บทที่ 3
ระเบียบวิจัย

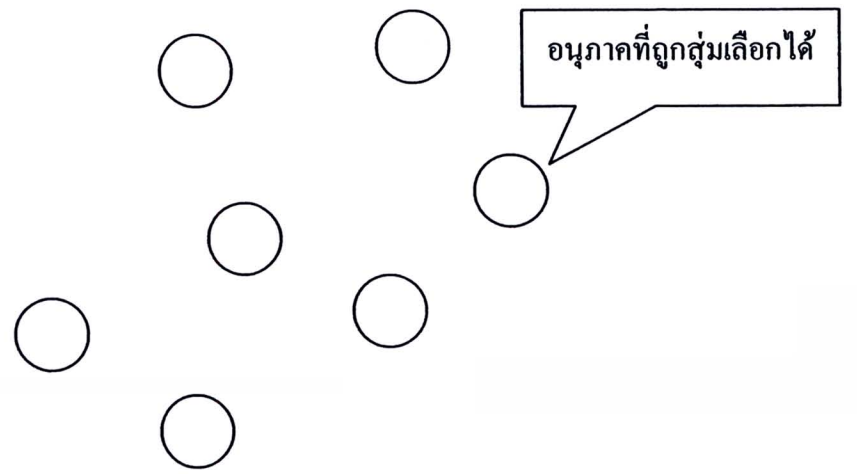
งานวิจัยนี้ใช้โปรแกรมการจำลองสถานการณ์ เพื่อใช้ศึกษาสมบัติทางแม่เหล็กของอนุภาคแม่เหล็กที่มีการแพร่ในปริภูมิต่อเนื่อง 3 มิติ ซึ่งใช้การจำลองสถานการณ์มอนติคาร์โลเป็นแม่แบบ โดยมีการออกแบบผังการทำงาน (Flow chart) เพื่อสร้างโปรแกรมการจำลองสถานการณ์ จากนั้นสร้างโปรแกรมโดยใช้ Visual basic 6.0 เนื่องจากเป็นโปรแกรมที่มีความยืดหยุ่นและปรับเปลี่ยนการทำงานได้ง่าย แล้วใช้โปรแกรมดังกล่าวทำการจำลองสถานการณ์โดยกำหนดเงื่อนไขการจำลองการแพร่ของอนุภาคแม่เหล็กที่เงื่อนไขต่างๆ เพื่อวัดสมบัติทางแม่เหล็กของอนุภาค แล้วจึงนำมาวิเคราะห์ผล

3.1 การจำลองสถานการณ์การแพร่ของอนุภาคแม่เหล็ก

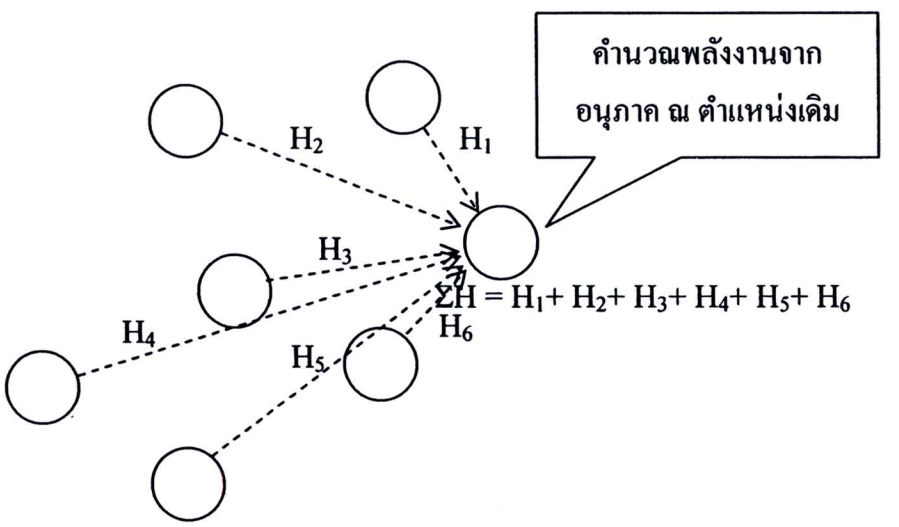
การจำลองสถานการณ์ แบ่งออกเป็น 2 ส่วนคือ การจำลองสถานการณ์การเดินแบบสุ่มของอนุภาค และการจำลองสถานการณ์การกลับทิศสปินของอนุภาค

3.1.1 การจำลองสถานการณ์ของการเดินแบบสุ่มของอนุภาค

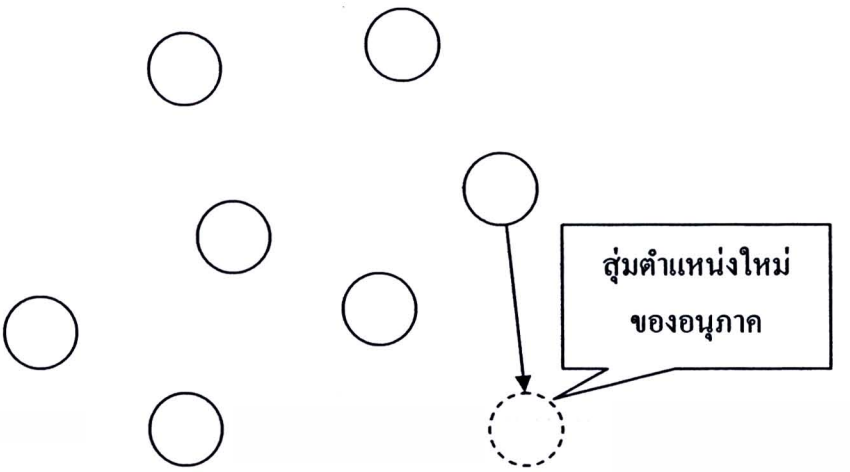
เริ่มต้นด้วยการสุ่มเลือกอนุภาค 1 ตัวในระบบ(แสดงในรูป 3.1) เพื่อคำนวณพลังงาน ณ ตำแหน่งของอนุภาคตัวนั้น(แสดงในรูป 3.2) จากนั้นสุ่มระยะทางและทิศทางของการเปลี่ยนตำแหน่ง(แสดงในรูป 3.3) โดยใช้ระบบพิกัดทรงกลมเพื่อหาตำแหน่งใหม่คำนวณพลังงานในกรณีที่อนุภาคอยู่ ณ ตำแหน่งใหม่(แสดงในรูป 3.4) และคำนวณพลังงานหากอนุภาคย้ายไปอยู่ตำแหน่งใหม่นั้น แล้วนำพลังงานของอนุภาค ณ ตำแหน่งใหม่ลบกับตำแหน่งเดิม(แสดงในรูป 3.5) ในกรณีที่ผลลัพธ์ติดลบให้เปลี่ยนตำแหน่งของอนุภาคมาไว้ตำแหน่งใหม่ หรือในกรณีที่ผลลัพธ์เป็นบวกให้คำนวณความน่าจะเป็นของการย้ายตำแหน่งแล้วนำไปเปรียบเทียบกับเลขสุ่มที่อยู่ในช่วง 0 ถึง 1 ถ้าความน่าจะเป็นที่คำนวณมีค่ามากกว่าเลขสุ่มจึงจะสามารถเปลี่ยนตำแหน่งของอนุภาคได้ แต่ถ้ามีค่าน้อยกว่า อนุภาคต้องอยู่ตำแหน่งเดิม



