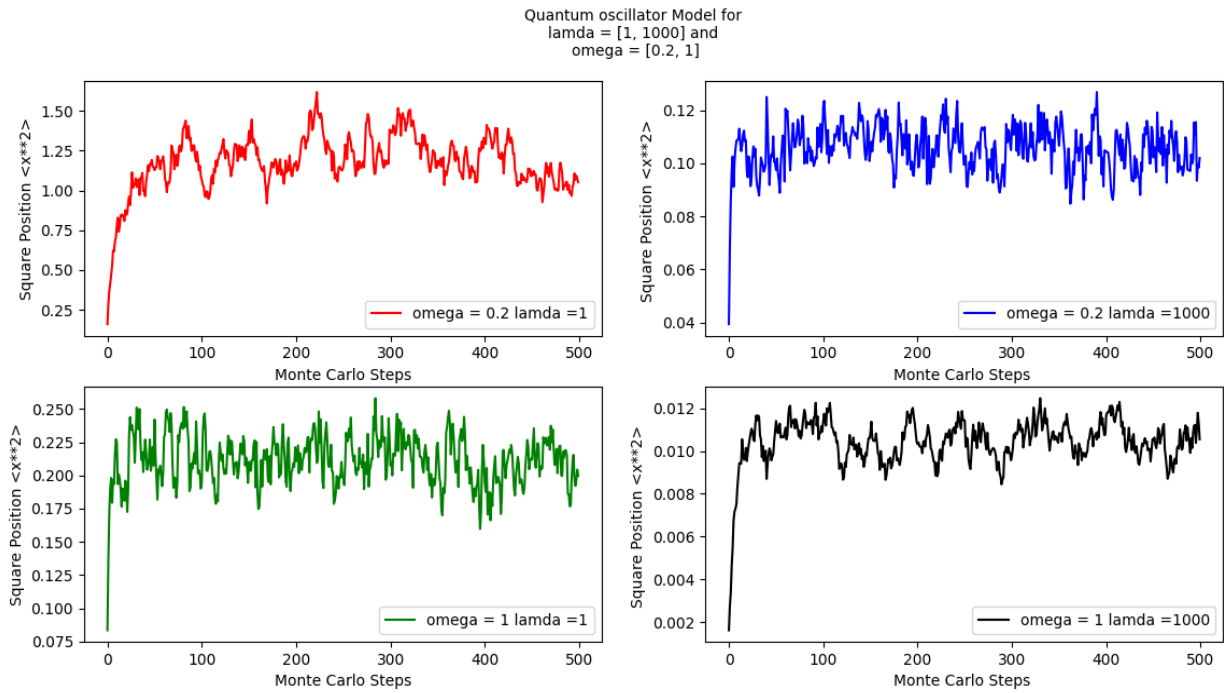
من تقاطع المنطقة المظلمة مع المنحنى الموافق لقيمة التردد الخاصة بالهزاز نختار مجال قيم الخطوة القصوى δx التي تحقق التوزيع المستهدف.

ثانياً من أهم ما يحدد دقة حساب المتوسطات في طريقة مونت كارلو هو الوصول إلى التكرار الكافي إلى غاية بلوغ حالة توازن النظام، الممثلة عددياً في إستقرار تآرجحات التشكيلات المولدة عند التوزيع المستهدف الذي يحدده الوزن الاحصائي في صيغة التكامل على المسار. هذا التكرار يختلف باختلاف متغيرات الهزاز الكمي خاصة قيمة التردد ($\tilde{\omega}$) وكذلك المعامل $\tilde{\lambda}$ الذي ينتقل بالهزاز من الحالة التوافقية إلى الحالة غير التوافقية. في الشكل (5.3) سوف نرسم منحنيات تغير متوسط مربع الموضع ($\langle x^2 \rangle$) بدلالة عدد تكرار مونت كارلو حتى بلوغ مرحلة التوازن وذلك من أجل قيم مختلفة لـ ($\tilde{\lambda}, \tilde{\omega}$):



الشكل (5.3): خطوات مونت كارلو لبلوغ حالة التوازن من أجل عدة متغيرات حيث الخطوة القصوى عند 0.2.

من خلال مقارنة المنحنى باللون الأحمر مع المنحنى باللون الأزرق نلاحظ جليا أنه مع ثبات قيمة التردد $\tilde{\omega}$ وزيادة قيمة $\tilde{\lambda}$ ، عدد خطوات مونت كارلو للبلوغ إلى حالة التوازن يتقلص من حدود 500 خطوة إلى ما بين 80 و100 خطوة. كذلك الأمر عند تثبيت قيمة $\tilde{\lambda}$ وزيادة قيمة $\tilde{\omega}$ فإن عدد خطوات مونت كارلو حتى بلوغ مرحلة التوازن يتقلص هو الآخر من حدود 500 خطوة إلى ما بين 50 و60 خطوة كما هو موضح في المنحنيين الأحمر والأخضر. وعند عقد نفس المقارنة ما بين المنحنيين الأحمر والأسود نلاحظ أن عدد الخطوات يتقلص من 500 خطوة إلى حوالي 20 خطوة. من خلال هاتاه المقارنات نستنتج أنه كلما زادت طاقة الهزاز من خلال زيادة $\tilde{\omega}$ أو زيادة $\tilde{\lambda}$ يتقلص عدد خطوات مونت كارلو لبلوغ حالة التوازن ذلك كون أن عدد المسارات التي يزورها النظام أثناء فترة القياس يتقلص وهذا ما سيتأكد لاحقا عند رسم المخطط الإحصائي لتوزيع المواضع من أجل قيم مختلفة لـ $\tilde{\omega}$ و $\tilde{\lambda}$. ننوه إلى أن رسم المنحنيات السابقة تم من أجل قيمة $delta_x$ تساوي 0.2 وعند تغيير هذه القيمة فإن عدد الخطوات يتغير هو الآخر كما هو مبين في الشكل (6.3) مما يؤكد ضرورة إختيار قيمة $delta_x$ بعناية.

