



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ

Μελέτη του Πρότυπου Potts στις Δύο Διαστάσεις
με Αριθμητικές Προσομοιώσεις Monte Carlo

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΤΟΥ

Κωνσταντίνου Η. Φίλιου

Επιβλέπων: Κωνσταντίνος Αναγνωστόπουλος
Επ. Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Αθήνα, Οκτώβριος 2010



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ
ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ

Μελέτη του Πρότυπου Potts στις Δύο Διαστάσεις με Αριθμητικές Προσομοιώσεις Monte Carlo

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΤΟΥ

Κωνσταντίνου Η. Φίλιου

Επιβλέπων: Κωνσταντίνος Αναγνωστόπουλος
Επ. Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Εγκρίθηκε από την τριμελή εξεταστική επιτροπή:

.....
Κωνσταντίνος Αναγνωστόπουλος
Επ. Καθηγητής Ε.Μ.Π.

.....
Λεωνίδας Τσέτσερης
Επ. Καθηγητής Ε.Μ.Π.

.....
Νικόλαος Ήργες
Επ. Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Αθήνα, Οκτώβριος 2010

.....
Κωνσταντίνος Η. Φίλιος

© 2010 Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο. All rights reserved.

Απαγορεύεται η αντιγραφή, αποθήκευση και διανομή της παρούσας εργασίας, εξ ολοκλήρου ή τμήματος αυτής, για εμπορικό σκοπό. Επιτρέπεται η ανατύπωση, αποθήκευση και διανομή για σκοπό μη κερδοσκοπικό, εκπαιδευτικής ή ερευνητικής φύσης, υπό την προϋπόθεση να αναφέρεται η πηγή προέλευσης και να διατηρείται το παρόν μήνυμα. Ερωτήματα που αφορούν τη χρήση της εργασίας για κερδοσκοπικό σκοπό πρέπει να απευθύνονται προς τον συγγραφέα.

Οι απόψεις και τα συμπεράσματα που περιέχονται σε αυτό το έγγραφο εκφράζουν τον συγγραφέα και δεν πρέπει να ερμηνευθεί ότι αντιπροσωπεύουν τις επίσημες θέσεις του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.

Περίληψη

Στο παρόν κείμενο μελετάται η κρίσιμη συμπεριφορά στο πρότυπο Potts q καταστάσεων σε δι-διάστατα τετραγωνικά πλέγματα με αριθμητικές προσομοιώσεις Monte Carlo. Κατά την εκπόνηση της εργασίας ξαναγράφηκαν σε γλώσσα προγραμματισμού C οι πρωτότυποι αλγόριθμοι Metropolis [2], Heatbath ([2]) και Swendsen-Wang [1] ώστε να λειτουργούν για q καταστάσεις, υπερκύβους D διαστάσεων σε ελικοειδείς ή περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Ο πλήρης πηγαίος κώδικας παρατίθεται στο παράρτημα για περαιτέρω επεξεργασία και πειραματισμό.

Επίσης, οι αλγόριθμοι χρησιμοποιήθηκαν για την διενέργεια προσομοιώσεων με $q = 2, 3, 4$ όπου αναλυτικά προβλέπεται συνεχής μετάβαση φάσης και $q = 5, 6, 10$ όπου προβλέπεται μετάβαση πρώτης τάξης. Χρησιμοποιώντας κλιμάκωση πεπερασμένου μεγέθους, ανάλυση του Binder Cumulant και του Energy Cumulant έγιναν ποσοτικές εκτιμήσεις της κρίσιμης θερμοκρασίας μετάβασης φάσης και ανάδειξη της τάξης της μετάβασης. Οι εκτιμήσεις αυτές βρέθηκαν σε συμφωνία με τις βιβλιογραφικές αναφορές.

Abstract

The subject of this text is the critical behaviour of the two-dimensional square q -state Potts model using Monte Carlo simulations. During preparation of this thesis, original Metropolis [2], Heatbath [2] and Swendsen-Wang [1] source code was re-written to perform in q states, D -dimensional hypercubic lattices in both helical or periodic boundary conditional. The complete source code is attached at the appendix and is available for further optimizations and experimentation.

Additionally, these algorithms were used to perform simulations for $q = 2, 3, 4$ which are analytically predicted to exhibit continuous phase transitions and for $q = 5, 6, 10$ which are expected to possess first-order phase transitions. Utilizing methods of finite size scaling and binder cumulant and energy cumulant analysis, quantitative estimations of critical temperature became possible the order of phase transition was successfully detected. These estimations appear to be in agreement with bibliographical references and mathematical processing of the model.

Περιεχόμενα

Κατάλογος Σχημάτων	ii
Κατάλογος Πινάκων	v
1 Το μοντέλο Potts	1
1.1 Εισαγωγή	1
1.2 Χαμιλτονιανή	1
1.3 Φυσικά μεγέθη, σταθερές και παράμετρος τάξης	2
1.4 Μεταβάσεις φάσης	3
1.5 Κρίσιμοι εκθέτες και παγκοσμιότητα	4
1.6 Κλιμάκωση πεπερασμένου μεγέθους	5
1.7 Μεταβάσεις φάσης σε τετραγωνικά πλέγματα	5
1.8 Παραλλαγές και επεκτάσεις	6
2 Προσομοιώσεις Monte Carlo	9
2.1 Εισαγωγή	9
2.2 Διαδικασίες Markov	9
2.3 Ο πηγαίος κώδικας	10
2.4 Υπολογιστικός ορισμός συνοριακών συνθηκών στις D διαστάσεις	11
2.5 Χρήση των συνοριακών συνθηκών στον πηγαίο κώδικα	11
2.6 Αλγόριθμος Heat-bath	12
2.6.1 Περιγραφή αλγορίθμου	12
2.6.2 Υλοποίηση αλγορίθμου	12
2.7 Αλγόριθμος Swendsen-Wang	13
2.7.1 Περιγραφή αλγορίθμου	13
2.7.2 Υλοποίηση αλγορίθμου	13
2.8 Αριθμητικοί υπολογισμοί	14
2.9 Ανάλυση αποτελεσμάτων	15
2.10 Διενέργεια προσομοιώσεων	15
3 Δυο καταστάσεις ($q = 2$)	17
3.1 “Επιστροφή” στο μοντέλο Ising	17
3.2 Αναζήτηση του κρίσιμου σημείου με Heat-bath	18
3.3 Διερεύνηση σφαλμάτων στην κρίσιμη περιοχή	22
3.4 Η επικράτηση του αλγορίθμου Swendsen-Wang	29
3.5 Γραφήματα βάρμωσης & κρίσιμοι εκθέτες	32
3.6 Στο κρίσιμο σημείο	35

