

П. В. Прудников, М. А. Медведева, Р. А. Каюмов,
И. З. Мухамедова

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ СИСТЕМ С ДАЛЬНОДЕЙСТВУЮЩЕЙ КОРРЕЛЯЦИЕЙ ДЕФЕКТОВ

Ключевые слова: неупорядоченные системы, методы Монте-Карло, коротко-временная динамика, модель Гейзенберга, протяженные дефекты структуры, эффекты старения.

Проведено численное исследование поведения характеристик сильно неупорядоченной модели Гейзенберга с дальнедействующей корреляцией дефектов структуры методами Монте-Карло. При моделировании из полностью упорядоченного начального состояния были определены статистические и динамические критические индексы. Были исследованы эффекты старения, проявляющиеся в двухвременной зависимости корреляционной функции и функции отклика от времени приготовления образца t_w и времени наблюдения $t-t_w$, а также в нарушении флуктуационно-диссипативного отношения.

Keywords: welding : disordered system, Monte-Carlo method, short-time dynamics, Heisenberg model, long-range correlation disorder, aging effects.

A numerical study of Monte Carlo behavior characteristics strongly disordered Heisenberg model with long-range correlations of structural defects. In the simulation from fully ordered initial state the static and dynamic critical exponents were identified. We investigated the aging effects that appear in the two-time correlation function and the response function of the sample preparation time t_w and observation time $t-t_w$, and in violation of the fluctuation-dissipation relation.

Введение

Проблема описания фазовых переходов одна из наиболее сложных и актуальных задач статистической теории. Наблюдаемые по мере приближения к точке фазового перехода аномально большие и долгоживущие флуктуации некоторых термодинамических переменных характеризуются эффективно сильным взаимодействием между собой. Для теоретического анализа поведения таких систем разработаны сложные методы ренормгруппового и теоретико-полевого описания. Используемые при этом приближения, как и в случае других систем с сильным взаимодействием, требуют для их обоснования сопоставления достигнутых результатов с результатами физического или компьютерного эксперимента. Компьютерное моделирование дает возможность получения наглядной информации о росте флуктуаций намагниченности и критическом замедлении процессов релаксации в ферромагнитных системах по мере приближения к температуре фазового перехода, о проявлении аномальных свойств в поведении теплоемкости и магнитной восприимчивости.

При изучении фазовых переходов и критических явлений большое внимание уделяется определению значений совокупности показателей, которые получили название критических показателей и которые описывают эффективное степенное поведение различных термодинамических и корреляционных функций вблизи температуры фазового перехода.

Основная часть

Асимптотический критический показатель λ наблюдаемой физической величины $f(\tau)$

определяется вблизи критической температуры T_c пределом

$$\lambda \equiv - \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\ln f(\tau)}{\ln \tau}, \quad (1)$$

где $\tau = (T - T_c) / T_c$ - приведенная температура, характеризующая степень удаления температуры от критической. Поведение ряда физических величин вблизи критической точки T_c можно задать определенным набором критических индексов. Например, критический индекс γ для магнитной восприимчивости

$$\chi \sim |\tau|^{-\gamma}, \quad (2)$$

Критический индекс β для параметра порядка, намагниченности для ферромагнитных систем,

$$m \sim |\tau|^\beta, \quad (3)$$

Для описания флуктуаций параметра порядка вводится критический индекс ν , определяющий температурную зависимость корреляционной длины

$$\xi \sim |\tau|^{-\nu}, \quad (4)$$

Степенной закон типа (2) является точным лишь в асимптотическом режиме $\tau \rightarrow 0$. В этом режиме критические показатели принимают постоянные значения. Согласно гипотезе универсальности они определяются только глобальными переменными. Для короткодействующего взаимодействия таковыми являются пространственная размерность и тензорные свойства параметра порядка. В неасимптотическом режиме приближение к критической области характеризуется неуниверсальными эффективными критическими показателями, которые вводят для описания поведения величин в некотором температурном