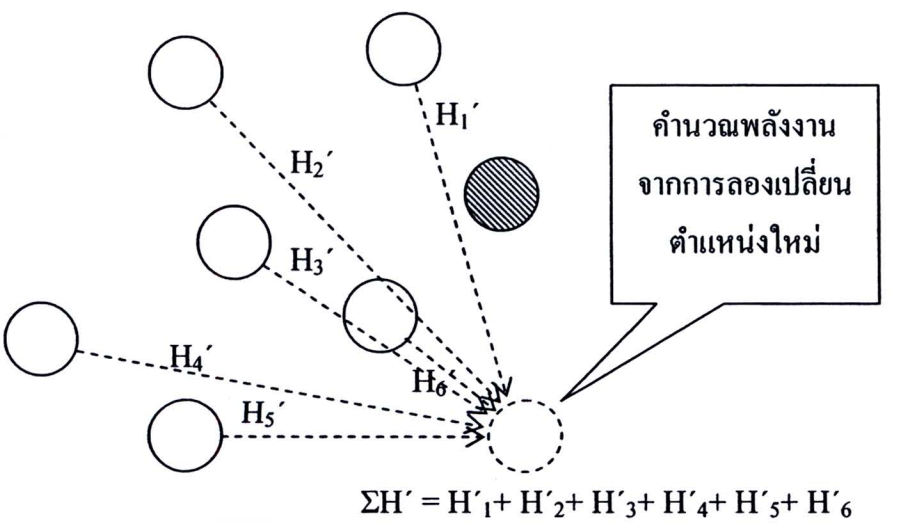
รูป 3.1 แสดงขั้นตอนที่ 1 การสุ่มเลือกอนุภาคเพื่อใช้ในการจำลองสถานการณ์การเดินแบบสุ่ม



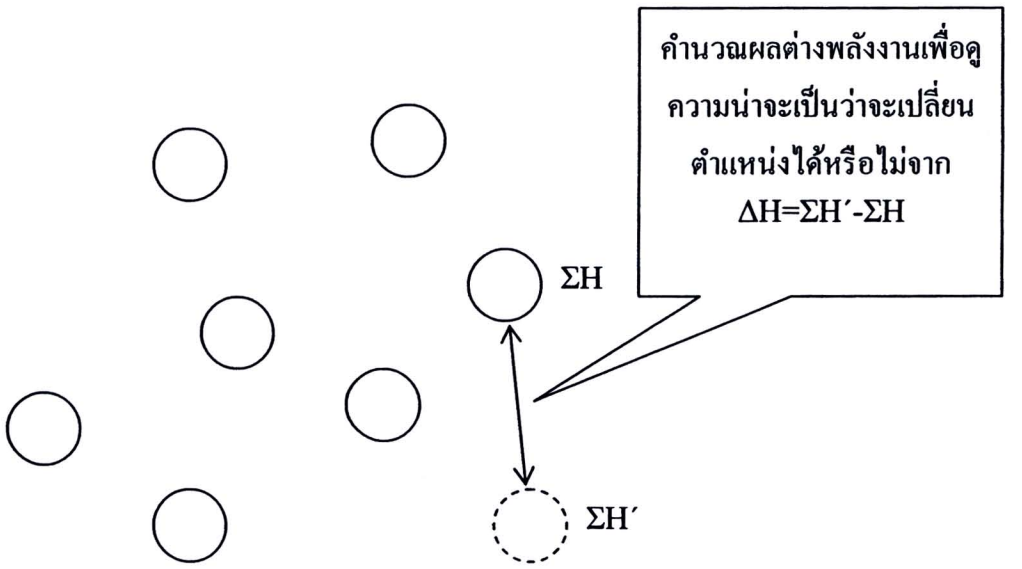
รูป 3.2 แสดงขั้นตอนที่ 2 พิจารณาพลังงานของอนุภาคในตำแหน่งเดิมในการจำลองสถานการณ์การเดินแบบสุ่ม



รูป 3.3 แสดงขั้นตอนที่ 3 การสุ่มตำแหน่งใหม่ของอนุภาคในการจำลองสถานการณ์การเดินแบบสุ่ม



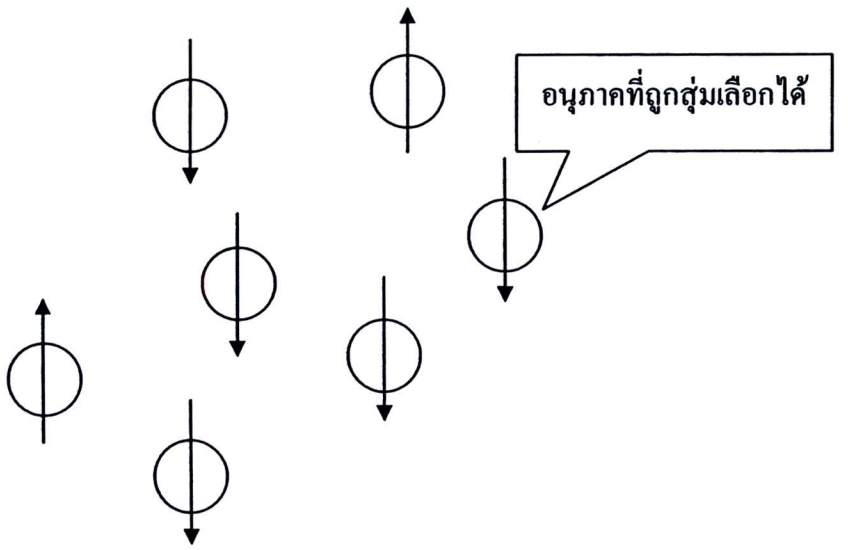
รูป 3.4 แสดงขั้นตอนที่ 4 พิจารณาพลังงานของอนุภาคในตำแหน่งใหม่ในการจำลองสถานการณ์การเดินแบบสุ่ม



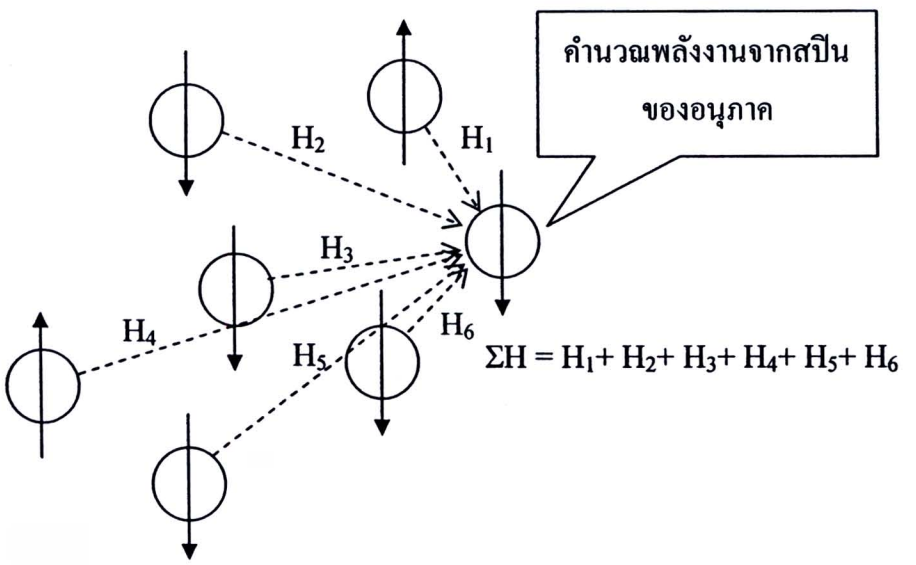
รูป 3.5 แสดงขั้นตอนที่ 5 พิจารณาความน่าจะเป็นของการเปลี่ยนตำแหน่งใหม่ของอนุภาค ในการจำลองสถานการณ์การเดินแบบสุ่ม