4	Τρεις καταστάσεις ($q = 3$)	39
4.1	Εντοπισμός του κρίσιμου σημείου	39
4.2	Γραφήματα βάρθρωσης & κρίσιμοι εκθέτες	43
4.3	Επί του κρίσιμου σημείου	45
5	Τέσσερις καταστάσεις ($q = 4$)	49
5.1	Εντοπισμός του κρίσιμου σημείου	49
5.2	Γραφήματα βάρθρωσης & κρίσιμοι εκθέτες	53
5.3	Επί του κρίσιμου σημείου	56
6	Πέντε καταστάσεις ($q = 5$)	59
6.1	Εντοπισμός του κρίσιμου σημείου	59
6.2	Γραφήματα βάρθρωσης & ψευδο-κρίσιμοι εκθέτες	63
6.3	Επί του κρίσιμου σημείου	65
6.4	Καμπύλες υστέρησης	68
7	Έξι καταστάσεις ($q = 6$)	75
7.1	Εντοπισμός του κρίσιμου σημείου	75
7.2	Γραφήματα βάρθρωσης & κρίσιμοι εκθέτες	79
7.3	Επί του κρίσιμου σημείου	82
7.4	Καμπύλες υστέρησης	85
8	Δέκα καταστάσεις ($q = 10$)	93
8.1	Ιστόγραμμα μαγνήτισης	93
8.2	Καμπύλες υστέρησης	95
	Α΄ Πηγαίος Κώδικας	101
	Ευρετήριο	119
	Βιβλιογραφία	121

Κατάλογος Σχημάτων

1.1	Παραδείγματα διδιάστατων πλεγμάτων	7
1.2	Παραδείγματα q καταστάσεων σε $q - 1$ διαστάσεις	7
3.1	Μαγνήτιση για $q = 2$ με Heatbath, 9.6×10^4 sweeps	19
3.2	Ενέργεια ανά δεσμό για $q = 2$ με Heatbath, 9.6×10^4 sweeps	19
3.3	Binder Cumulant για $q = 2$ με Heatbath, 9.6×10^4 sweeps	20
3.4	Energy Cumulant για $q = 2$ με Heatbath, 9.6×10^4 sweeps	20
3.5	Ειδική θερμότητα για $q = 2$ με Heatbath, 9.6×10^4 sweeps	21
3.6	Μαγν. επιδεκτικότητα για $q = 2$ με Heatbath, 9.6×10^4 sweeps	21
3.7	Περιοχή (I), Ιστόγρ. ενέργειας για $q = 2$, $\beta = 0.7$, Heatbath, 9.6×10^4 sweeps	23
3.8	Περιοχή (I), Ιστόγρ. μαγνήτισης για $q = 2$, $\beta = 0.7$, Heatbath, 9.6×10^4 sweeps	23
3.9	Περιοχή (I), Ολοκληρ. χρόνος αυτοσυσχέτισης για $q = 2$, $\beta = 0.7$, Heatbath, 9.6×10^4 sweeps	24
3.10	Περιοχή (III), Ιστόγρ. ενέργειας για $q = 2$, $\beta = 1.1$, Heatbath, 9.6×10^4 sweeps	25
3.11	Περιοχή (III), Ιστόγρ. μαγνήτισης για $q = 2$, $\beta = 1.1$, Heatbath, 9.6×10^4 sweeps	25
3.12	Περιοχή (III), Ολοκληρ. χρόνος αυτοσυσχέτισης για $q = 2$, $\beta = 1.1$, Heatbath, 9.6×10^4 sweeps	26
3.13	Περιοχή (II), Ιστόγρ. ενέργειας για $q = 2$, $\beta = 0.88$, Heatbath, 9.6×10^4 sweeps	27
3.14	Περιοχή (II), Ιστόγρ. μαγνήτισης για $q = 2$, $\beta = 0.88$, Heatbath, 9.6×10^4 sweeps	27
3.15	Περιοχή (II), Ολ. χρόνος αυτοσυσχέτισης, $q = 2$, $\beta = 0.88$, Heatbath, 9.6×10^4 sweeps	28
3.16	Περιοχή (II), Χρονοσειρά μαγνήτισης για $q = 2$, $\beta = 0.88$, Heatbath, 9.6×10^4 sweeps, $L = 128$	28
3.17	Μαγνήτιση για $q = 2$ με S-W, 9.6×10^4 sweeps	29
3.18	Binder Cumulant για $q = 2$ με S-W, 9.6×10^4 sweeps	30
3.19	Energy Cumulant για $q = 2$ με S-W, 9.6×10^4 sweeps	30
3.20	Μαγν. επιδεκτικότητα για $q = 2$ με S-W, 9.6×10^4 sweeps	31
3.21	Ειδ. θερμότητα για $q = 2$ με S-W, 9.6×10^4 sweeps	31
3.22	Ενέργεια ανά δεσμό για $q = 2$ με S-W, 9.6×10^4 sweeps	32
3.23	Βάθμωση μαγνήτισης για $q = 2$ με S-W, 9.6×10^4 sweeps	33
3.24	Βάθμωση μαγνητικής επιδεκτικότητας για $q = 2$ με S-W, 9.6×10^4 sweeps	33
3.25	Βάθμωση ειδικής θερμότητας για $q = 2$ με S-W, 9.6×10^4 sweeps	34
3.26	Βάθμωση Binder Cumulant για $q = 2$ με S-W, 9.6×10^4 sweeps	34
3.27	τ_{int} για $q = 2$ με S-W στο κρίσιμο σημείο	36
3.28	FSS L^{-1} για $q = 2$ με S-W στο κρίσιμο σημείο	36
3.29	Ιστόγραμμα μαγνήτισης για $q = 2$ με S-W στο κρίσιμο σημείο	37
3.30	Ιστόγραμμα ενέργειας για $q = 2$ με S-W στο κρίσιμο σημείο	37
4.1	Μαγνήτιση για $q = 3$ με S-W, 12×10^4 sweeps	40
4.2	Binder Cumulant για $q = 3$ με S-W, 12×10^4 sweeps	40
4.3	Energy Cumulant για $q = 3$ με S-W, 12×10^4 sweeps	41
4.4	Μαγνητική επιδεκτικότητα για $q = 3$ με S-W, 12×10^4 sweeps	41
4.5	Ειδ. θερμότητα για $q = 3$ με S-W, 12×10^4 sweeps	42
4.6	Ενέργεια ανά δεσμό για $q = 3$ με S-W, 12×10^4 sweeps	42
4.7	Βάθμωση μαγνήτισης για $q = 3$ με S-W, 12×10^4 sweeps	43