интервале [1,2]. Эффективный критический показатель восприимчивости γ_{eff} имеет вид

$$\gamma_{eff} = -\frac{\ln \chi(\tau)}{\ln \tau}, \quad (5)$$

Степенные сингулярности физических величин появляются только в термодинамическом пределе, когда объем системы и количество частиц стремятся к бесконечности. Таким образом, очевидное препятствие в компьютерных экспериментах состоит в том, что моделировать можно только системы ограниченных размеров. Более того, в компьютерных экспериментах невозможно достигнуть асимптотической температурной области, так как T_c как таковая не существует для конечных систем. В то же время положение критической температуры имеет решающее значение для определения критических показателей. Данные можно экстраполировать к термодинамическому пределу, предполагая, что режим постоянного критического показателя устанавливается, начиная с некоторого конечного размера системы, в пределах некоторого ненулевого интервала вокруг T_c . Последнее предположение, используемое в компьютерном моделировании, ведет к чрезвычайно узкому температурному интервалу ниже и выше T_c , поставляющему надежные данные. Ограничения сверху определяются температурой, когда вступает в игру поправка к скейлингу. Нижняя граница следует из эффектов ограниченного размера системы в моделировании методом Монте-Карло. Поэтому показатели, получаемые описанным способом, часто оказываются эффективными критическими показателями, характеризующими критическое поведение в наблюдаемом температурном интервале. С другой стороны, динамика чистых и неупорядоченных спиновых систем обуславливается различными временными масштабами. Поэтому в случае последних только очень длительное моделирование позволяет получить надежные данные. Время релаксации сильно увеличивается не только при приближении к T_c . В ранних компьютерных экспериментах оно также увеличивалось с ростом разбавления, переходя от чистой $p=1.0$ системы к разбавленной $p=0.6$, большие времена релаксации. Данное явление получило название критического замедления. Суммарное увеличение вычислительного времени происходит именно благодаря конфигурационному усреднению. В результате точность ограничена имеющимся в распоряжении временем процессора, с одной стороны, и количеством образцов, по которому проводится конфигурационное усреднение - с другой.

Исследование критического поведения неупорядоченных систем остается одной из главных проблем в физике конденсированных сред и вызывает большой интерес, потому что все реальные твердые тела содержат дефекты. Структурный беспорядок нарушает трансляционную симметрию кристалла и тем самым существенно усложняет теоретическое описание

материала. Учет влияния дефектов особенно важен вблизи критической точки, где поведение системы характеризуется аномально большим откликом на любое даже слабое возмущение.

При теоретическом описании поведения сильно неупорядоченных систем с концентрацией спинов $p \leq 0.60$ уже нельзя считать концентрацию дефектов малой величиной. Что сильно затрудняет или даже делает невозможным их теоретическое описание. Для описания таких систем разрабатываются специальные численные методы, целью которых является нахождение критических индексов данных систем в зависимости от концентрации дефектов структуры. Что впоследствии позволит выяснить вопрос о существовании нового класса универсальности для сильно неупорядоченных систем.

В данной работе впервые исследуется критическое поведение трехмерной сильно неупорядоченной спиновой системы с линейными дефектами структуры, описываемой моделью Гейзенберга, с гамильтонианом

$$H = -J \sum_{i,j} p_i p_j \bar{S}_i \bar{S}_j, \quad (6)$$

где $\bar{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ – это трехмерный единичный вектор в узле i , $J > 0$ характеризует обменное взаимодействие ближайших спинов, носящее ферромагнитный характер, p_i – случайные переменные, характеризующие замороженный структурный беспорядок в системе ($p_i=1$, когда узел i занят спином, и $p_i=0$, когда узел пуст). Общая спиновая концентрация в системе была выбрана равной $p=0.6$. В качестве метода численного исследования был использован метод Монте-Карло, используемый для прямого моделирования естественной вероятностной модели, позволяет довольно просто вычислить средние в каноническом ансамбле.