3.1.2 การจำลองสถานการณ์ของการกลับสปินของอนุภาค

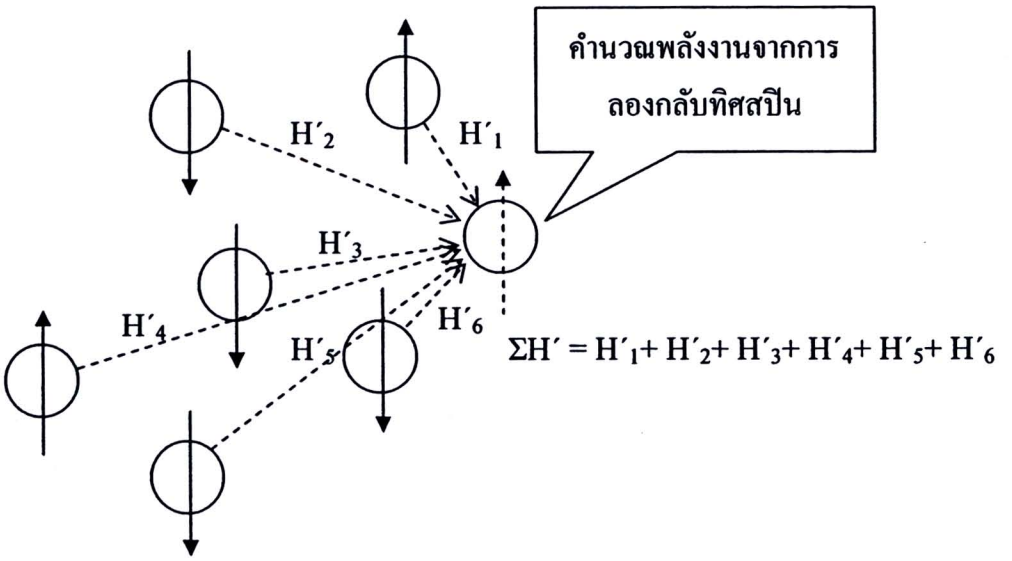
ลักษณะการทำงานจะคล้ายกับการเดินแบบสุ่มแต่เปลี่ยนจากการเปลี่ยนตำแหน่งเป็นการกลับทิศของสปิน โดยเริ่มต้นด้วยการการสุ่มเลือกอนุภาค 1 ตัวในระบบ(แสดงในรูป 3.6) และคำนวณพลังงานของอนุภาคตัวนั้นจากทิศของสปินเดิม(แสดงในรูป 3.7) จากนั้นให้ลองกลับทิศสปินและคำนวณพลังงานในการลองกลับทิศสปิน(แสดงในรูป 3.8) จากนั้นคำนวณพลังงานเมื่อสปินมีการกลับทิศทางลบกับพลังงานเมื่อยังไม่ได้กลับทิศทาง(แสดงในรูป 3.1) ในกรณีที่ผลลัพธ์มีค่าติดลบ ให้กลับทิศสปินได้ หรือในกรณีที่ผลลัพธ์มีค่าเป็นบวก ให้คำนวณความน่าจะเป็นของการย้ายตำแหน่งแล้วนำไปเปรียบเทียบกับเลขสุ่มที่อยู่ในช่วง 0 ถึง 1 ถ้าความน่าจะเป็นที่คำนวณมีค่ามากกว่าเลขสุ่ม จึงจะสามารถกลับทิศสปินได้ แต่ถ้ามีค่าน้อยกว่า สปินจะไม่ถูกกลับทิศ



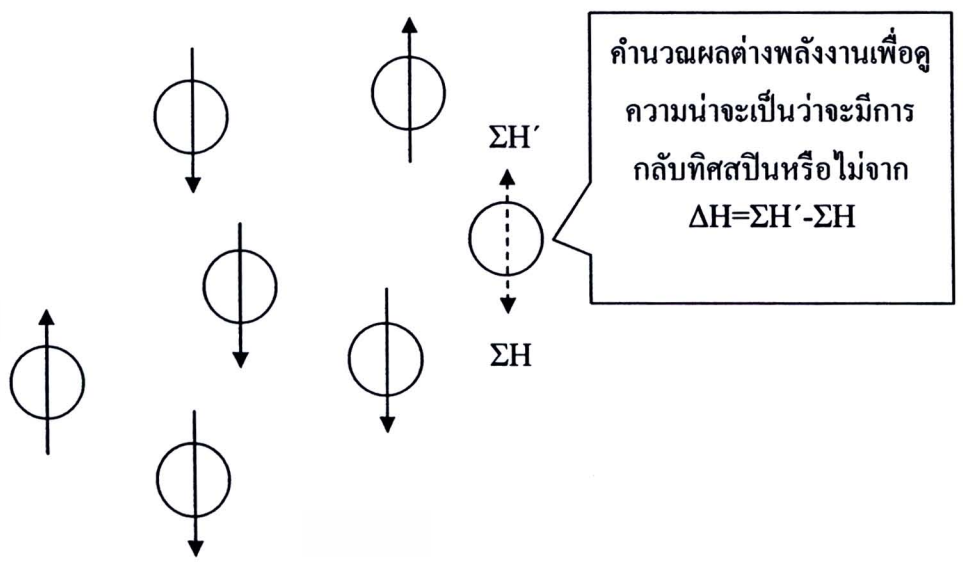
รูป 3.6 แสดงขั้นตอนที่ 1 การสุ่มเลือกสปินของอนุภาคเพื่อใช้ในการจำลองสถานการณ์การกลับทิศสปิน



รูป 3.7 แสดงขั้นตอนที่ 2 พิจารณาพลังงานของสปินตัวอื่นที่มีผลต่อสปินที่ถูกเลือกในการจำลองสถานการณ์กลับทิศสปิน



รูป 3.8 แสดงขั้นตอนที่ 3 พิจารณาพลังงานเมื่อมีการกลับทิศของสปินในการจำลองสถานการณ์การกลับทิศสปิน

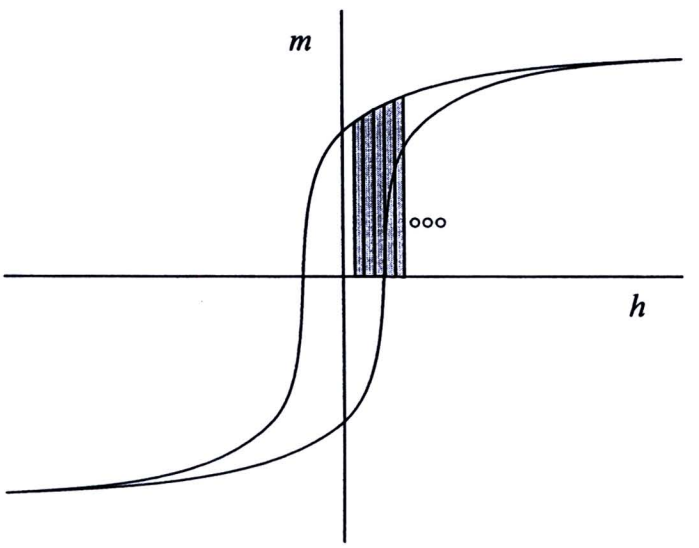


รูป 3.9 แสดงขั้นตอนที่ 4 พิจารณาความน่าจะเป็นในการกลับทิศของสปิน

เนื่องจากในงานวิจัยนี้ไม่ได้คิดผลของเวลาที่มีผลต่อระบบดังนั้น สัดส่วนการจำลองสถานการณ์การเดินแบบสุ่มของอนุภาคกับการจำลองสถานการณ์การกลับทิศสปินของอนุภาคจะเป็น 1:1

3.2 การหาพื้นที่ใต้กราฟของวงรอบฮิสเทอรีซิสที่เกิดจากการเปลี่ยนแปลง

พื้นที่ใต้กราฟของวงรอบฮิสเทอรีซิสบ่งบอกถึงพลังงานที่สูญเสียจากการกลับทิศของสปิน ซึ่งสำหรับระบบอนุภาคแม่เหล็กที่มีการเปลี่ยนแปลงสนามแม่เหล็กภายนอกระบบ พลังงานที่สูญเสียจะอยู่ในรูปของความร้อน ดังนั้นถ้าสามารถควบคุมปริมาณพื้นที่ใต้กราฟของระบบได้ก็จะสามารถคาดคะเนความร้อนที่จะเกิดขึ้นได้ ซึ่งในงานวิจัยนี้ใช้วิธีการคำนวณพื้นที่ใต้กราฟจากการรวมพื้นที่สี่เหลี่ยมคางหมูดังรูป 3.10



รูป 3.10 แสดงการสร้างพื้นที่สี่เหลี่ยมคางหมูเพื่อหาพื้นที่ใต้กราฟของวงรอบฮิสเทอรีซิส

จากรูป 3.10 พื้นที่แรเงาคือพื้นที่สี่เหลี่ยมคางหมูที่ถูกสร้างขึ้นโดยใช้ระยะระหว่างจุดบนวงรอบฮิสเทอรีซิส จากการสร้างสี่เหลี่ยมคางหมูครบทุกจุดบนกราฟและนำพื้นที่มารวมกันจะสามารถหาพื้นที่รวมโดยประมาณของวงรอบฮิสเทอรีซิส ในกรณีที่รูปร่างฮิสเทอรีซิสมีความสมบูรณ์พื้นที่รวมจะมีค่าติดลบ

