

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ФИЗИКЕ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД

Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics/Eds. by D. P. Landau, K. K. Mon, H. B. Schuttler: Proceedings of Workshop. Athens, USA, February 1988.— Berlin; a. o.; Heidelberg; New York; Paris; London; Tokyo: Springer-Verlag, 1988.—240 p.— (Springer Proceedings in Physics. V. 33).

В последнее десятилетие компьютерный эксперимент занял заметное место в физических исследованиях. Компьютерное моделирование физических систем позволяет получать числовую информацию о них, а также на основе графических изображений дает возможность составить представление об объекте, с помощью которого могут быть разработаны оптимальные пути исследования объекта. Среди математических методов описания физических систем и явлений и их численного анализа одним из основных становится моделирование этих объектов и процессов на основе метода Монте-Карло. Этот метод особенно полезен для сложных физических систем с громоздким математическим описанием.

Серьезный прогресс в использовании метода Монте-Карло связан в большой степени с новыми возможностями современной вычислительной техники. Если двадцать лет назад на начальной стадии моделирования исследуемый объект мог быть разбит в одном измерении примерно на сотню шагов Монте-Карло, то теперь в простых моделях масштаб одного измерения составляет миллионы шагов Монте-Карло. Существенно возросли и скорости получения информации. В результате этого имеется возможность исследовать свойства физических систем на реалистичных моделях. В настоящее время возможности компьютерного моделирования при решении целого ряда задач существенно превышают возможности эксперимента как по скорости получения информации, так и по ее стоимости. Это повышает роль компьютерного эксперимента в современной физике, и в ряде направлений физики наши современные представления опираются главным образом на информацию, полученную на основе компьютерного моделирования.

Ясно, что для прогресса в рассматриваемой области наряду с совершенной вычислительной техникой необходимо иметь алгоритмы и подходы, позволяющие эффективно ею распорядиться. Эти проблемы вместе с анализом соответствующих физических систем и составляют современное содержание компьютерного моделирования методом Монте-Карло. Проблемы этого направления и его достижения отражались в недавно вышедших сборниках [1, 2]. В рецензируемый сборник вошли материалы рабочего семинара, посвященного компьютерному моделированию конденсированных систем, который состоялся в феврале 1988 г. в Афинах (США).

Сборник (состоит из четырех частей. Первые три (классические системы; квантовые системы; компьютерная графика) включают небольшие обзорные работы, представляющие узкие проблемы, в развитие которых авторы внесли существенный вклад. В последнюю часть входят

оригинальные работы, посвященные отдельным вопросам компьютерного моделирования методом Монте-Карло.

Примерно половину книги составляет ее первая часть, посвященная сложным классическим системам. Пропорции между методическими элементами и физическими результатами в каждой из статей разные и зависят от вкуса автора, но в каждой работе оба эти элемента присутствуют. Перечислим основные проблемы, которые рассматриваются в этой части. К ним относится анализ критических явлений, динамика классических систем взаимодействующих спинов, свойства и процессы роста фрактальных агрегатов, динамика плотных полимеров, проблемы газовой динамики. Перечень свидетельствует об актуальности сборника. Существенно, что эти проблемы описываются на основе реалистичных моделей, которые нередко дают основную информацию о предмете исследования.

Во второй части сборника исследуются квантовые системы. В отличие от проблем первой части сборника, которые описываются на основе реалистичных моделей, для квантовых систем проводится «пристрелка»: проверяется возможность применения моделирования на основе метода Монте-Карло, демонстрируются его возможности. В будущем метод Монте-Карло обещает найти свое место в моделировании квантовых систем.

Третья часть книги состоит из одной статьи Фоллина, посвященной компьютерной графике в науке и технике. Это интересное современное направление. Конечным результатом является получение графиков и рисунков моделей (например, самолетов, ракет, автомобилей и т. д.), которые рассчитаны при поставленных условиях и оптимизированы по определенным параметрам. Такие подходы занимают твердые позиции в современном проектировании, и в последствии их роль будет повышаться.

Четвертая, последняя, часть книги включает в себя небольшие оригинальные работы, не имеющие связи между собой. Например, в одной из них предложена и рассчитана новая модель перколяционного кластера, в другой выполнены расчеты по распределению рублидия на поверхности графита для жидкой и твердой фазы.

В целом книга отражает современный этап в развитии компьютерного моделирования и будет полезна как специалистам, создающим и использующим эти модели, так и широкому кругу физиков, для которых существенны новые физические результаты и представления о сложных физических объектах, полученные данными методами.

*Б. М. Смирнов*

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Monte-Carlo Methods in Statistical Physics/Ed. K. Binder.—Heidelberg; Berlin: Springer-Verlag, 1986.
2. Monte-Carlo Methods in Statistical Physic/Ed. K. Binder.— 2nd ed.— Heidelberg; Berlin: Springer-Verlag, 1987.