Для описания сложных протяженных дефектов вводятся различные модели структурного беспорядка. В данной работе исследуется модель Вейнриба-Гальперина с так называемой дальнедействующей изотропной корреляцией дефектов [3], когда парная корреляционная функция $g(x-y)$ спадает с расстоянием по степенному закону с $g(x-y) \sim |x-y|^{-a}$, где a – параметр корреляции дефектов структуры. При наличии в системе протяженных дефектов – дислокаций или плоскостей, ориентированных случайным образом, ее критическое поведение может быть также описано в рамках модели Вейнриба-Гальперина при значениях параметра корреляции $a = d-1$ или $a = d-2$, соответственно, где d – размерность системы. В проведенном в работе [4] теоретико-полевом исследовании трехмерных систем с дальнедействующей корреляцией дефектов в двухпетловом приближении было показано, что дефекты, обладающие свойством дальней пространственной корреляции, изменяют критическое поведение не только систем с однокомпонентным параметром порядка, как в

случае точечных дефектов, но и систем с многокомпонентными параметрами порядка.

Полагается, что дальнедействующие эффекты корреляции между точечными дефектами реализуются в виде случайно ориентированных линий с корреляционными характеристиками, спадающими по степенному закону с показателем $a=2$. Для этого был использован следующий способ создания примесных конфигураций: из заполненной спинами трехмерной решетки случайным образом удалялись линии, параллельные осям координат, до достижения заданной концентрации примесей. Для обеспечения изотропности распределения дефектов в кристалле число удаляемых линий в каждом из трех направлений поддерживалось одинаковым.

В работе [5] для получения критической температуры для слабо неупорядоченной трехмерной модели Гейзенберга с линейными

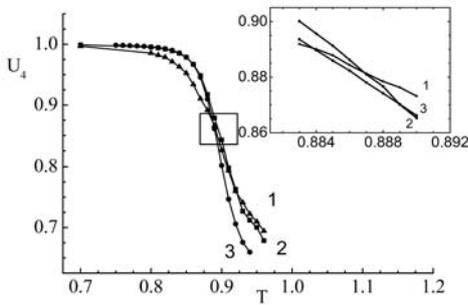


Рис. 1 - Зависимость кумулянта Биндера U_4 от температуры для разных линейных размеров решетки $L=32$ (1), $L=48$ (2) и $L=64$ (3)

дефектами с концентрацией спинов $p=0.8$ мы применяли метод кумулянтов Биндера и методику пересечения кривых ξ/L .

Выражение для кумулянта Биндера можно представить в виде

$$U_4 = \frac{1}{2} \left(3 - \frac{[\langle m^4 \rangle]}{[\langle m^2 \rangle]^2} \right), \quad (7)$$

где скобки $\langle \dots \rangle$ обозначают статистическое усреднение, а скобки $[\dots]$ - усреднение по различным конфигурациям примеси. Для неупорядоченных систем вычисление k -го момента намагниченности $m^{(k)}(t)$ осуществляется в виде

$$m^{(k)}(t) = \left\langle \left[\frac{1}{pL^3} \sum_{i=1}^{N_s} \bar{S}_i p_i \right]^k \right\rangle \quad (8)$$

$$U_4(L, T) = u(L^{1/\nu} (T - T_c)), \quad (9)$$

не содержащую мультипликативной зависимости от L . Данная скейлинговая зависимость кумулянта позволяет определять критическую температуру $T_c(L=\infty)$ через координату точки пересечения кривых, задающих температурную зависимость $U_4(L, T)$ для различных L . Более того, легко показать, что в критической области при $T \rightarrow T_c$

$$\frac{dU_4}{dT} \sim L^{1/\nu} \quad (10)$$

и следовательно, по максимальному наклону кумулянтов, соответствующих различным L в пределе $L \rightarrow \infty$, вблизи точки их пересечения можно определить критический индекс корреляционной длины ν .

Для уменьшения эффектов критического замедления вычисления проводятся на суперкомпьютерных вычислительных системах с использованием эффективных алгоритмов, таких как кластерные алгоритмы Вольфа [6] или Свендсена-Ванга [7]. Отличие этих алгоритмов заключается в том, что в случае однокластерного алгоритма Вольфа строится один кластер, который переворачивается с вероятностью равной 1, а в случае многокластерного алгоритма Свендсена-Ванга система разбивается на множество кластеров, каждый из которых переворачивается с вероятностью $1/2$. В ходе численных исследований было установлено, что в низкотемпературной области для сильно неупорядоченной модели Гейзенберга с линейными дефектами кластерный алгоритм моделирования должен обязательно модифицироваться многокластерным алгоритмом Свендсена-Ванга.