3.3 การออกแบบผังงานของโปรแกรมการจำลองสถานการณ์ในงานวิจัย

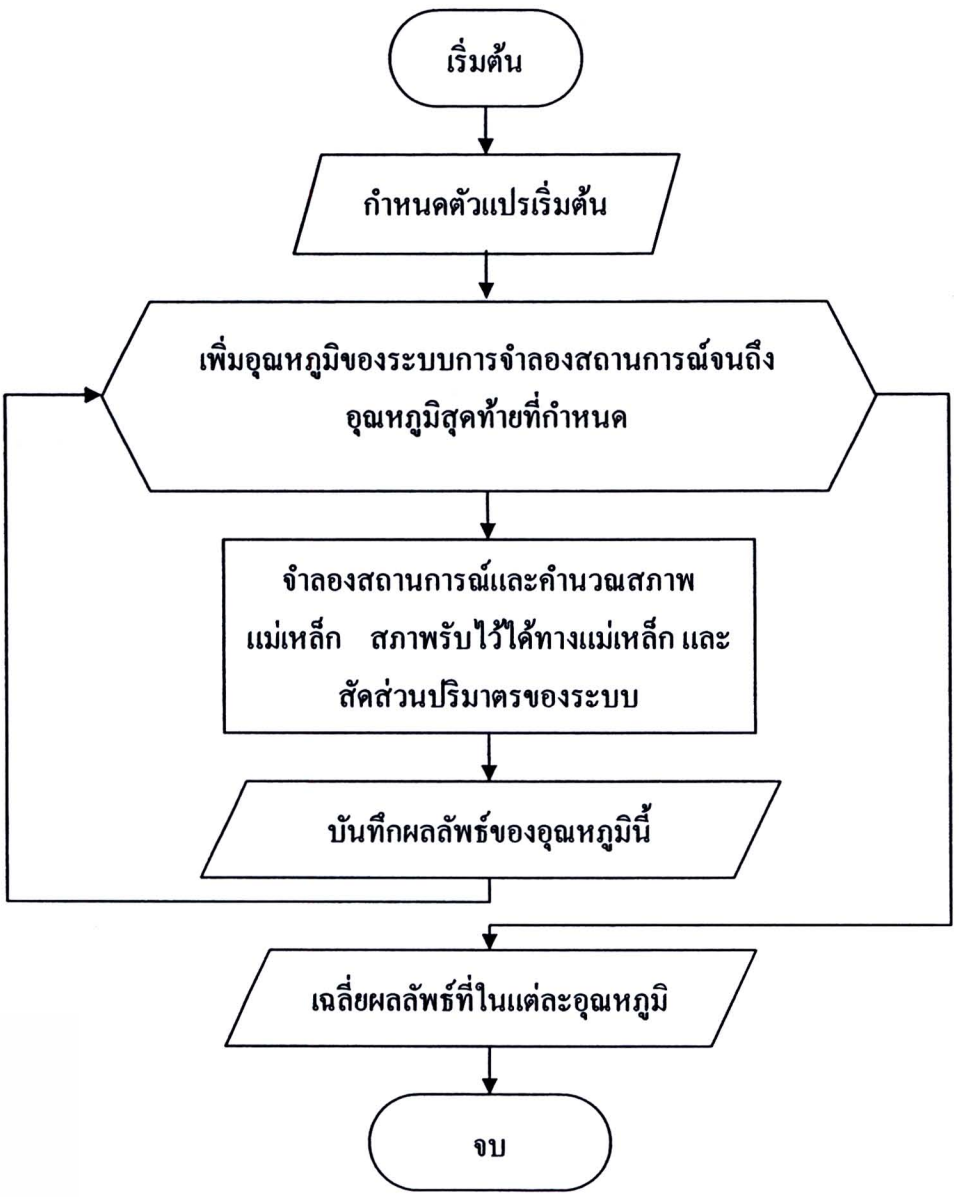
โปรแกรมการจำลองสถานการณ์แบ่งได้เป็นสองรูปแบบคือ การจำลองสถานการณ์การแพร่ของอนุภาคแม่เหล็กที่ไม่มีสนามแม่เหล็กภายนอก และ การจำลองสถานการณ์การแพร่ของอนุภาคแม่เหล็กภายใต้การเปลี่ยนแปลงของสนามแม่เหล็กภายนอก

3.3.1 การจำลองสถานการณ์ที่ไม่มีสนามแม่เหล็กภายนอกมากระทำกับระบบ

เป็นการหาสภาพแม่เหล็ก (Magnetization) สภาพรับไว้ได้ทางแม่เหล็ก (Magnetic susceptibility) และ สัดส่วนปริมาตรของอนุภาคแม่เหล็กที่มีการแพร่ (Volume ratio) และนำไปวิเคราะห์เพื่อหาอุณหภูมิวิกฤต (Critical temperature: T_c) ที่ระบบเปลี่ยนเฟสจาก Ferromagnetic เป็น Paramagnetic ซึ่งมีขั้นตอนการจำลองสถานการณ์ดังแสดงในรูป 3.11ดังนี้

1) กำหนดค่าตัวแปรเริ่มต้นของการจำลองสถานการณ์ ได้แก่ จำนวนอนุภาคในระบบ ค่าสปินของแต่ละอนุภาค ตำแหน่งเริ่มต้นของอนุภาค เวลาในการจำลองสถานการณ์และอุณหภูมิ
2) ทำการจำลองสถานการณ์โดยเพิ่มอุณหภูมิขึ้นเรื่อยๆ บันทึกและประมวลผลที่ได้จากการจำลองสถานการณ์ ได้แก่ สภาพแม่เหล็ก สภาพรับไว้ได้ทางแม่เหล็ก และ สัดส่วนปริมาตร
3) เมื่อทำการจำลองสถานการณ์จนครบตามเวลาในการจำลองสถานการณ์ และอุณหภูมิเพิ่มจนถึงระดับที่กำหนดแล้วให้ทำการจำลองซ้ำอีก 20 ครั้ง เพื่อหาค่าเฉลี่ย
4) จากนั้นเพิ่มจำนวนอนุภาคในระบบแล้วทำข้อ 2 และ 3 อีกครั้ง

สิ่งที่ได้คือความสัมพันธ์ของ สภาพแม่เหล็ก สภาพรับไว้ได้ทางแม่เหล็ก และ สัดส่วนปริมาตร เทียบกับเวลาและนำไปหาอุณหภูมิวิกฤต (T_c) ซึ่งทำให้คาดคะเนระบบที่มีอนุภาคมากขึ้นได้ รวมทั้งสามารถคาดคะเนสมบัติทางแม่เหล็กของระบบได้