4.8	Βάθμωση μαγνητικής επιδεκτικότητας για $q = 3$ με S-W, 12×10^4 sweeps	44
4.9	Βάθμωση ειδικής θερμότητας για $q = 3$ με S-W, 12×10^4 sweeps	44
4.10	Βάθμωση Binder Cumulant για $q = 3$ με S-W, 12×10^4 sweeps	45
4.11	τ_{int} για $q = 3$ με S-W στο κρίσιμο σημείο	46
4.12	FSS $L^{-6/5}$ για $q = 3$ με S-W στο κρίσιμο σημείο	47
4.13	Ιστόγραμμα μαγνήτισης για $q = 3$ με S-W στο κρίσιμο σημείο sweeps	47
4.14	Ιστόγραμμα ενέργειας για $q = 3$ με S-W στο κρίσιμο σημείο sweeps	48
5.1	Μαγνήτιση για $q = 4$ με S-W, 32×10^4 sweeps	50
5.2	Binder Cumulant για $q = 4$ με S-W, 32×10^4 sweeps	51
5.3	Energy Cumulant για $q = 4$ με S-W, 32×10^4 sweeps	51
5.4	Μαγνητική επιδεκτικότητα για $q = 4$ με S-W, 32×10^4 sweeps	52
5.5	Ειδική θερμότητα για $q = 4$ με S-W, 32×10^4 sweeps	52
5.6	Ενέργεια ανά δεσμό για $q = 4$ με S-W, 32×10^4 sweeps	53
5.7	Βάθμωση μαγνήτισης για $q = 4$ με S-W, 32×10^4 sweeps	54
5.8	Βάθμωση μαγνητικής επιδεκτικότητας για $q = 4$ με S-W, 32×10^4 sweeps	54
5.9	Βάθμωση ειδικής θερμότητας για $q = 4$ με S-W, 32×10^4 sweeps	55
5.10	Βάθμωση Binder Cumulant για $q = 4$ με S-W, 32×10^4 sweeps	55
5.11	τ_{int} για $q = 4$ με S-W στο κρίσιμο σημείο	57
5.12	FSS $L^{-3/2}$ για $q = 4$ με S-W στο κρίσιμο σημείο	57
5.13	Ιστόγραμμα μαγνήτισης για $q = 4$ με S-W στο κρίσιμο σημείο sweeps	58
5.14	Ιστόγραμμα ενέργειας για $q = 4$ με S-W στο κρίσιμο σημείο sweeps	58
6.1	Μαγνήτιση για $q = 5$ με S-W, 100×10^4 sweeps	60
6.2	Binder Cumulant για $q = 5$ με S-W, 100×10^4 sweeps	60
6.3	Energy Cumulant για $q = 5$ με S-W, 100×10^4 sweeps	61
6.4	Μαγνητική επιδεκτικότητα για $q = 5$ με S-W, 100×10^4 sweeps	61
6.5	Ειδική θερμότητα για $q = 5$ με S-W, 100×10^4 sweeps	62
6.6	Ενέργεια ανά δεσμό για $q = 5$ με S-W, 100×10^4 sweeps	62
6.7	Βάθμωση μαγνήτισης για $q = 5$ με S-W, 100×10^4 sweeps	63
6.8	Βάθμωση μαγνητικής επιδεκτικότητας για $q = 5$ με S-W, 100×10^4 sweeps	64
6.9	Βάθμωση ειδικής θερμότητας για $q = 5$ με S-W, 100×10^4 sweeps	64
6.10	Βάθμωση Binder Cumulant για $q = 5$ με S-W, 100×10^4 sweeps	65
6.11	τ_{int} για $q = 5$ με S-W στο κρίσιμο σημείο	66
6.12	FSS $L^{-3/2}$ για $q = 5$ με S-W στο κρίσιμο σημείο	67
6.13	Ιστόγραμμα μαγνήτισης για $q = 5$ με S-W στο κρίσιμο σημείο sweeps	67
6.14	Ιστόγραμμα ενέργειας για $q = 5$ με S-W στο κρίσιμο σημείο sweeps	68
6.15	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 5$, $L = 320$ με S-W στα 1000 sweeps	69
6.16	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 5$, $L = 320$ με S-W στα 2000 sweeps	69
6.17	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 5$, $L = 320$ με S-W στα 4000 sweeps	70
6.18	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 5$, $L = 768$ με S-W στα 1000 sweeps	70
6.19	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 5$, $L = 768$ με S-W στα 2000 sweeps	71
6.20	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 5$, $L = 768$ με S-W στα 4000 sweeps	71
6.21	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 5$, $L = 768$ με S-W στα 8000 sweeps	72
6.22	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 5$, $L = 1024$ με S-W στα 1000 sweeps	72
6.23	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 5$, $L = 1024$ με S-W στα 2000 sweeps	73
6.24	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 5$, $L = 1024$ με S-W στα 4000 sweeps	73
7.1	Μαγνήτιση για $q = 6$ με S-W, 300×10^4 sweeps	76
7.2	Binder Cumulant για $q = 6$ με S-W, 300×10^4 sweeps	76
7.3	Energy Cumulant για $q = 6$ με S-W, 300×10^4 sweeps	77
7.4	Μαγνητική επιδεκτικότητα για $q = 6$ με S-W, 300×10^4 sweeps	77
7.5	Ειδική θερμότητα για $q = 6$ με S-W, 300×10^4 sweeps	78

7.6	Ενέργεια ανά δεσμό για $q = 6$ με S-W, 300×10^4 sweeps	78
7.7	Βάθμωση μαγνήτισης για $q = 6$ με S-W, 300×10^4 sweeps	79
7.8	Βάθμωση μαγνητικής επιδεκτικότητας για $q = 6$ με S-W, 300×10^4 sweeps	80
7.9	Βάθμωση ειδικής θερμότητας για $q = 6$ με S-W, 300×10^4 sweeps	80
7.10	Βάθμωση Binder Cumulant για $q = 6$ με S-W, 300×10^4 sweeps	81
7.11	Ιστόγραμμα μαγνήτισης για $q = 6$ με S-W στο κρίσιμο σημείο sweeps	83
7.12	Ιστόγραμμα ενέργειας για $q = 6$ με S-W στο κρίσιμο σημείο sweeps	83
7.13	FSS $L^{-3/2}$ για $q = 6$ με S-W στο κρίσιμο σημείο	84
7.14	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 6$, $L = 192$ με S-W στα 1000 sweeps	85
7.15	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 6$, $L = 192$ με S-W στα 2000 sweeps	86
7.16	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 6$, $L = 192$ με S-W στα 4000 sweeps	86
7.17	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 6$, $L = 192$ με S-W στα 8000 sweeps	87
7.18	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 6$, $L = 256$ με S-W στα 1000 sweeps	87
7.19	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 6$, $L = 256$ με S-W στα 2000 sweeps	88
7.20	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 6$, $L = 256$ με S-W στα 4000 sweeps	88
7.21	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 6$, $L = 256$ με S-W στα 8000 sweeps	89
7.22	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 6$, $L = 512$ με S-W στα 1000 sweeps	89
7.23	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 6$, $L = 512$ με S-W στα 2000 sweeps	90
7.24	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 6$, $L = 512$ με S-W στα 4000 sweeps	90
7.25	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 6$, $L = 512$ με S-W στα 8000 sweeps	91
8.1	Ιστόγραμμα μαγνήτισης, $q = 10$ με S-W, $\beta = 1.4246$, $L = 64$, 15×10^6 sweeps	94
8.2	Ιστόγραμμα ενέργειας, $q = 10$ με S-W, $\beta = 1.4246$, $L = 64$, 15×10^6 sweeps	94
8.3	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 10$, $L = 96$ με S-W στα 1000 sweeps	95
8.4	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 10$, $L = 96$ με S-W στα 2000 sweeps	96
8.5	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 10$, $L = 96$ με S-W στα 4000 sweeps	96
8.6	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 10$, $L = 96$ με S-W στα 8000 sweeps	97
8.7	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 10$, $L = 128$ με S-W στα 1000 sweeps	97
8.8	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 10$, $L = 128$ με S-W στα 2000 sweeps	98
8.9	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 10$, $L = 128$ με S-W στα 4000 sweeps	98
8.10	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 10$, $L = 128$ με S-W στα 8000 sweeps	99
8.11	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 10$, $L = 256$ με S-W στα 1000 sweeps	99
8.12	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 10$, $L = 256$ με S-W στα 2000 sweeps	100
8.13	Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 10$, $L = 256$ με S-W στα 4000 sweeps	100