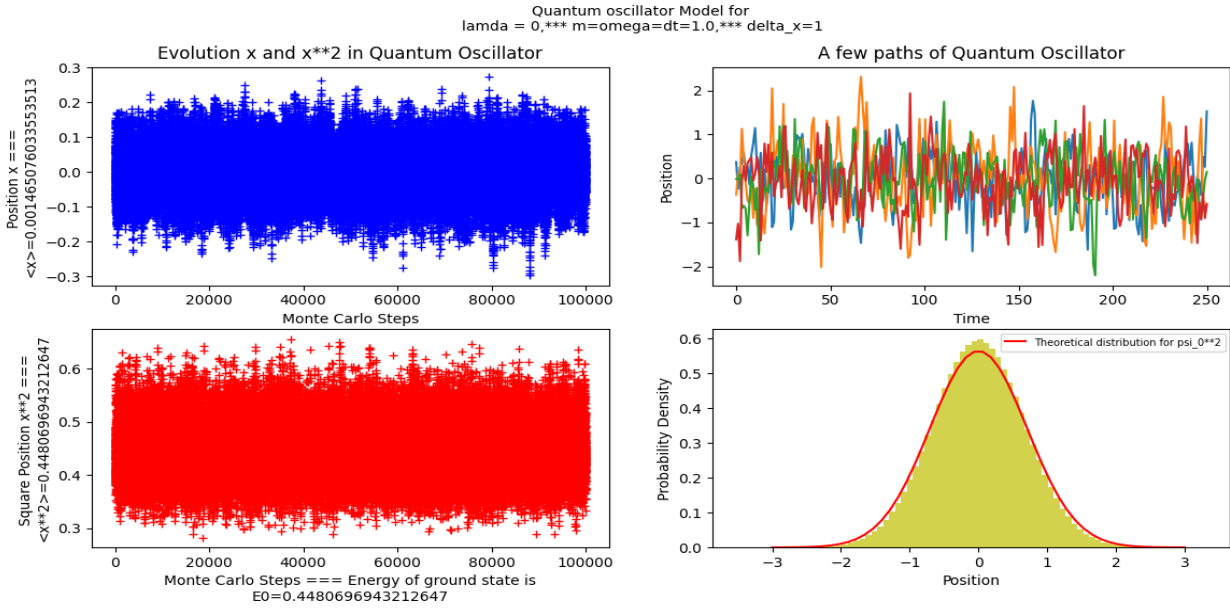


الشكل (6.3): خطوات مونت كارلو لبلوغ حالة التوازن من أجل عدة متغيرات حيث الخطوة القصوى عند 1.

ثالثا سوف نقوم الان بحساب متوسط الموضع $\langle \tilde{x} \rangle$ ومتوسط مربع الموضع $\langle \tilde{x}^2 \rangle$ من أجل الهزازات الكمية التوافقية ($\tilde{\lambda} = 0$) لعلنا المسبق بقيمهما المتحصل عليها تحليليا بدقة، ونرى مدى دقة النتائج بطريقة مونت كارلو لنفس متغيرات الهزاز.

أولا نحدد خصائص الهزاز من خلال إعتبار ($\tilde{m} = \tilde{\omega} = \hbar = 1$)، وبناءا عليه سنختار قيمة ($delta_x = 1$) من خلال المنحنيات المبينة في الشكل (3.3) و يكون معدل قبول الحالات الجديدة كما أشرنا سابقا في حدود 50% إلى 60% وتكون قيمة التقطيع (الخطوات الزمنية) بـ ($N_\tau = 250$)، حيث سنرى مدى تغير دقة الحساب مع تغير قيمة $delta_x$ ، كذلك سنرسم توزيع المواضع المتحصل عليها من خلال المخطط

الإحصائي، وبخصوص الخطوات اللازمة للوصول إلى حالة التوازن كما رأينا سابقاً أن أكبر قيمة متحصل عليها هي في حدود 500 خطوة لذلك سوف نتفادى تشكيلات ما قبل التوازن خشية تحريف نتيجة المتوسطات وذلك بعدد الخطوات التالي (therm_steps=1000)، أما عن عدد التشكيلات التي نحسب عليها المتوسطات من خلال تكرار مونت كارلو هو (mc_steps=10⁵) والشكل (7.3) يبين النتائج المتحصل عليها:



الشكل (7.3): نتائج محاكاة نموذج هزاز كمي توافقي من اجل خطوة قصوى قدرها 1.

في الشكل (7.3) يمثل المخطط باللون الأزرق تارجحات قيمة الموضع \tilde{x} حول 0 في المجال [-0.2,0.2] بحيث أن متوسط الموضع يقدر بـ $\langle \tilde{x} \rangle = 1.4 \cdot 10^{-3}$ علماً أن القيمة النظرية هي $\langle \tilde{x} \rangle = 0$ بمعنى أن معدل الانحراف في نتيجة موني كارلو من رتبة 10^{-3} وهي قيمة مقبولة. كما يمثل المخطط باللون الأحمر تارجحات قيمة مربع الموضع \tilde{x}^2 حول القيمة 0.45 في المجال [0.3, 0.6] بحيث أن متوسط مربع الموضع يقدر بـ $\langle \tilde{x}^2 \rangle = 0.448$ علماً أن القيمة النظرية من أجل الحالة الأساسية للهزاز الكمي التوافقي تعطى من الشكل:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{2} \frac{\hbar}{m\omega} \quad (49.3)$$

باعتبار قيم المتغيرات بدون أبعاد ($\tilde{m} = \tilde{\omega} = 1$) وإعتبار القيم الطبيعية ($\hbar = c = 1$) تصبح العلاقة (49.3) كالتالي:

$$\langle \tilde{x}^2 \rangle = \frac{1}{2} \frac{\hbar}{\tilde{m}\tilde{\omega}} = 0,5 \quad (50.3)$$

ومنه قيمة الانحراف على النتيجة النظرية $\Delta \tilde{x}^2 \cong 0,052$ وتمثل هذه القيمة إنحراف طاقة الحالة الأساسية للهزاز E_0 لأن العلاقة التي تربط هذه الأخيرة بمتوسط مربع الموضع تعطى من الشكل:

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega \Rightarrow m\omega^2 \langle x^2 \rangle \quad (51.3)$$

باعتبار قيم المتغيرات بدون أبعاد ($\tilde{m} = \tilde{\omega} = 1$) وإعتبار القيم الطبيعية ($\hbar = c = 1$) نجد:

$$E_0 = \tilde{m}\tilde{\omega}^2\langle\tilde{x}^2\rangle = 0,5 \quad (52.3)$$

ويمكن التقليل من هذا الانحراف بزيادة عدد خطوات مونت كارلو.