На первом этапе для оценки значения критической температуры была рассчитана температурная зависимость восприимчивости $\chi = [\langle m^2 \rangle] - [\langle m \rangle]^2$ для различных линейных размеров решетки $L = 32, 48, 64$. По положению максимума температурной зависимости восприимчивости на была оценена область значений критической температуры $T_c = 0.90$ J/k_B. Для уточнения значения критической температуры были рассчитаны температурные зависимости кумулянта Биндера для различных линейных размеров решетки $L = 32, 48, 64$, изображенные на рис. 1. Эти кривые были получены усреднением по 1500 конфигурациям примеси для $L=32$, по 1100 для $L=48$ и по 300 для $L=64$ для каждой из которых усреднение проводилось по 25 прогонкам. Для расчета одной конфигурации системы с линейным размером $L=64$ на суперкомпьютерной вычислительной системе семейства СКИФ с использованием методов параллельного программирования требуется около 100 часов.

Через координату точки пересечения кривых $U_4(L, T)$ и $\xi/L(L, T)$, представленных на рисунке 1, были определены значения критической температуры $T_c = 0.8867(50)$ и $T_c = 0.8891(13)$, соответственно. В качестве итогового значения критической температуры было взято среднее значение $T_c = 0.8879(50)$. Используя выражение (10), были получены значения критического индекса ν для различных линейных размеров $L=32, 48, 64$ и для различных значений температуры выше критической. Известно, что фазовый переход второго рода может проявиться лишь в термодинамическом пределе, когда объем системы

и количество частиц в ней стремится к бесконечности. Таким образом, эффективное значение критического показателя может быть найдено при взятии предела $T \rightarrow T_c$ и $L \rightarrow \infty$.

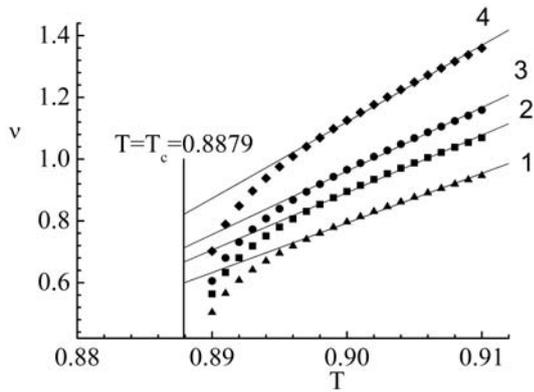


Рис. 2 - Температурная зависимость показателя $\nu(T, L)$ $L=32$ (1), $L=48$ (2), $L=64$ (3) и $L=\infty$ (4)

Реализация данной процедуры для представленной на рис. 2 зависимости $\nu(T, L)$ позволяет рассчитать асимптотическое значение индекса $\nu=0.821(14)$.

В работе [8] для однородной трехмерной модели Гейзенберга было получено значение $\nu=0.7048(30)$ и в работе [5] для трехмерной слабо неупорядоченной модели Гейзенберга с линейными дефектами было получено значение $\nu=0.770(74)$. Сравнивая полученное нами в этой работе значение ν со значениями полученными в выше указанных

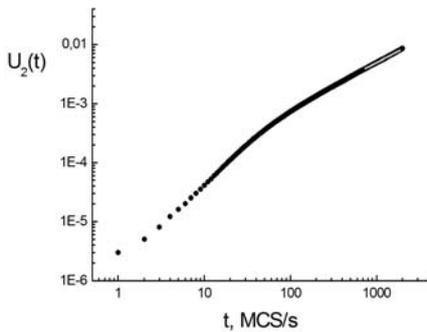


Рис. 3 - Временная зависимость кумулянта U_2 для системы с линейным размером решетки $L=64$ при $T = T_c = 0.8879$

работах, можно сделать вывод, что данные системы принадлежат к разным классам универсальности, то есть критические индексы, описывающие поведение данных систем в критической точке, меняются с изменением концентрации спинов.