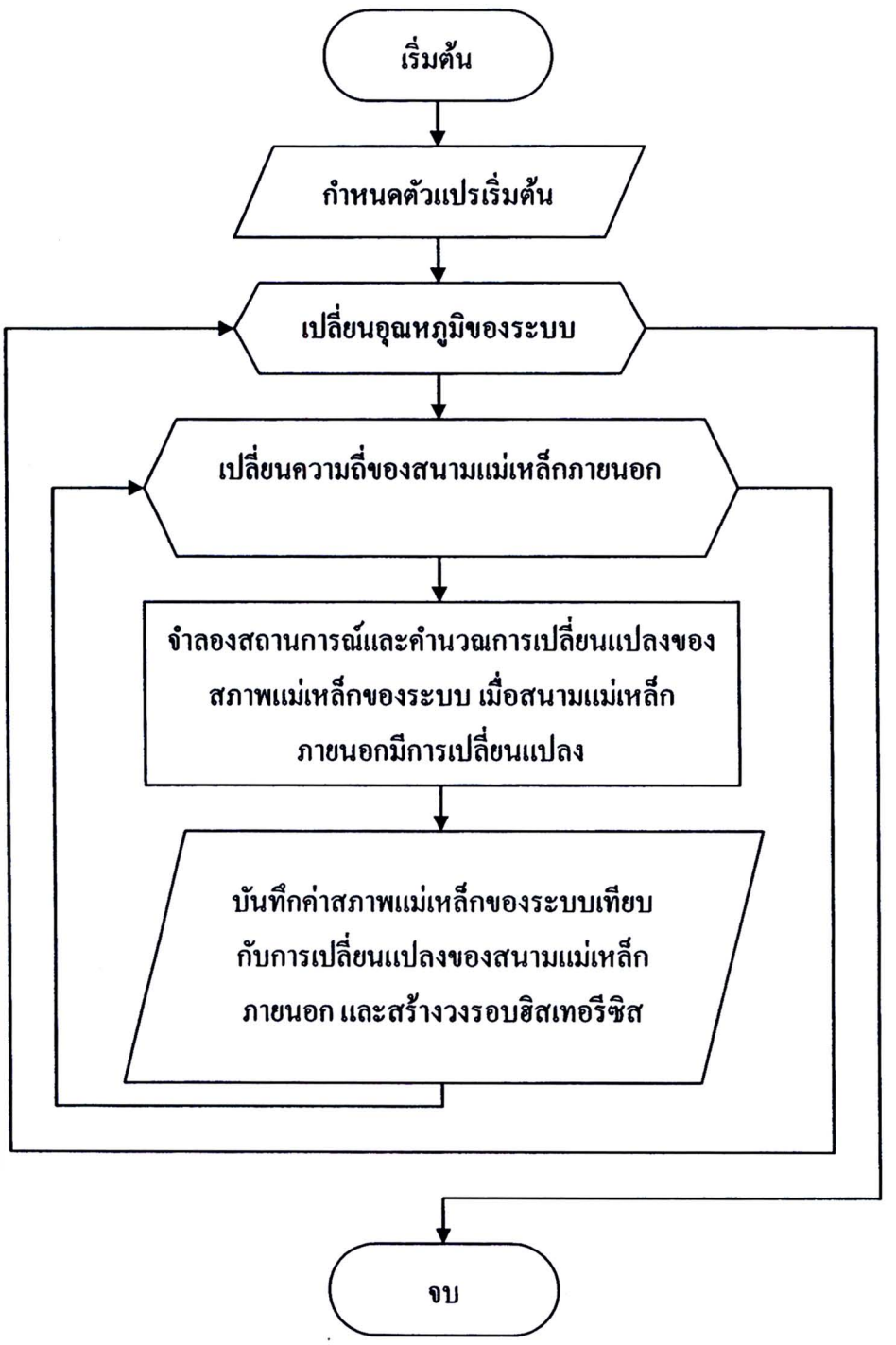
รูป 3.11 แสดงผังงานการจำลองสถานการณ์ที่ไม่มีสนามแม่เหล็กภายนอกมา
กระทำต่อระบบ

3.3.2 การจำลองสถานการณ์ที่มีการเปลี่ยนแปลงของสนามแม่เหล็กภายนอกระบบ

เป็นการหาความสัมพันธ์ของการเปลี่ยนแปลงของสภาพแม่เหล็กของระบบเทียบกับการเปลี่ยนแปลงสนามแม่เหล็กภายนอก โดยศึกษาวงรอบฮิสเทอรีซิสที่เกิดขึ้น การเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิและความถี่ของสนามแม่เหล็กภายนอก การจำลองสถานการณ์มีขั้นตอนดังแสดงในรูป 3.12 ดังนี้

1) กำหนดค่าตัวแปรเริ่มต้นของการจำลองสถานการณ์ ได้แก่ จำนวนอนุภาคในระบบ ค่าสปินของแต่ละอนุภาค จำนวนวงรอบฮิสเทอรีซิสที่ต้องการนำมาเฉลี่ย ความถี่ของสนามแม่เหล็กภายนอก และ อุณหภูมิ
2) ทำการจำลองสถานการณ์ บันทึกค่าการเปลี่ยนแปลงสนามแม่เหล็กภายนอก และ สภาพแม่เหล็กของระบบเพื่อสร้างวงรอบฮิสเทอรีซิสจนครบตามจำนวนที่ต้องการและนำมาหาค่าเฉลี่ย
3) จากนั้นเปลี่ยนค่าความถี่ของสนามแม่เหล็กภายนอกและอุณหภูมิที่ให้แก่ระบบ แล้วทำข้อ 2 ซ้ำอีกครั้ง

สิ่งที่ได้จากการจำลองสถานการณ์คือวงรอบฮิสเทอรีซิสของสภาพแม่เหล็กของระบบกับการเปลี่ยนแปลงสนามแม่เหล็กภายนอก บนเงื่อนไขของอุณหภูมิที่ต่ำกว่า ใกล้เคียง และสูงกว่าอุณหภูมิวิกฤตที่ได้จากการจำลองสถานการณ์ในตอนแรก และเงื่อนไขของความถี่สูง กลาง และต่ำ



รูป 3.12 แสดงผังงานการจำลองสถานการณ์ที่มีสนามแม่เหล็กภายนอกมากระทำต่อระบบ

3.4 การเขียนโปรแกรมการจำลองสถานการณ์

การสร้างโปรแกรมการจำลองสถานการณ์ได้ใช้โปรแกรม Visual Basic 6.0 โปรแกรมดังกล่าวประกอบด้วยโมดูลการทำงานหลายโมดูล เพื่อให้การจำลองสถานการณ์ออกมาอย่างถูกต้อง โดยมีตัวอย่างโมดูลที่สำคัญดังนี้

3.4.1 โมดูลการสร้างประเภทของข้อมูลที่ใช้ในการเก็บคุณสมบัติของอนุภาค

```
Private Type IsingParticle ' new type that keep coordinate (x,y,z), radius,
spin
    X As Double 'X-axis Position
    Y As Double 'Y-axis Position
    Z As Double 'Z-axis Position
    Rad As Double
    S As Integer 'Spin Properties
End Type
```

เป็นการประกาศประเภทของ object ใหม่ที่ใช้ในการเก็บค่าของสถานะของอนุภาคทุกตัวในระบบมีคุณสมบัติเป็นของตัวเองโดยเก็บตำแหน่งบนพิกัด (x,y,z),สถานะของสปิน และการกระจัดของตำแหน่งอนุภาคเทียบกับจุดศูนย์กลางของบริเวณที่อนุภาคเคลื่อนที่โดยมีคุณสมบัติของ object ดังนี้

1) X : เก็บข้อมูลตำแหน่งบนแกน x ของระบบพิกัดฉากเป็นจำนวนจริงใดๆ
2) Y : เก็บข้อมูลตำแหน่งบนแกน y ของระบบพิกัดฉากเป็นจำนวนจริงใดๆ
3) Z : เก็บข้อมูลตำแหน่งบนแกน z ของระบบพิกัดฉากเป็นจำนวนจริงใดๆ
4) Rad : เก็บข้อมูลการกระจัดเทียบจุดศูนย์กลางมวลเป็นจำนวนจริงใดๆ
5) S : เก็บข้อมูลสปิน +1 หรือ -1 เป็นจำนวนเต็ม

3.4.2 โมดูลการสร้างอนุภาค

```
Function CreateObject
    Dim Obj(30) As IsingParticle
    N=30
    For i = 1 To N
        r = Rnd * 1                    ' random radius of position
        zeta = Rnd * zeta_Max          ' random θ angle of position
        phi = Rnd * phi_Max            ' random ϕ angle of position
        Obj(i).X = (r * cos(phi) * sin(zeta))
        Obj(i).Y = (r * sin(phi) * sin(zeta))
        Obj(i).Z = (r * cos(zeta))
        Obj(i).Rad = r
        Obj(i).S = 1
    Next i
End Function
```

เป็นฟังก์ชันการสร้างอนุภาคจำนวน N ตัว และกำหนดค่าเริ่มต้นให้กับระบบด้วยการสุ่มโดยใช้ Rnd ซึ่งเป็นคำสั่งสุ่มตัวเลขในช่วง [0,1) ของการสุ่ม อนุภาคแต่ละตัวจะมีชื่อว่า Obj ตามหลังด้วยวงเล็บซึ่งบ่งบอกว่าเป็นตัวที่เท่าไร และจากฟังก์ชันดังกล่าว N ถูกกำหนดให้เท่ากับ 30 นั้นคืออนุภาคจะถูกสร้างขึ้น 30 ตัวโดย FOR LOOP ในแต่ละรอบ ค่าของพิกัดเชิงขั้ว (r,θ,ϕ) จะถูกสุ่มและแปลงเป็นพิกัดเชิงขั้วจากความสัมพันธ์ $x = r\sin\phi\cos\theta$, $y = r\sin\phi\sin\theta$ และ $z = r\cos\phi$ ละบันทึกเป็นข้อมูลของอนุภาคตัวนั้น จากนั้นกำหนดค่าสถานะของสปินเท่ากับ 1 และออกรอบไปเพื่อเข้ารอบใหม่และกำหนดคุณสมบัติให้อนุภาคตัวต่อไป