كذلك من الشكل (7.3) نلاحظ أن توزيع المواضع المتحصل عليها بطريقة مونت كارلو في المخطط الاحصائي باللون الأصفر يسلك نفس منحنى مربع طويلة دالة الموجة للهزاز في الحالة الأساسية ($\psi_0(x)$) والتي تعطى بالعلاقة التالية [10]:

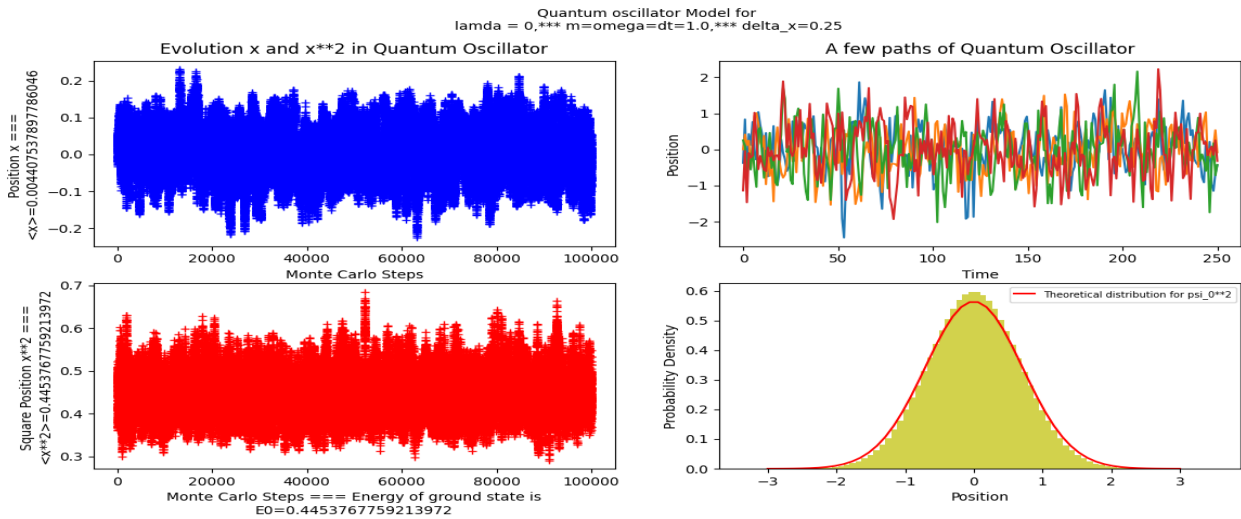
$$|\psi_0(x)|^2 = \left[\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right]^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right) \quad (53.3)$$

باستخدام المتغيرات اللابعدية نجد:

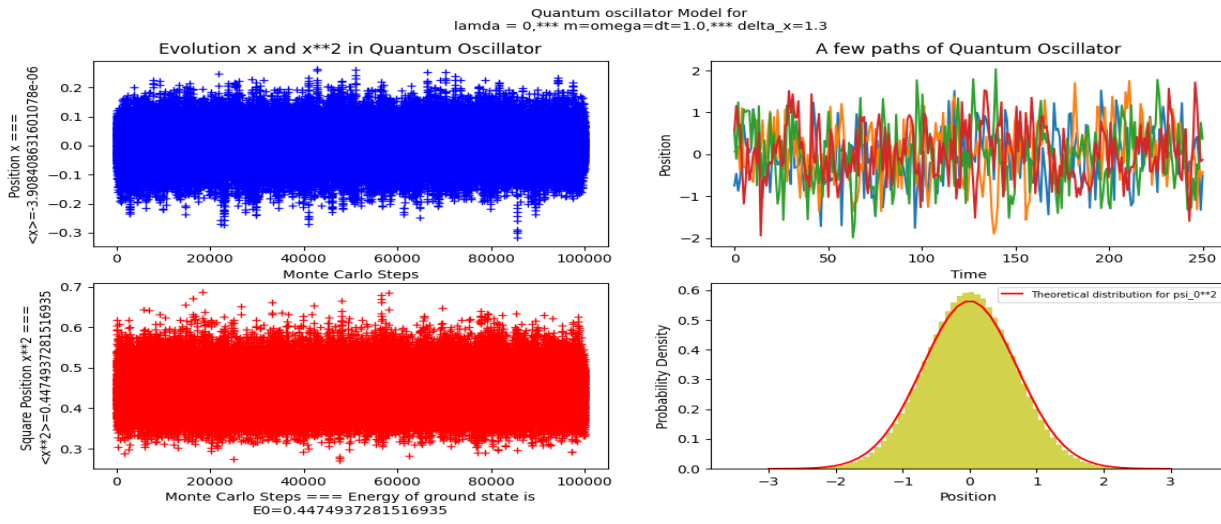
$$|\psi_0(\tilde{x})|^2 = \left[\frac{\tilde{m}\tilde{\omega}}{\hbar\pi}\right]^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{\tilde{m}\tilde{\omega}}{\hbar}\tilde{x}^2\right) \quad (54.3)$$

تغيرات هاته الدالة مرسومة باللون الأحمر فوق المخطط الاحصائي السابق لتمكن من مقارنة منحنى كل منهما وذلك من أجل نفس المتغيرات ($\tilde{m} = \tilde{\omega} = \hbar = 1$) في المجال $\tilde{x} \in [-3,3]$