В данной работе исследовалась релаксация намагниченности, которая при критической температуре характеризуется степенным законом $m(t) \sim t^{-\beta/\nu z}$. Для независимого определения динамического критического индекса z используется кумулянт второго порядка

$U_2 = m^{(2)}/m^2 - 1$ со скейлинговой зависимостью $U_2(t) \sim t^{d/z}$, где d – размерность системы, z – динамический критический индекс, характеризующий асимптотическую зависимость времени релаксации системы и времени корреляции состояний от приведенной температуры по мере приближения к критической температуре $\tau_{rel}, \tau_{corr} \sim |T_c - T|^{-z\nu}$. Для моделирования был применен алгоритм Метрополиса.

На рис. 3 представлены временные зависимости кумулянта U_2 . С помощью линейной аппроксимации на интервале [260; 1330] MCS/s были получены следующие значения показателей $\beta/\nu z = 0.176(4)$, $d/z = 0.691(30)$ и соответствующие значения критических индексов $z = 4.343(188)$, $\beta/\nu = 0.765(42)$. Интервал, на котором были получены данные индексы, выбирался из минимума среднеквадратичной погрешности аппроксимации исследуемых величин.

Были исследованы эффекты старения, проявляющиеся в двухвременной зависимости корреляционной функции и функции отклика от времени приготовления образца t_w и времени наблюдения $t - t_w$, а также в нарушении флуктуационно-диссипативного отношения, которое связывает динамическую функцию отклика $R(t, t_w)$ и корреляционную функцию $C(t, t_w)$:

$$R(t, t_w) = \frac{X(t, t_w)}{kT} \frac{\partial C(t, t_w)}{\partial t_w}, \quad (11)$$

где $X(t, t_w)$ – флуктуационно-диссипативное отношение. В состоянии равновесия $X(t, t_w) = 1$. Характеристика неравновесного поведения систем с медленной динамикой $X_{inf} = \lim_{t_w \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty} X(t, t_w)$.

Главной особенностью неравновесного поведения систем с медленной динамикой является нарушение трансляционной инвариантности во времени за счет долговременного влияния неравновесных начальных состояний таких систем. Это находит проявление прежде всего в двухвременных характеристиках системы, таких как корреляционные функции и функции отклика.

В таких системах наблюдаются свойства старения и нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы [8].

Под процессом старения материалов понимают явление роста времени релаксации системы к состоянию равновесия с увеличением «возраста» материала, т.е. времени прошедшего после приготовления образца [9]. Явление старения проявляется математически, прежде всего в двухвременных характеристиках системы, таких как корреляционные функции и функции отклика. При неравновесных процессах эти функции зависят от двух переменных временной природы: t и t_w , при $t > t_w$, и не только от их разницы, но и от каждой в отдельности. Причем эта зависимость сохраняется и при достаточно больших временах наблюдения t . Временная переменная t_w характеризует возраст

образца, т.е. время, прошедшее после его приготовления, и называется временем ожидания. При явлении старения процесс релаксации системы как функции времени наблюдения t замедляется тем больше, чем больше возраст образца, т.е. с увеличением времени ожидания t_w .

В работе осуществлялся расчет автокорреляционной функции $A(t, t_w)$

$$A(t, t_w) = \left[\left\langle \frac{1}{pL^3} \sum_{i=1}^{pL^3} \bar{S}_i(t) \bar{S}_i(t_w) \right\rangle \right] - [\langle m(t_w) \rangle] \cdot [\langle m(t) \rangle], \quad (12)$$

представленной на рис. 4, и магнитной

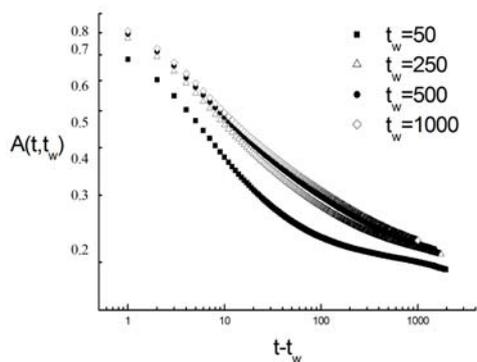


Рис. 4 - Поведение автокорреляционной функции $A(t, t_w)$ для различных времен ожидания t_w

восприимчивости $\chi(t, t_w)$

$$\chi(t, t_w) = \left[\left\langle \frac{1}{h^2 pL^3} \sum_{i=1}^{pL^3} \bar{h}_i(t) \bar{S}_i(t) \right\rangle \right],$$

черта означает усреднение по реализациям магнитного поля на решётке.