3.4.3 โมดูลการคำนวณศักย์ยูคาวา

```
Function YK_Potential(rij As Double, Sigma_YK As Double, K As
Double) As Double
    If rij < Sigma_YK Then
        YK_Potential = 1E+300
    Exit Function
    End If
    YK_Potential = (-K * (Sigma_YK / rij) ^ 12) * Exp(-1 * (rij -
    Sigma_YK) _ / Sigma_YK)
End Function
```

เป็นฟังก์ชันเรียกการคำนวณศักย์ยูคาวาซึ่งขึ้นกับระยะห่างระหว่างอนุภาค โดยค่าที่รับเข้ามาในฟังก์ชันได้แก่

1) rij : ระยะห่างระหว่างอนุภาคตัวที่ *i* กับตัวที่ *j*
2) Sigma_YK : ระยะห่างน้อยที่สุดเท่าที่อนุภาคจะอยู่ห่างกันได้ (Cut-off length) ซึ่งกำหนดให้มีค่าเท่ากับ 1
3) K : ค่าคงที่พลังงานของศักย์ยูคาวาซึ่งกำหนดให้มีค่าเท่ากับ 1

ผลการคำนวณจะถูกส่งคืนให้กับฟังก์ชันเป็นศักย์ของยูคาวา ซึ่งเหมือนกับผลลัพธ์ที่ได้จากการคำนวณในสมการที่ (14)

3.4.4 โมดูลการจำลองสถานการณ์การเดินแบบสุ่ม

```
Function RandomWalk()
  Randomize
  Dim i As Integer, j As Integer
  Dim DeltaE_Walk As Double
  i = Int(Rnd * N) + 1
  r = Rnd * r_Max
  zeta = Rnd * zeta_Max
  phi = Rnd * phi_Max
  Temp.X = Obj(i).X + (r * Cos(phi) * Sin(zeta))
  Temp.Y = Obj(i).Y + (r * Sin(phi) * Sin(zeta))
  Temp.Z = Obj(i).Z + (r * Cos(zeta))

 '(Find Delta Energy) : คำนวณผลต่างพลังงาน DeltaE_Walk

  If DeltaE_Walk < 0 Then
    UpdatePosition i '-->[Function]
  Else
    If Rnd < Exp(-1 * DeltaE_Walk / kT) Then
      UpdatePosition i '-->[Function]
    End If
  End If
End Function
```

เป็นฟังก์ชันเพื่อการจำลองสถานการณ์การเดินแบบสุ่ม 1 ก้าวเท่า โดยอนุภาคตัวที่ i จะถูกสุ่มขึ้นและดูความน่าจะเป็นที่จะมีการเดินเกิดขึ้นหรือไม่จากการคำนวณพลังงานในฟังก์ชันนี้ โดยการสุ่มตำแหน่งใหม่จากพิกัดเชิงขั้ว (r,θ,ϕ) และแปลงเป็นพิกัดฉากอีกครั้งเก็บเป็นข้อมูลของอนุภาคสมมติจะได้ตำแหน่งของอนุภาคสมมติคือ (Temp.X, Temp.Y, Temp.Z) นำตำแหน่งของอนุภาคชั่วคราว ไปหาผลต่างพลังงานออกมาเป็น DeltaE_Walk ซึ่งถ้าผลต่างพลังงานมีค่าน้อยกว่า 0 หรือถ้ามีค่ามากกว่า 0 แต่น้อยกว่าเอ็กโพเนนเชียนของผลลบของผลต่างพลังงานหารด้วยอุณหภูมิ อนุภาคจะถูกเปลี่ยนตำแหน่งไปที่อนุภาคสมมตินั้น หรือรับเอาข้อมูลตำแหน่งของอนุภาคสมมติมาเก็บไว้ที่ตัวเองนั่นเอง

3.4.5 โมดูลการหาผลต่างพลังงาน

```
'==Find Delta Energy==
Delta_E = 0
  For j = 1 To N
    If i <> j Then
      Delta_E = Delta_E
      + YK_Potential(Sqr((Temp.X - Obj(j).X) ^ 2 + (Temp.Y - Obj(j).Y) ^ 2
      + (Temp.Z - Obj(j).Z) ^ 2), Sigma, K) - YK_Potential(Sqr((Obj(i).X
      - Obj(j).X) ^ 2 + (Obj(i).Y - Obj(j).Y) ^ 2 + (Obj(i).Z - Obj(j).Z) ^ 2),
      Sigma, K)
    End If
  Next j
```

จากฟังก์ชันเพื่อการจำลองสถานการณ์การเดินแบบสุ่มข้างต้น จะอธิบายถึงการทำงานของการหาผลต่างพลังงาน โดยการคำนวณพลังงานซึ่งขึ้นอยู่กับระยะห่างของอนุภาคตัวที่ *i* กับอนุภาคตัวอื่นๆในระบบ และพลังงานซึ่งขึ้นกับระยะทางของอนุภาคสมมติกับอนุภาคอื่นในระบบยกเว้นอนุภาคตัวที่ *i* โดยใช้ฟังก์ชันของยูคาวา และนำพลังงานที่คำนวณได้มาลบกัน โดยเอาพลังงานของอนุภาคสมมติลบกับพลังงานของอนุภาคตัวที่ *i* จะได้ผลต่างพลังงานออกมา

3.4.6 โมดูลการจำลองสถานการณ์การกลับทิศของสปิน

```
Function SpinFlip()
  Randomize
  Dim i As Integer, j As Integer
  Dim DeltaE_Flip As Double, PotentialFlip As Double
  i = Int(Rnd * N) + 1
  '== Metropolis Method ===
  DeltaE_Flip = 0
'(Find Delta Energy) : คำนวณผลต่างพลังงาน DeltaE_Flip
  '== Update Spin =====
  If DeltaE_Flip < 0 Then
    Obj(i).S = -1 * Obj(i).S
  Else
    If Rnd < Exp(-1 * DeltaE_Flip / kT) Then
      Obj(i).S = -1 * Obj(i).S
    End If
  End If
End Function
```

เป็นฟังก์ชันเพื่อการจำลองสถานการณ์การกลับทิศของสปิน 1 ครั้ง โดยอนุภาคตัวที่ *i* จะถูกสุ่มขึ้นเพื่อหาความน่าจะเป็นของการกลับทิศของสปิน หลักการทำงานคล้ายกับการจำลองสถานการณ์การเดินแบบสุ่ม เพียงแต่อนุภาคสมมติ จะเป็นอนุภาคที่มีสถานะของสปินตรงข้ามกับสถานะสปินของอนุภาคตัวที่ *i* และพลังงานเนื่องจากระยะห่างของอนุภาคจะมีพจน์ของพลังงานของการเหนี่ยวนำระหว่างสปินเพิ่มเข้ามา และหากมีสนามแม่เหล็กภายนอกก็จะมีพจน์ของการเหนี่ยวนำของสนามแม่เหล็กภายนอกเพิ่มเข้าไปอีก จากนั้นคำนวณผลต่างพลังงานของอนุภาคสมมติกับอนุภาคตัวที่ *i* ออกมาเป็น DeltaE_Flip ซึ่งถ้าผลต่างพลังงานมีค่าน้อยกว่า 0 หรือถ้ามีค่ามากกว่า 0 แต่น้อยกว่าเอ็กโพเนนเชียนของผลลบของผลต่างพลังงานหารด้วยอุณหภูมิ อนุภาคจะมีสถานะของสปินเหมือนอนุภาคสมมตินั้น หรือรับเอาข้อมูลสถานะสปินของอนุภาคสมมติมาเก็บไว้ที่ตัวเองนั่นเอง