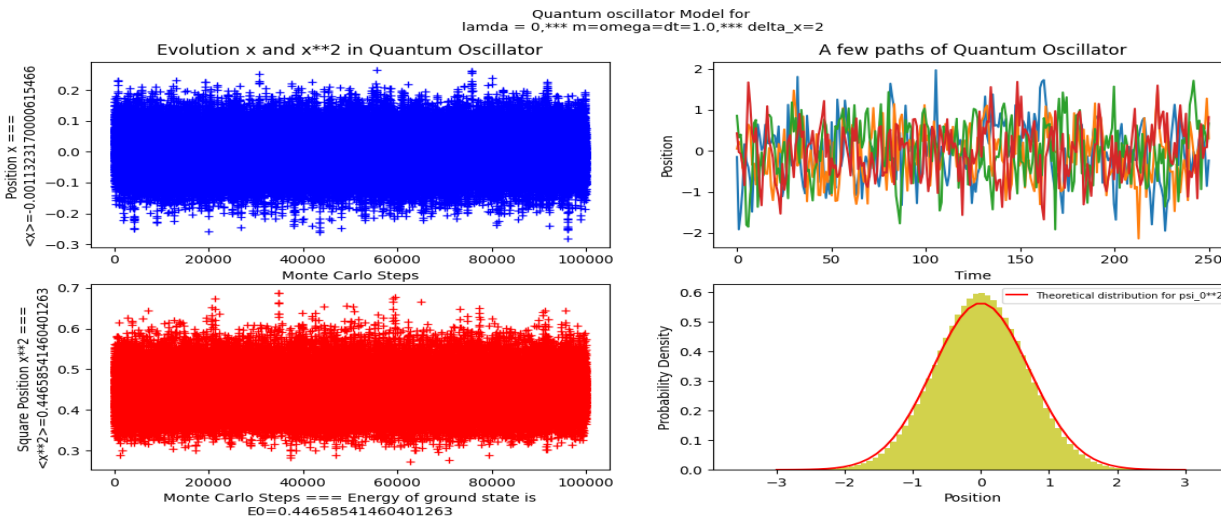
كما سنبين من خلال النتائج الموضحة في الاشكال الموالية (8.3) و (9.3) و (10.3) مدى تأثير إختيار قيمة δx حيث سنعرض النتائج من أجل قيمة $\delta x = 0.25$ أقل بكثير من القيمة المثلى التي تكون في المجال [1,1.4] ومن أجل قيمة $\delta x = 1.3$ التي تكون في حدود القيمة المثلى وكذلك من أجل قيمة $\delta x = 2$ أكبر بكثير من القيمة المثلى.



الشكل (8.3): نتائج محاكاة نموذج هزاز كمي توافقي من اجل خطوة قصوى قدرها 0.25.



الشكل (9.3): نتائج محاكاة نموذج هزاز كمي توافقي من اجل خطوة قصوى قدرها 1.3.



الشكل (10.3): نتائج محاكاة نموذج هزاز كمي توافقي من اجل خطوة قصوى قدرها 2.

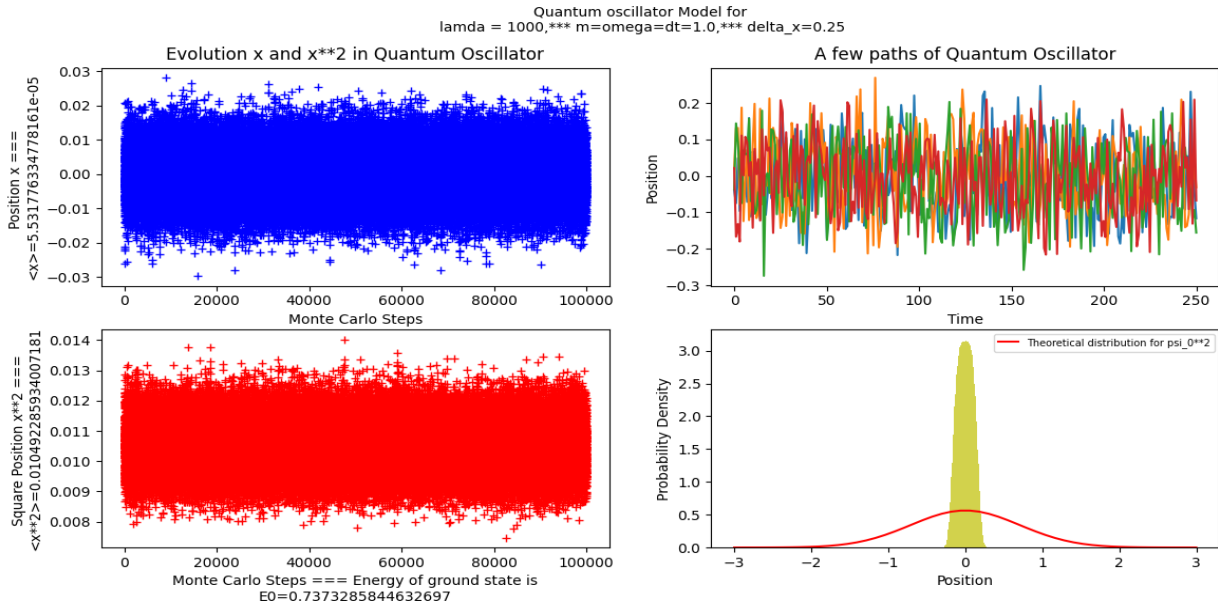
سنعرض النتائج في الجدول مبسط التالي قيم δx المختارة مع ما يقابلها من قيم المتوسطات والفارق بين النتيجة التقريبية لطريقة مونت كارلو مع النتيجة النظرية.

مقدار الانحراف على القيمة النظرية		قيمة $\langle \tilde{x}^2 \rangle$	قيمة $\langle \tilde{x} \rangle 10^{-5}$	قيمة δx
$\langle \tilde{x}^2 \rangle$	$10^{-5} \langle \tilde{x} \rangle$			
0.0547	+440.75	0.4453	440.75	0.25
0.0520	+146.50	0.4480	146.50	1.00
0.0526	+0.390	0.4474	0.390	1.30
0.0535	+113.23	0.4465	113.23	2.00

جدول (1.3): تغيير قيم المتوسطات مع تغيير قيمة الخطوة القصوى.