Κατάλογος Πινάκων

1.1	Κρίσιμοι εκθέτες για το τετραγωνικό μοντέλο Potts	6
3.1	Αντιπροσωπευτικές περιοχές μαγνήτισης για Heatbath, $q = 2$	22
3.2	Κρίσιμοι εκθέτες για $q = 2$	32
3.3	Ανεξάρτητες μετρήσεις στο κρίσιμο σημείο για $q = 2$	35
4.1	Κρίσιμοι εκθέτες για $q = 3$	43
4.2	Ανεξάρτητες μετρήσεις στο κρίσιμο σημείο για $q = 3$	45
4.3	Αχρότατα ιστογραμμάτων μαγνήτισης για $q = 3$	46
5.1	Ψευδοκρίσιμα σημεία για $q = 4$	50
5.2	Κρίσιμοι εκθέτες για $q = 4$	53
5.3	Ανεξάρτητες μετρήσεις στο κρίσιμο σημείο για $q = 4$	56
5.4	Αχρότατα ιστογραμμάτων μαγνήτισης για $q = 4$	56
6.1	Ψευδοκρίσιμα σημεία για $q = 5$	59
6.2	Πειραματικοί εκθέτες για $q = 5$	63
6.3	Ανεξάρτητες μετρήσεις στο κρίσιμο σημείο για $q = 5$	65
6.4	Αχρότατα ιστογραμμάτων για $q = 5$	66
6.5	Υστέρηση για $q = 5$	68
7.1	Ψευδοκρίσιμα σημεία για $q = 6$	75
7.2	Κρίσιμοι εκθέτες για $q = 6$	79
7.3	Ανεξάρτητες μετρήσεις στο κρίσιμο σημείο για $q = 6$	82
7.4	Αχρότατα ιστογραμμάτων για $q = 6$	82
7.5	Υστέρηση για $q = 6$	85
8.1	Υστέρηση για $q = 10$	95

Κεφάλαιο 1

Το μοντέλο Potts

1.1 Εισαγωγή

Η Στατιστική Φυσική είναι εκείνος ο κλάδος της Φυσικής που εφαρμόζει την θεωρία των πιθανοτήτων προκειμένου να περιγράψει την *θερμοδυναμική συμπεριφορά* σωμάτων που αποτελούνται από τεράστιο πλήθος σωματιδίων συνδέοντας τις *μικροσκοπικές ιδιότητες* των μεμονωμένων σωματιδίων με τις *μακροσκοπικές ιδιότητες* του συνόλου τους. Η πλειάδα των παραμέτρων της φυσικής οντότητας που εξετάζουμε κάθε φορά οδηγεί σε αντίστοιχα μοντέλα που ενσωματώνουν σε ένα μαθηματικό πλαίσιο αυτές τις ιδιότητες και τις όποιες απαραίτητες παραδοχές.

Ένα τέτοιο στατιστικό μοντέλο είναι το μοντέλο Potts. Στο μοντέλο αυτό περιγράφονται στερεά σώματα που μικροσκοπικά μπορούν να ιδωθούν ως πλέγματα σωματιδίων τα οποία αλληλεπιδρούν μεταξύ τους. Κυρίαρχη έννοια στο μοντέλο είναι το spin κάθε σωματιδίου που καταλαμβάνει μια θέση πάνω στο πλέγμα, καθώς η δυναμική συμπεριφορά που αναπαρίσταται μαθηματικά από την **Χαμιλτονιανή** του συστήματος διαμορφώνεται από τις μαγνητικές αλληλεπιδράσεις των spin των σωματιδίων.

Η μελέτη που αποτυπώνεται στο υπόλοιπο κείμενο έχει χαρακτήρα περισσότερο *διερευνητικό* και δεν στοχεύει τόσο στον ποσοτικό προσδιορισμό στοιχείων ή ακριβείς προβλέψεις μεγεθών όσο στην ψηλάφηση των *ποιοτικών* χαρακτηριστικών, από τη σκοπιά του μελετητή που έρχεται πρώτη φορά σε επαφή με το μοντέλο. Αυτός είναι, άλλωστε, κι ο λόγος που η μεγαλύτερη έκταση του πονήματος αυτού έχει αφιερωθεί σε γραφήματα που απεικονίζουν τα αποτελέσματα των υπολογιστικών προσομοιώσεων που πραγματοποιήθηκαν για την *Μελέτη του Πρότυπου Potts στις Δύο Διαστάσεις με Αριθμητικές Προσομοιώσεις Monte Carlo*.

1.2 Χαμιλτονιανή

Ιστορικά το πρώτο και απλούστερο μοντέλο αλληλεπιδρώντων spin σε πλέγμα ήταν το Ising που ανέπτυξε ο γερμανός φυσικός Ernst Ising (1900-1998). Στο μοντέλο αυτό κάθε spin περιοριζόταν σε ένα εύρος δυο καταστάσεων (πάνω και κάτω) με Χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασης

$$\mathcal{H}_I = -\mathcal{J} \sum_{\langle ij \rangle} s_i \cdot s_j, \quad \mathcal{Q} = \{-1, +1\} \quad (1.1)$$

Η πιο αξιολογική προσπάθεια γενίκευσης του μοντέλου έγινε από τους Ashkin-Teller οι οποίοι επεξέτειναν το φάσμα των επιτρεπτών τιμών των spin σε 4 καταστάσεις. Η πλήρης γενίκευση του μοντέλου προτάθηκε το 1952 από τον καθηγητή Cyril Domb στον τότε διδακτορικό του φοιτητή Renfrey Potts (1925-2005). Για την ακρίβεια, η αρχική διατύπωση του προτύπου προέβλεπε q δυνατές τιμές spin που κατανέμονται ομοιόμορφα πάνω σε έναν κύκλο με γωνίες

$$\theta_n = \frac{2\pi n}{q}$$

και Χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασης

$$H_c = \mathcal{J}_c \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\theta_{s_i} - \theta_{s_j}) \quad i, j \in \{1, \dots, q\}$$

Η εκδοχή αυτή είναι σήμερα γνωστή ως **διανυσματικό μοντέλο Potts** (Vector Potts Model) ή ως **μοντέλο του ωρολογίου** (clock model) το οποίο στο όριο $q \rightarrow \infty$ ισοδυναμεί με το **XY model**.