Для вычисления $\chi(t, t_w)$ в момент времени t_w к гамильтониану добавлялось возмущение

$\sum_i \bar{h}_i(t) \bar{S}_i(t)$, где магнитное поле случайно задавалось в узлах решётки с бимодальным распределением $\pm h$ для каждой оси.

Был осуществлен расчет флуктуационно-диссипативного отношения для различных времен ожидания t_w для сильно неупорядоченной системы.

Показано, что в неравновесном поведении модели Гейзенберга с линейными дефектами наблюдаются эффекты старения. Проведен расчет флуктуационно-диссипативного отношения $\chi_{inf}=3.38(30)$. Полученное значение χ_{inf} в неравновесном режиме для неупорядоченной модели Гейзенберга с линейными дефектами носит универсальный характер[12,13].

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы (соглашение 14.В37.21.2018).

Литература

1. Kouvel J. S., Fisher M. E. // Phys. Rev. A., 1964, V. 136. – P. 1626.
2. Riedel E. K., Wegner F. J. // Phys. Rev. B., 1974, V. 9. – P. 294.
3. Weinrib A., Halperin B.I. // Phys. Rev. B., 1983, V. 27. – P. 413.
4. Prudnikov V.V., Prudnikov P.V., Fedorenko A.A. // Phys. Rev. B., 2000, V. 62. – P. 8777.
5. Prudnikov P.V., Medvedeva M.A. // Progr. Theor. Phys., 2012, V. 127, N. 3. – P. 369 – 382.
6. Wolf U. // Phys. Rev. Lett., 1989, V. 62. – P. 361.
7. Swendsen R.H., Wang J.S. // Phys. Rev. Lett., 1987, V. 58. – P. 86.
8. Chen K., Ferrenberg A.M., Landau D.P. // Phys. Rev. B., 1993, V. 48. – P. 3249.
9. Calabrese P. Ageing properties of critical systems / P.Calabrese, A.Gambassi // J. Phys. A., 2005, V. 38. – P. R133.
10. Struik L.C.E. Physical Aging in Amorphous Polymers and Other Materials. Amsterdam: Elsevier, 1978.
11. Каюмов Р.А. Моделирование поведения пленочно-тканевого материала при воздействии эксплуатационных факторов/ Р.А. Каюмов, А.М.Сулейманов, И.З.Мухамедова // Механика композиционных материалов и конструкций. 2005. – т.11. – №4. – С.519-530.
12. Каюмов, Р.А. Физически нелинейная модель тканевых материалов, обработанных в потоке высокочастотной плазма/ Р.А.Каюмов, И.Ш.Абдуллин, М.Н.Серзутдинов, В.В.Хамматова, И.З.Мухамедова, Е.В.Кумпан, А.М.Шакирова // Вестник Казанского технологического университета. № 6; Федеральное агентство по образованию, Казан. гос. технол. ун-т. – Казань: КГТУ, 2010. – С. 42 – 53.
13. Каюмов, Р.А. Математическое моделирование деформирования текстильных материалов с содержанием полимерных волокон /Р.А.Каюмов, В.В.Хамматова// Вестник Казанского технологического университета. № 14; Федеральное агентство по образованию, Казан. гос. технол. ун-т. – Казань: КГТУ, 2012. – С. 154 – 156.

© П. В. Прудников – д.ф.-м.н., проф. каф. теоретической физики, Омский госуд. университет им. Ф.М. Достоевского, prudnikp@univer.omsk.su; М. А. Медведева – асп., препод. той же кафедры, mmed@mail.ru; Р. А. Каюмов – проф., д.ф.-м.н., зав. каф. сопротивления материалов и основ теории упругости КГАСУ, проф. каф. дизайна КНИТУ, kaumov@gambler.ru; И. З. Мухамедова – к.ф.-м.н., доц. каф. сопротивления материалов и основ теории упругости КГАСУ, muhamedova-inzilija@mail.ru.