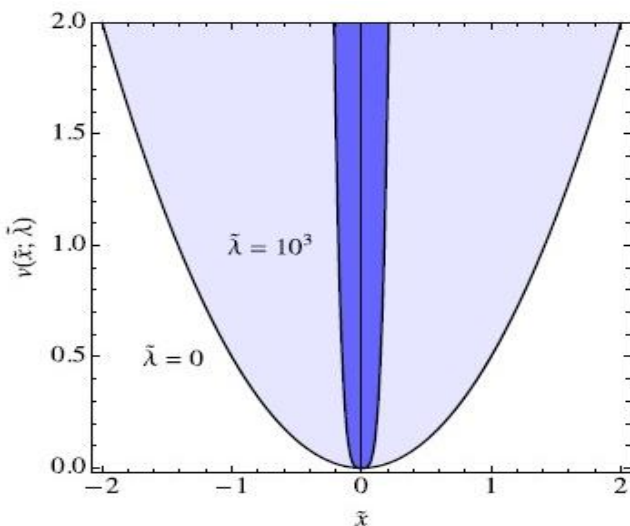
من خلال النتائج المبينة في الجدول تتأكد ضرورة إختيار قيمة الخطوة القصوى بما يتناسب مع متغيرات المسألة المدروسة.

وبناء على هذه النتائج يمكن أن نعرف المنحى العام لدالة الموجة للهزاز الكمي غير التوافقي في الحالة الأرضية وحساب متوسط الطاقة، ونأخذ على سبيل المثال الهزاز المعروف بـ ($\bar{\lambda} = 10^3$) حيث نتحصل على النتائج المبينة في الشكل (11.3) الموالي:



الشكل (11.3): نتائج محاكاة نموذج هزاز كمي غير توافقي.

نلاحظ من خلال المخطط باللون الأزرق أن قيمة الموضع \bar{x} تتأرجح حول القيمة 0 في المجال $[-0.02, 0.02]$ بحيث أن قيمة متوسط الموضع تقدر بـ $\langle \bar{x} \rangle = 5.53 \cdot 10^{-5}$. كما يمثل المخطط باللون الأحمر تأرجحات قيمة مربع الموضع \bar{x}^2 حول القيمة 0.01 في المجال $[0.008, 0.013]$ بحيث أن قيمة متوسط مربع الموضع تقدر بـ $\langle \bar{x}^2 \rangle = 0.01$ ، يمكن تفسير هذه النتيجة من خلال زيادة طاقة الهزاز وذلك بزيادة طاقة الكمون



مقارنتنا بالهزاز التوافقي كما هو مبين في الشكل (12.3) وبالتالي يصبح وكأنه يتحرك داخل بئر كموني أضيق ضمن مسارات تتأرجح عند مجال أقل من المجال في الحالة التوافقية ويصبح منحى مربع طويلة دالة الموجة في الحالة الأرضية $\psi_0^{AH}(x)$ أضيق من نظيرتها في حالة الهزاز التوافقي $\psi_0^H(x)$ كما يتنبأ به التوزيع الاحصائي باللون الأصفر مقارنة مع منحى مربع طويلة دالة الموجة $\psi_0^H(x)$ باللون الأحمر.

الشكل (12.3): تغيرات دالة الكمون بدلالة الموضع بدون أبعاد [10].

يمكن تقدير طاقة الحالة الأساسية لهذا الهزاز غير التوافقي من خلال حساب المتوسط $\langle \tilde{x}^4 \rangle$ وتطبيق العلاقة التي تم الحصول عليها من نظرية الاضطراب والتي تعطى بالعلاقة التالية [10]:

$$E_0 = \tilde{m}\tilde{\omega}^2 \langle x^2 \rangle + 3\tilde{\lambda}\langle \tilde{x}^4 \rangle$$

وتكون على حسب تقدير مونت كارلو في محاكاتها لهذا النموذج $E_0 = 0,736$.

رابعاً سوف نتطرق الآن إلى دالة الترابط في قيم مخرجات طريقة مونت كارلو حيث يمكن قياس الترابط فيما بين قيم المواضع المختلفة داخل كل مسار وتدعى الدالة في هذه الحالة بدالة الترابط الذاتية، كما يمكن قياس هذا الترابط فيما بين المسارات (التشكيلات) المختلفة التي تحصلنا عليها بعد بلوغ مرحلة التوازن، بعدها نحاول إيجاد طريقة للتقليل من هذا الترابط الذي يؤدي إلى زيادة العشوائية في توليد المسارات بمعنى تكريس مفهوم عدم تفضيل مسار على مسار، ومن ثمة محاولة معرفة مدى تأثير نتائج القياس من عدمه بتقليل قيمة الترابط.

تعطى عبارة الترابط بين قيم متغيرين عشوائيين X و Y بالعلاقة التالية:

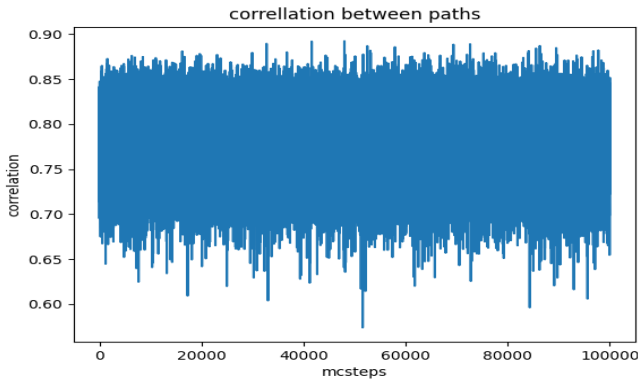
$$CoVar = \frac{\langle XY \rangle - \langle X \rangle \langle Y \rangle}{\delta_X \cdot \delta_Y}$$

حيث:

$$\delta_X = \sqrt{\text{Var}(X)} \text{ و } \delta_Y = \sqrt{\text{Var}(Y)}$$

وتكون قيمة دالة الترابط دوماً محصورة في المجال $[-1, +1]$. حيث أطراف هذا المجال تدل على ترابط قوي أما منتصفه عند القيمة 0 تمثل ترابط شبه معدوم.