Αντικείμενο διερεύνησης του παρόντος κειμένου αποτελεί το λεγόμενο **καθιερωμένο μοντέλο Potts** (standard Potts model), με την απλούστερη Χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασης

$$\mathcal{H} = -\mathcal{J} \sum_{\langle ij \rangle} \delta(s_i, s_j) \quad (1.2)$$

όπου $s = 0, 1, 2, \dots, q-1, q > 1$, τα spin q καταστάσεων, και $\delta(s_i, s_j)$ το σύμβολο του Kronecker

$$\delta(s_i, s_j) = \begin{cases} 1 & s_i = s_j \\ 0 & s_i \neq s_j \end{cases}$$

1.3 Φυσικά μεγέθη, σταθερές και παράμετρος τάξης

Τα spin που καταλαμβάνουν τις N πλεγματικές θέσεις (sites) και χαρακτηρίζονται από μια εκ των q καταστάσεων, καθώς και η ενεργειακή σταθερά αλληλεπίδρασης \mathcal{J} είναι έννοιες θεμελιώδεις για την ίδια την διατύπωση του μοντέλου. Προχωρώντας κανείς, παρόλα αυτά, στη διερεύνηση των ιδιοτήτων του μοντέλου έρχεται σε επαφή με εξίσου σημαντικά φυσικά μεγέθη, συναρτήσεις και παραμέτρους που απορρέουν από τον ορισμό.

Πρωτεύουσας σημασίας για κάθε σύστημα που εξετάζεται στο πλαίσιο της στατιστικής μηχανικής είναι η **συνάρτηση επιμερισμού** (partition function)

$$Z = \sum_{s_i=0}^{q-1} e^{-\beta \mathcal{H}} \quad (1.3)$$

Στην προηγούμενη εξίσωση, για λόγους απλούστευσης και ανεξαρτησίας από αριθμητικές λεπτομέρειες, αντί της θερμοκρασίας T , χρησιμοποιείται η **αντίστροφη αδιάστατη θερμοκρασία** β που ορίζεται ως εξής:

$$\beta = 1/kT \quad (1.4)$$

Η β , που καταχρηστικά θα αποκαλείται και θερμοκρασία χωρίς κίνδυνο σύγχυσης, μετρείται σε μονάδες αντίστροφης ενέργειας, ενώ k είναι η σταθερά του Boltzman.

Στο σημείο αυτό αξίζει να ξαναγράψουμε την Χαμιλτονιανή της εξ. (1.2) του συστήματος που θεωρούμε στον ορισμό της Z για το μοντέλο μας, ώστε να περιλαμβάνει και έναν όρο αλληλεπίδρασης των spin με εξωτερικό πεδίο έντασης B προκειμένου να αναδειχθούν σημαντικά μεγέθη, όπως η μαγνήτιση:

$$\mathcal{H} = -(\mathcal{J} + B) \sum_{\langle ij \rangle} \delta(s_i, s_j) \quad (1.5)$$

Σχετικές ποσότητες που απορρέουν από την συνάρτηση επιμερισμού κατά τα ειωθότα είναι η αναμενόμενη τιμή της ενέργειας ή **εσωτερική ενέργεια**

$$\langle E \rangle = U = -\frac{\partial \log Z}{\partial \beta} \quad (1.6)$$

και η **ειδική θερμότητα**

$$C = k\beta^2 \frac{\partial^2 \log Z}{\partial \beta^2} \quad (1.7)$$

Από τη γνωστή σχέση της ειδικής θερμότητας C και της εντροπίας S

$$C = -\beta \frac{\partial S}{\partial \beta}$$

υπολογίζουμε την **εντροπία**, ως προς της συνάρτηση επιμερισμού Z

$$S = -k\beta \frac{\partial \log Z}{\partial \beta} + k \log Z \quad (1.8)$$

Ακολουθώντας ορίζουμε την ελεύθερη ενέργεια Helmholtz ως

$$F = U - TS = -kT \log Z \quad (1.9)$$

Ήδη είμαστε σε θέση να υπολογίσουμε την τελευταία κρίσιμη φυσική ποσότητα του συστήματος, την **μαγνήτιση** M . Καθώς η μαγνήτιση αποτελεί συζυγή μεταβλητή προς την παράμετρο της έντασης του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, δηλ. πρόκειται για το μέγεθος που μεταβάλλεται ως απόκριση στο επιβαλλόμενο μαγνητικό πεδίο, η μαθηματική σχέση είναι

$$M = \frac{\partial F}{\partial B} \quad (1.10)$$

1.4 Μεταβάσεις φάσης

Μετάβαση φάσης ονομάζουμε τον μετασχηματισμό ενός θερμοδυναμικού συστήματος από μια *φάση* ή *κατάσταση* σε μια άλλη. Ένα τετριμμένο παράδειγμα είναι οι γνωστές μεταβάσεις των υλικών ανάμεσα στην αέρια, υγρή και στερεή τους κατάσταση. Σε ένα μαγνητικό μοντέλο όπως το σιδηρομαγνητικό μοντέλο Potts, οι δυο φάσεις που μας ενδιαφέρουν και ανάμεσα στις οποίες μεταβαίνει το σύστημα είναι η παραμαγνητική και η σιδηρομαγνητική. Στην **παραμαγνητική** του φάση ένα σύστημα είναι αυθόρμητα αμαγνήτιστο, ενώ μπορεί να αποκτήσει μη-παραμένουσα μαγνήτιση μόνο αν βρεθεί μέσα σε μαγνητικό πεδίο. Αντιθέτως, στη **σιδηρομαγνητική** του φάση έχει μόνιμη μαγνήτιση λόγω της διάταξης των spin που το αποτελούν.

Εν γένει μια μετάβαση φάσης μπορεί να πραγματοποιηθεί λόγω της αλλαγής ενός κυρίαρχου εξωτερικού παράγοντα που επηρεάζει το σύστημα. Στα μαγνητικά μοντέλα δυο κυρίαρχες παράμετροι που οδηγούν σε μετάβαση φάσης είναι η θερμοκρασία (temperature-driven phase transition) και το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο (field-driver phase transition), αν υπάρχει.