3.4.7 โมดูลการคำนวณคุณสมบัติทางแม่เหล็ก และสัดส่วนปริมาตร

```
Function TimeRun(i As Integer, RunType As String)
  Dim j As Integer
  SubMCS = SubMCS + 1
  If SubMCS = N Then
    MCS = MCS + 1
    SubMCS = 0
  End If
    If SubMCS = 0 Then
      M = 0
      SD = 0
      For j = 1 To N
        M = M + Obj(j).S
        SD = SD + (Obj(j).Rad - r_Avg) ^ 2
      Next j
      SD = Sqr(SD / N)
      '== Analysis result ==
      M = M / N
      M_Abs = M_Abs + Abs(M)
      M_Sqr = M_Sqr + (M ^ 2)
      M_Expect = M_Expect + M
      SD_Volume = SD_Volume + (4 / 3) * pi * (SD ^ 3)
      '================
    End If
  End If
End Function
```

เป็นฟังก์ชันในการนับเวลาในการจำลองสถานการณ์และคำนวณผลลัพธ์ต่างๆตามเงื่อนไขการจำลองสถานการณ์ เมื่อการจำลองสถานการณ์มีการปรับปรุงเป็นจำนวนเท่ากับจำนวนอนุภาคในระบบ(ปรับปรุง N ครั้ง) เวลาในการจำลองสถานการณ์จะนับเป็น 1 MCS และเมื่อเวลาถูกนับ 1 MCS คุณสมบัติของระบบจะถูกวิเคราะห์ดังต่อไปนี้

1) M : เก็บค่าการวิเคราะห์ของสภาพแม่เหล็ก(Magnetization)ของระบบ โดยการรวมค่าสถานะสปินทั้งหมดทุกอนุภาคแล้วหารด้วยจำนวนอนุภาคทั้งหมด และนำไปคำนวณค่าของ $|M|$, M^2 และ $\langle M \rangle$ เพื่อใช้หาสภาพรับไว้ได้ทางแม่เหล็ก

2) SD : เก็บค่าการวิเคราะห์ของส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน (Standard deviation : S.D.) ของการกระจัดของแต่ละอนุภาคเทียบกับจุดศูนย์กลางมวล และนำไปคำนวณปริมาตรของระบบโดยใช้สมการที่ (13)

3.4.8 โมดูลการจำลองสถานการณ์โดยรวม

```
Function Simulation()
  Do Until CheckStop = True
    RandomWalk                          ' การจำลองสถานการณ์เดินแบบสุ่ม
    If MCS >= MCS_Max Then Exit Do
    SpinFlip                            ' การจำลองสถานการณ์การกลับทิศสปิน
    If MCS >= MCS_Max Then Exit Do
  Loop
  M_Abs = M_Abs / MCS_Max
  M_Sqr = M_Sqr / MCS_Max
  '== Result of Analize =======
  M_Suscept = (N / kT) * (M_Sqr - (M_Abs ^ 2))
  M_Expect = M_Expect / MCS_Max
  SD_Volume = SD_Volume / MCS_Max
End Function
```

เพื่อการจำลองสถานการณ์บนเงื่อนไขของอุณหภูมิและความถี่ของสนามแม่เหล็กภายนอกที่กำหนด โดยรวมการจำลองสถานการณ์การเดินแบบสุ่มและการกลับทิศสปินเข้าด้วยกัน การจำลองสถานการณ์กระทำภายใน DO LOOP UNTIL ซึ่งจะเห็นว่าเป็นลักษณะของการเดินแบบสุ่มก่อนแล้วตามด้วยการกลับทิศของสปิน ดังนั้นจำนวนครั้งของการเดินแบบสุ่มกับการกลับทิศสปินจึงเท่ากันมีอัตราส่วนเป็น 1:1 เมื่อเสร็จสิ้นการจำลองสถานการณ์บนเงื่อนไขของอุณหภูมิและความถี่ของสนามแม่เหล็กภายนอกที่กำหนด จะได้ผลลัพธ์จากการจำลองสถานการณ์คือ

1) M_Suscept : สภาพรับไว้ได้ทางแม่เหล็กของระบบ
2) M_Expect : สภาพแม่เหล็กของระบบ
3) SD_Volume : ปริมาตรของระบบ

3.4.9 โมดูลการทดลองโดยกำหนดเงื่อนไขทั้งหมด

```
Function Experiment()
    '== Experiment Setting===
    AnimationStop = False
    loopnum = 500
    CheckStop = False
    PrepareParameter
    '== Simulation ==
      For LoopDot = 1 To 100
        HM(LoopDot, SimuTime).H_field = 0
        HM(LoopDot, SimuTime).M_field = 0
      Next LoopDot
      '(Temperature and Frequency Setting)
      loopcount = 0
      IgnoreAnalyze = True
      MCS_Max = MCS_Max * 50
      Simulation ' (Discard)
      Simulation ' (Analyze)
End Function
```

เป็นฟังก์ชันในการจัดการจำลองสถานการณ์ในหลายๆเงื่อนไข โดยการกำหนดเงื่อนไขของอุณหภูมิ และความถี่หลายๆแบบ และในฟังก์ชัน PrepareParameter ก็จะเป็นการกำหนดค่าตัวแปรที่เกี่ยวข้องอื่นๆ เช่นระยะการเดินสูงสุด, แอมปลิจูดของความถี่, เวลาในการจำลองสถานการณ์ เป็นต้น และเรียกฟังก์ชัน Simulation 2 ครั้งโดยครั้งแรกเป็นการจำลองสถานการณ์ทิ้งเพื่อให้ระบบวิวัฒน์เข้าสู่สถานะพื้น และครั้งที่สองจึงเป็นการจำลองสถานการณ์เพื่อวิเคราะห์ผล

ในส่วนของ Temperature and Frequency Setting กรณีที่ไม่มีสนามแม่เหล็กภายนอกมากระทำกับระบบ นั่นคือค่าของความถี่สนามแม่เหล็กภายนอกเป็นศูนย์การจำลองสถานการณ์จะกำหนดเฉพาะเงื่อนไขของอุณหภูมิโดยเพิ่มอุณหภูมิทีละน้อยเพื่อวิเคราะห์สมบัติของระบบ

ในกรณีที่ทำการจำลองสถานการณ์เพื่อสร้างวงรอบฮิสเทอรีซิสส่วนของการกำหนดอุณหภูมิและความถี่จะแบ่งออกเป็น 9 แบบ คือ

1) ความถี่ของสนามแม่เหล็กภายนอกเท่ากับ 0.002 MCS^{-1} และ 0.01 อุณหภูมิเท่ากับ K/k_B
2) ความถี่ของสนามแม่เหล็กภายนอกเท่ากับ 0.002 MCS^{-1} และ 0.25 อุณหภูมิเท่ากับ K/k_B
3) ความถี่ของสนามแม่เหล็กภายนอกเท่ากับ 0.002 MCS^{-1} และ 0.60 อุณหภูมิเท่ากับ K/k_B
4) ความถี่ของสนามแม่เหล็กภายนอกเท่ากับ 0.02 MCS^{-1} และ 0.01 อุณหภูมิเท่ากับ K/k_B
5) ความถี่ของสนามแม่เหล็กภายนอกเท่ากับ 0.02 MCS^{-1} และ 0.25 อุณหภูมิเท่ากับ K/k_B
6) ความถี่ของสนามแม่เหล็กภายนอกเท่ากับ 0.02 MCS^{-1} และ 0.60 อุณหภูมิเท่ากับ K/k_B
7) ความถี่ของสนามแม่เหล็กภายนอกเท่ากับ 0.2 MCS^{-1} และ 0.01 อุณหภูมิเท่ากับ K/k_B
8) ความถี่ของสนามแม่เหล็กภายนอกเท่ากับ 0.2 MCS^{-1} และ 0.25 อุณหภูมิเท่ากับ K/k_B
9) ความถี่ของสนามแม่เหล็กภายนอกเท่ากับ 0.2 MCS^{-1} และ 0.60 อุณหภูมิเท่ากับ K/k_B

3.4.10 โมดูลการสร้างกราฟฮิสเทอรีซิส

```
'== Hysteresis loop =====
If (((SubMCS + 1) / 2) Mod CInt(N / (f * 100)) = 0) Then
   M_Old = M
   M = 0
   For j = 1 To N
      M = M + Obj(j).S
   Next j
   M = M / N
   h_Old = h
   h = h0 * Sin(2 * pi * f * dt)
   If LoopDot = 1 Then
      loopcount = loopcount + 1
      If loopcount > 2 And h <> hCheck Then
         MsgBox "h is not the same"
         Exit Function
      End If
      hCheck = h
   End If
   LoopDot = LoopDot + 1
         HM(LoopDot, SimuTime).H_field = HM(LoopDot,
         SimuTime).H_field + h
         HM(LoopDot, SimuTime).M_field = HM(LoopDot,
         SimuTime).M_field + M
   End If
   dt = LoopDot * (1 / (100 * f))
   If LoopDot = 100 Then LoopDot = 0
End If
```