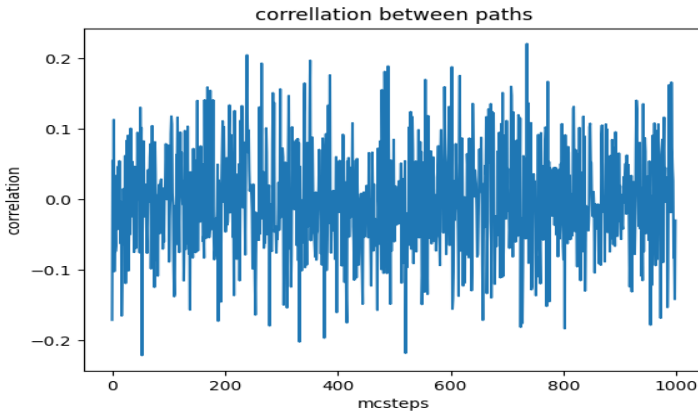
عند تطبيق هذه العلاقة على مخرجات طريقة مونت كارلو على إعتبار أن مواضع كل مسار هي قيم لمتغير



عشوائي X_i وقياس الترابط بين مسارين متواليين X_i و X_{i+1} يمكن رسم البيان التالي:

نلاحظ في الشكل (13.3) المقابل أن قيمة الترابط بين مسارات حالة التوازن تكون عالية في حدود 0,78، وهذا متوقع لأن المسارات تتأرجح ضمن مجال محدد وبالتالي تكون متقاربة القيم.

الشكل (13.3): تغيرات دالة الترابط في مرحلة التوازن بين المسارين X_i و X_{i+1}



الشكل (14.3): تغيرات دالة الترابط في مرحلة التوازن بين المسارين X_i و X_{i+100}

عند قياس الترابط بين مسارين غير متوالين كمثل X_i و X_{i+100} نلاحظ أن الترابط يكون معدوما تقريبا كما هو مبين في الشكل (14.3) وهذا يدل على أن تقارب المسارات المولدة نحو التوزيع المستهدف يتم بشكل عشوائي غير مترابط لكن بسبب كثافة هاته المسارات يكون الترابط فيما بينها قوي بمعنى أن خوارزمية ميتروبوليس تقوم فعلا بمقاربة سلسلة المسارات العشوائية نحو توزيع

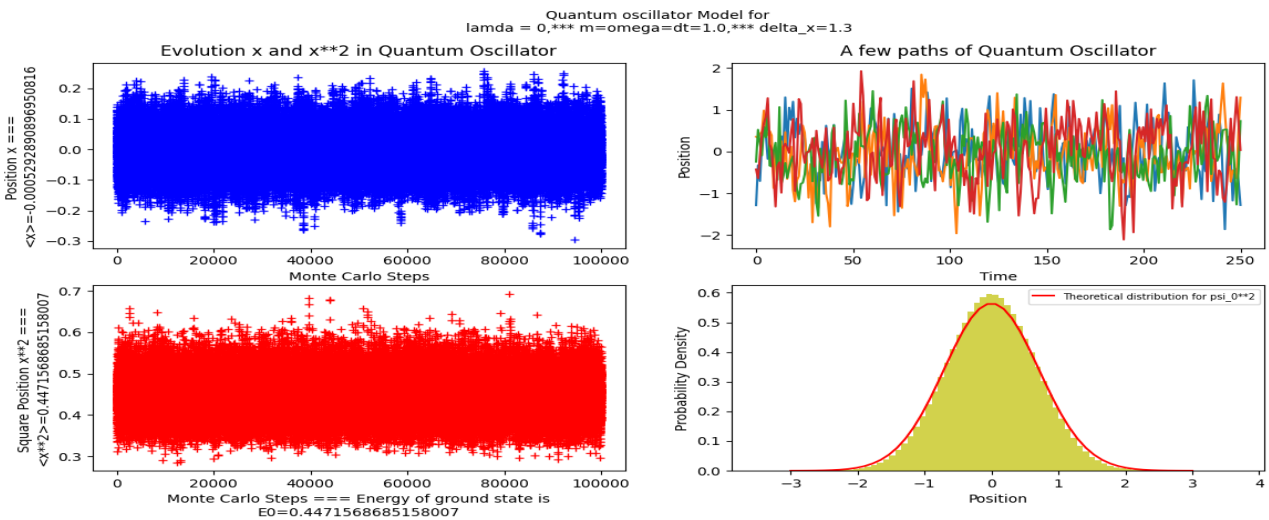
مستهدف عندها تكون قيم السلاسل المولدة قريبة من بعضها البعض ينتج عنه ترابط أعلى، وتبعاً لذلك سوف لن تتأثر قيم المتوسطات بتقليل الترابط في هاته المرحلة حيث يظهر وكأننا حسبنا المتوسطات على عدد أقل من المسارات فقط، بل بالعكس سوف تقل دقة النتيجة لأننا سنحسب المتوسطات على عدد أقل من التشكيلات مما يزيد في قيمة الانحراف كما بينا في الفصل الاول والمعادلة التالية تبين ذلك رياضياً:

عندما تكون قيمة الكمية المراد حسابها في مرحلة التوازن شبه ثابتة (التأرجحات تكون ضئيلة) نجد تبعاً لذلك قيمة متوسطها لا يتغير بزيادة عدد التشكيلات.

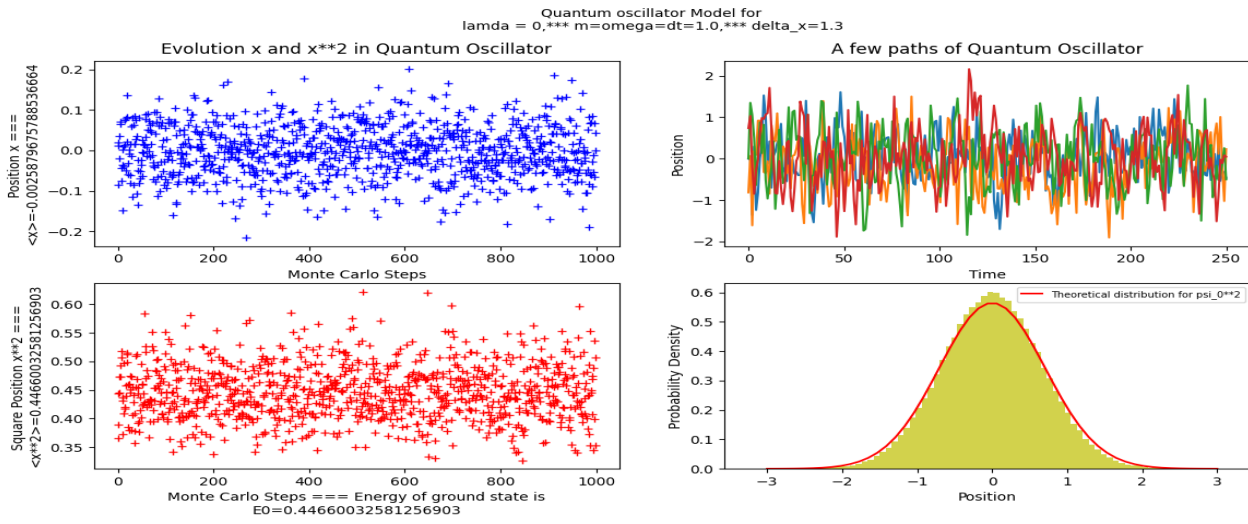
$$\langle A \rangle = \frac{1}{Config} \sum_{i=1}^{Config} A_i \text{ حيث } A_i \approx const$$