Απαραίτητος στο πλαίσιο της συζήτησης για μεταβάσεις φάσης είναι ο ορισμός ενός μεγέθους που σηματοδοτεί τη μία ή την άλλη φάση, και ονομάζεται **παράμετρος τάξης** (order parameter). Συνήθως η παράμετρος τάξης επιλέγεται έτσι ώστε στην μία φάση να παίρνει την τιμή 0 και στην άλλη την τιμή 1. Στο μοντέλο Potts η παράμετρος τάξης είναι η μαγνήτιση ανά πλεγματοεικό σημείο $m = M/L^d$, όπου M η συνολική μαγνήτιση του υλικού πλέγματος και L^d το πλήθος των σημείων του d -διάστατου πλέγματος.

Δυο είναι τα σημαντικά χαρακτηριστικά σε μια μετάβαση φάσης:

- Το κρίσιμο σημείο
- Η φύση ή τάξης της μετάβασης

Το **κρίσιμο σημείο** είναι εκείνη η τιμή του κυρίαρχου μεγέθους που επηρεάζει το σύστημα (θερμοκρασίας, μαγνητικού πεδίου, κλπ) στην οποία συμβαίνει η μετάβαση φάσης. Στην μελέτη που ακολουθεί το μαγνητικό πεδίο απουσιάζει, συνεπώς η θερμοκρασία T 'κυβερνά' τις μεταβάσεις.

Η **τάξη της μετάβασης** περιγράφει τον τρόπο με τον οποίο μεταβάλλεται η παράμετρος τάξης κατά τη μετάβαση και οδηγεί σε έναν πρώτο βαθμικό διαχωρισμό των μεταβάσεων:

- Τις συνεχείς μεταβάσεις, κατά τις οποίες η παράμετρος τάξης μεταβάλλεται συνεχώς και ομαλά από την τιμή 0 στην τιμή 1
- Τις ασυνεχείς μεταβάσεις ή πρώτης τάξης, κατά τις οποίες η καμπύλη της παραμέτρου τάξης είναι ασυνεχής, εμφανίζοντας ένα απότομο άλμα από την τιμή 0 στην τιμή 1

Οι μεταβάσεις φάσης δεύτερης τάξης σε ένα μοντέλο Potts έχουν χαρακτηριστική συνέχεια της καμπύλης μαγνήτισης στην κρίσιμη περιοχή. Για ένα άπειρο πλέγμα του οποίου η δυναμική συμπεριφορά κυριαρχείται από την θερμοκρασία, στο κρίσιμο σημείο (β_c) το γράφημα της μαγνητικής επιδεκτικότητας εμφανίζει απειρισμό και ασυνέχεια.

Οι μεταβάσεις φάσης πρώτης τάξης στο όριο του άπειρου πλέγματος παρουσιάζουν ασυνέχεια της καμπύλης της μαγνήτισης με τη θερμοκρασία. Χαρακτηριστική είναι, άλλωστε, και η εμφάνιση **λανθάνουσας θερμότητας**, δηλ. της ποσότητας της ενέργειας που το σύστημα απορροφά στο κρίσιμο σημείο χωρίς να αυξάνει τη θερμοκρασία του, που συνοδεύεται από την συνύπαρξη των δυο φάσεων.

1.5 Κρίσιμοι εκθέτες και παγκοσμιότητα

Όπως αναφέρθηκε και στην προηγούμενη παράγραφο, η πραγματική εικόνα ενός υλικού το οποίο θεωρούμε ότι έχει πλεγματική δομή νοείται στο όριο όπου το πλήθος των πλεγματικών σημείων που το αποτελούν τείνει στο άπειρο, ή, πρακτικά, είναι πολύ μεγάλο. Δεδομένου, όμως, ότι είναι πρακτικά αδύνατο να προσομοιωθεί ένα άπειρο σύστημα σωματιδίων, καταφεύγουμε στην μελέτη πεπερασμένων πλεγμάτων. Η επιλογή αυτή έχει, φυσικά το κόστος της: Οι απειρισμοί μεγεθών που αναμένονται στην κρίσιμη περιοχή αποκόπτονται και αντικαθίστανται από στρογγυλεμένα μέγιστα. Προς ευχάριστη έκπληξη όλων, βέβαια, αυτή η ‘αλλοιωμένη’ εικόνα έχει κάποια συστηματικά χαρακτηριστικά που μας επιτρέπουν να δουλεύουμε σε πεπερασμένα πλέγματα και να εξάγουμε συμπεράσματα για το θερμοδυναμικό όριο όπου το πλέγμα γίνεται πρακτικά άπειρο. Τα συστηματικά αυτά χαρακτηριστικά συμπυκνώνονται στην έννοια της παγκοσμιότητας και των κρίσιμων εκθετών.

Η **παγκοσμιότητα** (universality) είναι η παρατήρηση πως οι ιδιότητες μιας μεγάλης ομάδας φυσικών συστημάτων είναι ανεξάρτητες από τις δυναμικές λεπτομέρειες του συστήματος. Ειδικά στα θερμοδυναμικά συστήματα όπως το Potts που εμφανίζουν παγκοσμιότητα, όσο πιο κοντά εστιάζει κανείς στο κρίσιμο σημείο, τόσο λιγότερο ευαίσθητη είναι η εξάρτηση της ανωμαλίας ενός μεγέθους από τις λεπτομέρειες του συστήματος.

Σε μια στενή, λοιπόν, περιοχή γύρω από την κρίσιμη θερμοκρασία, παρατηρεί κανείς ότι ένα ευρύ σύνολο συστημάτων ακολουθεί έναν νόμο της μορφής

$$O \propto |t|^{-\mathcal{E}}$$

όπου O η παρατηρήσιμη ποσότητα, \mathcal{E} ο **κρίσιμος εκθέτης** και t η ανηγμένη θερμοκρασία

$$t = \frac{T - T_c}{T_c} = \frac{\beta_c}{\beta} - 1 \quad (1.11)$$

Οι κρίσιμοι εκθέτες για τα αντίστοιχα θεμελιώδη μεγέθη είναι οι εξής:

$$\xi = |t|^{-\nu} \quad (1.12)$$

$$\chi = |t|^{-\gamma} \quad (1.13)$$

$$c = |t|^{-\alpha} \quad (1.14)$$

$$m = |t|^\beta \quad (1.15)$$

Σημειωτέον ότι ξ είναι το **μήκος αυτοσυσχέτισης** και ότι β είναι ο εκθέτης της μαγνήτισης που έχει νόημα μόνο για $T < T_c$ (αφού για $T \geq T_c$ η μαγνήτιση μηδενίζεται) και δεν πρέπει να συγχέεται με την αντίστροφη θερμοκρασία β .