เป็นโมดูลที่สร้างคู่อันดับของสภาพแม่เหล็ก (M) กับสนามแม่เหล็กภายนอก (h) ที่มีการเปลี่ยนแปลงตามความถี่ และนำมาเขียนเป็นกราฟความสัมพันธ์ของสภาพแม่เหล็ก กับสนามแม่เหล็กภายนอก ซึ่งจะออกมาในรูปแบบวงรอบฮิสเทอรีซิส ค่าของสภาพแม่เหล็ก กับสนามแม่เหล็กภายนอกจะถูกเก็บไว้ในอาเรย์ HM(,) เพื่อนำไปหาวงรอบฮิสเทอรีซิสเฉลี่ยอีกทีนึง

3.5 การทดลองโดยการจำลองสถานการณ์ภายใต้เงื่อนไขต่างๆ

ก่อนเริ่มต้นการจำลองสถานการณ์ อนุภาคแม่เหล็กจะถูกสุ่มตำแหน่งเริ่มต้นโดย การสุ่มจุดภายในวงกลมรัศมี (r) เท่ากับ 1 หน่วยโดยใช้พิกัดทรงกลม (r,θ,ϕ) และสปินของอนุภาคถูกกำหนดให้มีค่าเท่ากับ 1 ทั้งหมด จากสมการ (17) ศักย์ของยูคาวาหน่วยของค่าคงที่ของพลังงาน (K=1) และค่าคงที่ของ Boltzmann (k_B) จะถูกยุบรวมเข้ากับหน่วยของอุณหภูมิ T ดังนั้นหน่วยของอุณหภูมิในงานวิจัยนี้จะเป็น K/k_B และ หน่วยของระยะห่างน้อยสุดของอนุภาค (σ =1) จะถูกยุบรวมกับหน่วยของระยะห่าง (r) การจำลองสถานการณ์แบ่งออกเป็นสองส่วนคือการจำลองสถานการณ์ของการเดินแบบสุ่มเพื่อสร้างสถานการณ์การแพร่และการจำลองสถานการณ์ของการกลับทิศสปินของอนุภาค

โปรแกรมการทดลองจะแบ่งเป็นการจำลองสถานการณ์สองโปรแกรมคือ โปรแกรมการจำลองสถานการณ์ที่ไม่มีสนามแม่เหล็กภายนอกซึ่งจะทดลองที่ระบบมีจำนวนอนุภาคเท่ากับ 10, 15, 20, 25 และ 30 ตัวตามลำดับ และโปรแกรมการจำลองสถานการณ์ที่มีสนามแม่เหล็กภายนอกโดยมีจำนวนอนุภาคในระบบเท่ากับ 20 ตัวเท่านั้น การทดลองของแต่ละโปรแกรมมีดังนี้

3.5.1 การทดลองจำลองสถานการณ์ที่ไม่มีสนามแม่เหล็กภายนอกมากระทำกับระบบ

หลังจากระบบอนุภาคถูกสร้างขึ้น จะจำลองสถานการณ์โดยลดอุณหภูมิจาก 0.10 K/k_B ถึง 0.02 K/k_B โดยลดลงทีละ 0.02 K/k_B การจำลองสถานการณ์ในการลดอุณหภูมิแต่ละครั้งที่ลดอุณหภูมิลง 0.02 K/k_B ใช้เวลา 5000 MCS เพื่อให้อนุภาคของระบบเรียงชิดกันมากที่สุด จากนั้นลดอุณหภูมิลงเหลือ 0.001 K/k_B เพื่อจำลองสถานการณ์ที่ระบบมีพลังงานต่ำมากๆ โดยจำลองสถานการณ์ทิ้งไป 10,000 MCS เพื่อ ให้ระบบเข้าสู่สถานะพื้น และจำลองสถานการณ์ต่ออีก 5000 MCS โดยคำนวณสภาพแม่เหล็ก สภาพรับไว้ได้ทางแม่เหล็กและสัดส่วนปริมาตรของอนุภาคแก๊สสปินปริมาตร โดยปริมาตรที่อุณหภูมิ 0.001 K/k_B นี้จะใช้เป็นปริมาตรอ้างอิงเพื่อหาสัดส่วนปริมาตรที่อุณหภูมิอื่นๆ เมื่อการจำลองสถานการณ์ที่อุณหภูมิ 0.001 K/k_B สิ้นสุด ตำแหน่งสุดท้ายของอนุภาคแต่ละตัวจะถูกบันทึกไว้เป็นตำแหน่งเริ่มต้นของการจำลองสถานการณ์ของอุณหภูมิอื่นๆ

หลังจากนั้นจึงจำลองสถานการณ์ในช่วง 0.05 K/k_B ถึง 0.40 K/k_B เพิ่มอุณหภูมิทีละ 0.005 K/k_B แต่ละครั้งของการเพิ่มอุณหภูมิจะมีการจำลองสถานการณ์ทิ้ง 2,000 MCS และจำลองสถานการณ์อีก 5,000 MCS เพื่อบันทึกคุณสมบัติทางแม่เหล็กและคำนวณสัดส่วนปริมาตร ณ อุณหภูมินั้น โดยสัดส่วนปริมาตรคำนวณได้จากอัตราส่วนของปริมาตรอ้างอิงที่ 0.001 K/k_B และปริมาตรที่คำนวณได้ที่อุณหภูมินั้นๆ ($V_{T=0.001}/V_{any\ T}$) ผลลัพธ์ที่ได้เมื่อการจำลองสถานการณ์

ทั้งหมดเสร็จสิ้นคือ ค่าของสภาพแม่เหล็ก, สภาพรับไว้ได้ทางแม่เหล็ก, และสัดส่วนปริมาตรในช่วงอุณหภูมิ 0.05 K/k_B ถึง 0.40 K/k_B จากนั้นทำการจำลองสถานการณ์ทั้งหมดซ้ำอีก 20 ครั้งเพื่อหาค่าเฉลี่ยของผลลัพธ์ และนำผลลัพธ์เฉลี่ยที่ได้มาเขียนกราฟความสัมพันธ์ของ ผลลัพธ์กับอุณหภูมิ

3.5.2 การทดลองจำลองสถานการณ์ที่มีการเปลี่ยนแปลงสนามแม่เหล็กภายนอกระบบ

โปรแกรมถูกกำหนดให้พล็อตกราฟ 100 จุดใน 1 วงรอบฮิสเทอรีซิส เมื่อระบบที่ประกอบด้วยอนุภาค 20 ตัวถูกสร้างขึ้น การจำลองสถานการณ์จะถูกจำลองทิ้ง คิดเป็นจำนวนรอบฮิสเทอรีซิส 1000 วง จากนั้นจำลองสถานการณ์ต่อเพื่อสร้างวงรอบฮิสเทอรีซิส 500 วงและนำมาเฉลี่ย การทดลองนี้ใช้วงรอบฮิสเทอรีซิสที่เกิดจากระบบที่มีอุณหภูมิเท่ากับ 0.01 K/k_B, 0.25 K/k_B และ 0.60 K/k_B เหตุที่เลือกอุณหภูมิในช่วงนี้เพราะจากการทดลองแรก พบว่าระบบที่มีอนุภาค 20 ตัวมีอุณหภูมิวิกฤตใกล้เคียงกับ 0.25 K/k_B ในแต่ละอุณหภูมิจะใช้ความถี่ของสนามแม่เหล็กภายนอกเท่ากับ 0.2 MCS^{-1}, 0.02 MCS^{-1}และ0.002 MCS^{-1} ผลที่ได้จากการทดลองนี้คือ วงรอบฮิสเทอรีซิส 9 แบบที่มีอุณหภูมิและความถี่ของสนามแม่เหล็กภายนอกแตกต่างกันเพื่อนำมาเปรียบเทียบผลที่เกิดจากอุณหภูมิและความถี่ของสนามแม่เหล็กภายนอก