$$\Rightarrow \langle A \rangle \approx \frac{Config}{Config} A_i, Config \text{ مهما كانت قيمة}$$

وفي الشكلين (15.3) و (16.3) نوضح نتائج القياس قبل وبعد تغيير قيمة الترابط حيث بعد خفض قيمة الترابط تقل دقة حساب المتوسطات كما وضحناه:



الشكل (15.3): نتائج محاكاة نموذج هزاز كمي توافقي من اجل قيمة ترابط عالية.



الشكل (16.3): نتائج محاكاة نموذج هزاز كمي توافقي من اجل قيمة ترابط شبه معدومة.

لذلك لا بد من قياس ترابط المسارات قبل بلوغ مرحلة التوازن وكذلك قياس دالة الترابط الذاتية أثناء زمن ميترابوليس الذي يمثل خطوة واحدة من خطوات مونتج كارلو بدلا من قياس ترابط المسارات في زمن مونتج كارلو بعد بلوغ مرحلة التوازن ومراقبة دقة النتائج المتحصل عليها.

الختامة العامة

الخاتمة:

كما هو معروف أنه ليس من السهل الوصول للحل التحليلي لمعظم المسائل في ميكانيك الكم، لذا كانت الحاجة تستدعي الاستعانة بطرق عديدة تسهل الحصول على معلومات دقيقة حول الأنظمة الفيزيائية. طُرح في هاتاه المذكرة أحد اهم هذه الطرق وهي طريقة مونتي كارلو بسلاسل ماركوف، حيث كان التساؤل في بحثنا عن ماهية هذه الطريقة ومدى دقة نتائجها والآلية المتبعة لتطبيقها في ميكانيك الكم.

لتطبيق طريقة مونتي كارلو على مسائل في ميكانيك الكم وجب البحث عن الأسلوب المناسب، لذا أدرج في موضوعنا مفهوم التكامل على المسار، وهو أسلوب يصف ميكانيك الكم ولكن يحمل في طياته مفاهيم كلاسيكية ما يجعله أقرب للفهم مقارنة بغيره من الأساليب، حيث يظهر في صيغته معامل الوزن الإحصائي $(\exp(iS / \hbar))$ ، وهو ما يسمح بالتعامل مع المسألة عدديا باستعمال الطرق الإحصائية من خلال تطبيق طريقة مونتي كارلو.

استهدفت دراستنا نموذج الهزازات الكمية التوافقية وغير التوافقية، لكن لتبسيط الفهم والتعرف أكثر على طريقة مونتي كارلو أجرينا تطبيق لهذه الأخيرة على نموذج أكثر بساطة والمتمثل في نموذج أيزينغ، حيث يهتم هذا الأخير بإحصاء الكميات الفيزيائية من خلال توزيع التشكيلات على أساس الطاقة $\exp(-\beta\Delta E)$ ، أما في نموذج الهزازات الكمية فيكون توزيع التشكيلات على أساس المسارات كحالات مجهرية للنظام.

قمنا بكتابة برنامج لكل نموذج على حد بلغة python، ومن خلال المحاكاة لنموذج أيزينغ تبين توافق النتائج العددية مع ما هو متوقع من نتائج تحليلية، حيث لوحظ من خلال الشكل (9.2) ان طاقة النظام ترتفع بارتفاع درجة الحرارة، كما اتضح جليا من خلال النتائج وجود التحول الطوري والموافق لدرجة الحرارة الحرجة $T_c \approx 2,5K$ وذلك بانعدام المغنطة عند هذه الدرجة، كما وافق هذا التحول عند هذه الدرجة مستقيمات مقاربة في المنحنى البياني لكل من الحرارة النوعية وقابلية المغنطة وهو ما يوافق بشكل كبير الحلول التحليلية لهذا النموذج. كانت هذه النتائج فيما يخص النموذج الأول، والذي طرح كمرحلة أولى لتسهيل الفهم. تمهيدا للدراسة المستهدفة والتي تهتم بالمسائل التي يمكن تطبيق أسلوب التكامل على المسار في حلها. واخترنا كما سبق التوضيح نموذج الهزازات الكمية كمسألة قيد الدراسة.

من خلال تطبيق طريقة مونتي كارلو بخوارزمية ميتروبوليس على الهزاز التوافقي $\tilde{\lambda} = 0$ وغير التوافقي $\tilde{\lambda} \neq 0$ في محاكاتها تمكنا من حساب الكميات الفيزيائية. كما تمكنا أيضا من رؤية سلوك المحاكاة العددية أثناء تغيير متغيرات الإدخال، وكيفية تطور المسارات الكمية مع مرور الوقت وعلى وجه الخصوص كيفية إقتراب نظام الميكانيك الكمي المنفصل من حد الاستمرارية. ومن أهم النتائج المستنبطة من هذه المحاكاة هي معرفة المتغيرات التي تمكنا من تحسين أداء طريقة مونتي كارلو لإعطاء نتائج أكثر دقة من بينها:

- المعدل المناسب لقبول خوارزمية ميتروبوليس للتغيرات في المسار، حيث يوفر هذا المعدل تسريعا لتقارب المسارات نحو التوزيع المناسب.