1.6 Κλιμάκωση πεπερασμένου μεγέθους

Η μέθοδος της κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους (finite size scaling) είναι ένας τρόπος εξαγωγής των κρίσιμων εκθετών παρατηρώντας πώς οι παρατηρήσιμες ποσότητες μεταβάλλονται με το μέγεθος L του συστήματος.

Το μήκος συσχέτισης παίζει κυρίαρχο ρόλο στη συζήτηση που αφορά στις μεταβολές του μεγέθους του συστήματος. Εκφράζοντας την ποσότητα O με κρίσιμο εκθέτη \mathcal{E} συναρτήσει του μήκους αυτοσυσχέτισης ξ μπορούμε να γράψουμε

$$O \propto \xi^{\frac{\mathcal{E}}{\nu}}$$

Θεωρώντας το ξ την τιμή του μήκους συσχέτισης που θα είχε το άπειρο σύστημα στην ανηγμένη θερμοκρασία t , τότε η αποκοπή της ανωμαλίας (ή του απειρισμού) της καμπύλης του μεγέθους O πραγματοποιείται για $\xi > L$, ενώ για $\xi \ll L$ οι τιμές του O για πεπερασμένο πλέγμα ταυτίζονται με εκείνες του απείρου συστήματος. Συνοπτικά

$$O = \xi^{\frac{\mathcal{E}}{\nu}} f_O\left(\frac{L}{\xi}\right)$$

όπου $f_O(w)$ μια αδιάστατη συνάρτηση με τις ιδιότητες

$$f_O(w) = \text{σταθερά}, \quad w \gg 1$$

$$f_O(w) \rightarrow w^{\frac{\mathcal{E}}{\nu}}, \quad w \rightarrow 0$$

Προκειμένου να εξαλείψουμε το ξ από την παραπάνω εξίσωση ορίζουμε μια νέα αδιάστατη συνάρτηση

$$h_O(w) = w^{-\mathcal{E}} f_O(w^{\nu})$$

από όπου γνωρίζοντας ότι $\xi = |t|^{-\nu}$ παίρνουμε τελικά

$$O = L^{\frac{\mathcal{E}}{\nu}} h_O(L^{\frac{1}{\nu}} t)$$

Εξειδικεύοντας για τα συγκεκριμένα μεγέθη που μας ενδιαφέρουν μπορούμε να γράψουμε

$$\chi = L^{\frac{\alpha}{\nu}} h_{\chi}(L^{\frac{1}{\nu}} t) \quad (1.16)$$

$$c = L^{\frac{\alpha}{\nu}} h_c(L^{\frac{1}{\nu}} t) \quad (1.17)$$

$$m = L^{-\frac{\beta}{\nu}} h_m(L^{\frac{1}{\nu}} t) \quad (1.18)$$

Η ιδέα της κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους είναι ότι κανείς μπορεί να χαράξει την γραφική παράσταση της εκάστοτε συνάρτησης h και μεταβάλλοντας τους εκθέτες να εντοπίσει την κρίσιμη τιμή τους για την οποία οι καμπύλες πέφτουν η μία πάνω στην άλλη. Η μέθοδος αυτή είναι χρήσιμη γιατί μπορεί να χρησιμοποιηθεί και αντίστροφα: Με βάση την παγκοσμιότητα, αν γνωρίζουμε από κάποιο άλλο σύστημα που εμπίπτει στην ίδια κλάση με αυτό που μελετούμε τους κρίσιμους εκθέτες, τότε μπορούμε να εντοπίσουμε την κρίσιμη θερμοκρασία (μέσω του t) δίνοντάς της την τιμή για την οποία η καμπύλες συμπίπτουν.

1.7 Μεταβάσεις φάσης σε τετραγωνικά πλέγματα

Το μοντέλο Potts σε διδιάστατα τετραγωνικά πλέγματα έχει μελετηθεί διεξοδικά. Η βιβλιογραφία είναι αρκετά πλούσια σε θεωρητικά αλλά και αριθμητικά αποτελέσματα γεγονός που καθιστά αυτό το πεδίο πρόσφορο για πειραματισμό, καθώς υπάρχουν αρκετά σημεία αναφοράς και ελέγχου. Το άρθρο του Wu του 1982 [3] που συνιστά ορόσημο στην μελέτη του Potts δίνει πολλά χρήσιμα αποτελέσματα

της μαθηματικής επεξεργασίας του μοντέλου, στα οποία βασίστηκε η στρατηγική ανάπτυξης των επόμενων παραγράφων.

Σύμφωνα με τον Wu, για $q \leq 4$ η μετάβαση φάσης είναι συνεχής, ενώ για $q > 4$ είναι πρώτης τάξης. Οι κρίσιμες θερμοκρασίες β_c για κάθε q συμπυκνώνονται στην απλή εξίσωση

$$\beta_c(q) = \ln(1 + \sqrt{q}) \quad (1.19)$$

Εξίσου απλή είναι και η σχέση υπολογισμού της ενέργειας στο κρίσιμο σημείο

$$E(q; \beta_c) = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{q}} \right) \quad (1.20)$$

Τέλος, από τον Wu έχουμε στη διάθεσή μας και τον πίνακα 1.1 με τους κρίσιμους εκθέτες του μήκους συσχέτισης (ν), ειδικής θερμότητας (α), μαγνήτισης (β) και μαγνητικής επιδεκτικότητας (γ) όπως και τη λανθάνουσα θερμότητα λ για το τετραγωνικό Potts με $q \leq 10$.

q	ν	α	β	γ	λ
2	1	0	$\frac{1}{8}$	$\frac{7}{4}$	0
3	$\frac{5}{6}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{9}$	$\frac{13}{9}$	0
4	$\frac{2}{3}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{7}{6}$	0
5	-	-	-	-	0.0265
6	-	-	-	-	0.1007
10	-	-	-	-	0.3480

Πίνακας 1.1: Κρίσιμοι εκθέτες για το τετραγωνικό μοντέλο Potts

1.8 Παραλλαγές και επεκτάσεις

Ο λιτός ορισμός του Potts ως ένα μοντέλο που περιγράφει ένα σύστημα αλληλεπιδρόντων spin q καταστάσεων εντός πλέγματος ίσως με την πρώτη ματιά δίνει την αίσθηση ότι πρόκειται για ένα απλοϊκό μοντέλο με αξία περισσότερο εκπαιδευτική παρά ερευνητική. Κι όμως, η πλειάδα των παραμέτρων που έπονται του ορισμού είναι ικανή να συνδέσει την διερεύνηση του μοντέλου όχι μόνο με χρήσιμα συμπεράσματα σε θέματα θεωρητικής και πειραματικής μελέτης της φυσικής των υλικών αλλά ακόμα και με ανοιχτά προβλήματα πλήθους κλάδων της Φυσικής και θετικών επιστημών.