- الوصول الى عدد التكرار الكافي لبلوغ حالة التوازن حيث يختلف التكرار باختلاف متغيرات الهزاز الكمي، حيث كلما زادت طاقة الهزاز من خلال زيادة $\bar{\omega}$ و $\bar{\omega}$ تقلص عدد خطوات مونتني كارلو اللازمة لبلوغ حالة التوازن، كما يتعلق هذا الأخير بـ $delta_x$.
- ضرورة اختيار قيمة الخطوة $delta_x$ بعناية لزيادة دقة المتوسطات.

كما أظهرت نتائج المحاكاة للهزازين الكميين التوافقي وغير التوافقي ما يلي:

- توافقا في قيم المتوسطات مع النتائج التحليلية بحيث قيمة الانحراف عن القيمة التحليلية للهزاز التوافقي من الرتبة $10^{-3} \cong \Delta \bar{x}$ ، بينما للهزاز غير التوافقي من الرتبة $10^{-5} = \langle \bar{x} \rangle$.
- طاقة الحالة الأساسية للتوافقي $E_0 = 0.448$ ، بينما للهزاز غير التوافقي كانت $E_0 = 0.736$
- من خلال رسم المنحى العام لمربع طويلة دالة الموجة للهزازين، ظهر تباين بين الحالتين، حيث تطابقت في الهزاز التوافقي مع توزيع المواضع. أما فيما يخص الهزاز غير التوافقي فكان المنحى ضيقا بالمقارنة مع توزيع المواضع للهزاز التوافقي وهذا راجع لزيادة طاقة الكمون.
- تقارب المسارات المولدة عن طريق خوارزمية ميتروبوليس يؤدي إلى ترابطا أعلى فيما بينها. ونذكر أنه لم يظهر في نتائجنا تحسين في المتوسطات مع تقليل هذا الترابط.

ومن خلال النتائج المتحصل عليها نلاحظ أن أداء طريقة مونتني كارلو في المحاكاة يتعلق بعدد المتغيرات، منها ما يخص النموذج في حد ذاته ومنها ما يخص الخوارزمية، لذلك نرى أنه من المفيد إجراء المزيد من الاختبارات لتحسين أداءها.

في ختام هذا العمل ننوه بأن محاكاة كلا النموذجين بطريقة مونتني كارلو أظهرت مدى أهمية هذه الطريقة وأهليتها للحساب مع مراعاة ما تتطلبه المسألة المدروسة، حيث يمكن تطبيقها على نماذج أكثر تعقيدا كنموذج BFSS.

- [1]. B. Yadri, "Computational physics: an introduction to Monte Carlo simulations of matrix field theory", World Scientific, 2017.
- [2]. Feynman, Richard P., Albert R. Hibbs, and Daniel F. Styer. Quantum mechanics and path integrals. Courier Corporation, 2010.
- [3]. Greiner, Walter, and Joachim Reinhardt. Field quantization. Springer Science & Business Media, 2013.
- [4]. Jos Thijssen, "Computational Physics", Cambridge University Press, 2007.
- [5]. Binder, Kurt. "Statistical theories of phase transitions." Phase transformations in materials (2001): 239-308.
- [6]. Bowers, Philip L. Lectures on Quantum Mechanics: A Primer for Mathematicians. Cambridge University Press, 2020.
- [7]. Blau, Matthias. "Notes on (semi-) advanced quantum mechanics: The path integral approach to quantum mechanics." web page at <http://www.blau.itp.unibe.ch/lecturesPI.pdf>. Linked to from <http://www.blau.itp.unibe.ch/Lecturenotes.html> (2006).
- [8]. Kadanoff, Leo P. "More is the same; phase transitions and mean field theories." Journal of Statistical Physics 137 (2009): 777-797.
- [9]. La perrière, Vanessa Bergeron. "L'Algorithme Metropolis-Hastings Projet de recherche CRSNG." (2010).
- [10]. Mittal, Shikhar, Marise JE Westbroek, Peter R. King, and Dimitri D. Vvedensky. "Path integral Monte Carlo method for the quantum anharmonic oscillator." European Journal of Physics 41, no. 5 (2020): 055401.
- [11]. Porwal, Sahaj. "School of Physics and Astronomy." (2020).
- [12]. Rosenfelder, Roland. "Path integrals in quantum physics." arXiv preprint arXiv:1209.1315 (2012).
- [13]. Sapik, Aleksandra, and Willian M. Serenone. "Lattice Monte Carlo Study of the Harmonic Oscillator in the Path Integral Formulation."
- [14]. Scott, Jacob L. "Monte Carlo Applications and Lattice QCD." (2016).

- [15]. Shumovsky, A. S., and V. I. Yukalov, eds. Lectures on phase transitions. World Scientific, 1990.
- [16]. Sukanta Deb." Variational Monte Carlo Technique" (Delhi). Resonance 2014.
- [17]. Westbroek, Marise JE, Peter R. King, Dimitri D. Vvedensky, and Stephan Dürr. "User's guide to Monte Carlo methods for evaluating path integrals." American Journal of Physics 86, no. 4 (2018): 293-304.
- [18]. <https://sciences24.com/خوارزمية-مونت-كارلو-monte-carlo-algorithm/>
- [19]. <https://fastercapital.com/arabpreneur>
- [20]. <https://pressbooks.online.ucf.edu/osuniversityphysics3/chapter/the-quantum-harmonic-oscillator>
- [21]. عبد الهادي محمد حمدان البرغوثي، الميكانيك الإحصائية القدس، الطبعة الأولى (2020).
- [22]. رجا ضيف الله، رسالة ماستر أكاديمي الدراسة العددية لنموذج ايزينغ، جامعة الشهيد حمه لخضر بالوادي (2018)
- [23]. رزاق محسن عائشة، دراسة عددية لدالة الربط الثنائية في نموذج ايزينغ، جامعة الشهيد حمه لخضر بالوادي (2019)
- [24]. عطا الله حنان، الأسس الحرجة ونموذج أيزينغ، جامعة الشهيد حمه لخضر بالوادي (2019).