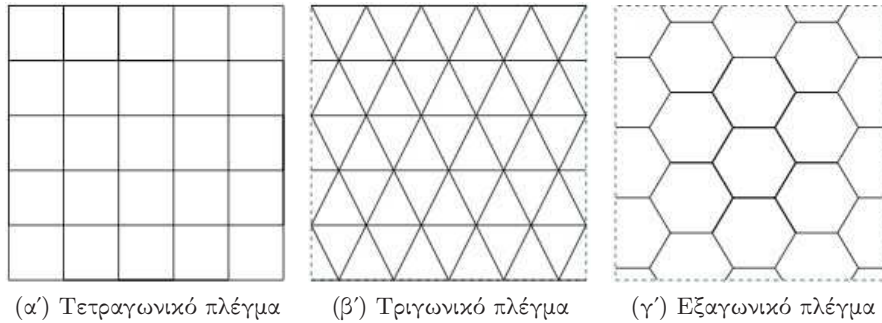
Μια πρώτη διαφοροποίηση προκύπτει από τη σταθερά αλληλεπίδρασης \mathcal{J} . Ειδικότερα για $\mathcal{J} > 0$ έχουμε το **σιδηρομαγνητικό μοντέλο** (Ferromagnetic Potts model), που εμφανίζεται συνηθέστερα στην βιβλιογραφία και στο οποίο επικεντρώνεται η παρούσα εργασία. Στην περίπτωση αυτή, κάθε δεσμός ανάμεσα σε δυο ίδια (ή ομόρροπα) spin έχει ενέργεια $-\mathcal{J}$, ενώ για αντίρροπα spin η ενέργεια του δεσμού είναι 0. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα να ευνοούνται οι ομόρροποι δεσμοί ώστε τελικά τα spin τείνουν να ευθυγραμμίζονται, αυξάνοντας τη μαγνήτιση και την τάξη του συστήματος. Βασικός ανταγωνιστικός παράγων στην διαδικασία αυτή της επικράτησης τάξης είναι η θερμοκρασία.

Στην περίπτωση του $\mathcal{J} < 0$ έχουμε αντίστοιχα το **αντισιδηρομαγνητικό μοντέλο** (Anti-Ferromagnetic Potts Model), στο οποίο ευνοούνται οι δεσμοί ανάμεσα σε μη ευθυγραμμισμένα spin.

Ίσως η πιο πλούσια πηγή παραλλαγών στο μοντέλο εισάγεται από τις παραμέτρους της γεωμετρίας του πλέγματος. Η **διάσταση του πλέγματος** είναι η πρώτη σημαντική παράμετρος που έρχεται στο νου. Τις τελευταίες δεκαετίες τα διδιάστατα πλέγματα (2-D) έχουν τύχει της περισσότερης προσοχής και μελέτης για πολλούς λόγους, ανάμεσα στους οποίους είναι η απλότητα, τα ακριβή θεωρητικά/αναλυτικά αποτελέσματα, κλπ.. Παρόλα αυτά, αν και περισσότερο μέσω προσομοιώσεων παρά μέσω άμεσων μαθηματικών προσεγγίσεων, φυσική αξία έχουν τα ρεαλιστικότερα τριδιάστατα

πλέγματα, ενώ οι περισσότερες διαστάσεις σχετίζονται περισσότερο με αφηρημένες δομές κλάδων όπως η θεωρητική πληροφορική και τα μαθηματικά.

Παραμένοντας στις "ιδιοτροπίες" του πλέγματος, κανείς θα μπορούσε να κάνει διαχωρισμούς αναλόγως με την σχετική διάταξη των *spin*. Ενδεικτικές κατηγορίες είναι τα απλά **τετραγωνικά** ή **κυβικά πλέγματα** (square lattice), τα **τριγωνικά** (triangular lattice), τα **εξαγωνικά πλέγματα** (honeycomb lattice), κλπ..



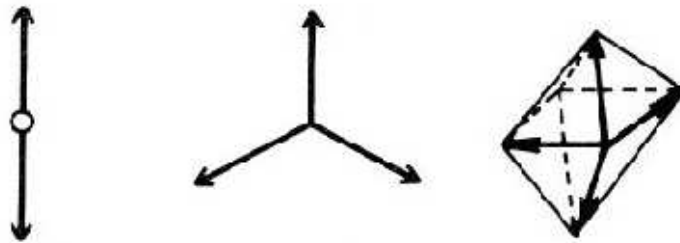
(α) Τετραγωνικό πλέγμα (β) Τριγωνικό πλέγμα (γ) Εξαγωνικό πλέγμα

Σχήμα 1.1: Παραδείγματα διδιάστατων πλεγμάτων

Η **πυκνότητα του πλέγματος** είναι επίσης ένας σημαντικός παράγων. Κατά κανόνα, βέβαια, το Potts καταπιάνεται με θέματα στερεάς κατάστασης, συνεπώς ένα πυκνό πρότυπο, όπου κάθε πλεγματοειδές σημείο καταλαμβάνεται από ένα *spin*, είναι καταλληλότερο. Παρόλα αυτά η βιβλιογραφία έχει αρκετές αναφορές σε διερευνήσεις αραιών μοντέλων dilute Potts model.

Περνώντας στα **δυναμικά χαρακτηριστικά** του πλέγματος, δηλ. στους τρόπους αλληλεπίδρασης των *spin* μπορούμε ξανά να διακρίνουμε αρκετές περιπτώσεις. Αν και η εργασία επικεντρώνεται σε δεσμούς δυο σημείων (two-point interactions) όπου κάθε *spin* αλληλεπιδρά άμεσα με τους γείτονές του, ενδιαφέρον παρουσιάζουν και πιο πολύπλοκες δυναμικές συμπεριφορές. Τέτοια παραδείγματα είναι οι αλληλεπιδράσεις πολλαπλών σημείων (multi-site interactions) όπου κάθε *spin* μπορεί να δημιουργήσει δεσμούς και με απώτερα στοιχεία, αλλά και πιο εξεζητημένες καταστάσεις, όπως τα πρότυπα πάγου *spin* (spin-ice models) όπου οι αλληλεπιδράσεις εκτείνονται με ακανόνιστο τρόπο μέσα στο πλέγμα, σταθερές ή μεταβαλλόμενες στη διάρκεια του χρόνου, κλπ..

Τέλος, ο ίδιος ο **αριθμός των καταστάσεων** που επιτρέπεται να λαμβάνουν τα *spin* είναι καθοριστική παράμετρος του μοντέλου, καθώς επηρεάζει στο μεγαλύτερο, ίσως, βαθμό το είδος της μετάβασης φάσης που υφίσταται το μοντέλο.



(α) $q = 2$, 1 διάσταση (β) $q = 3$, 2 διαστάσεις (γ) $q = 4$, 3 διαστάσεις

Σχήμα 1.2: Παραδείγματα q καταστάσεων σε $q - 1$ διαστάσεις

Κεφάλαιο 2

Προσομοιώσεις Monte Carlo

2.1 Εισαγωγή

Με μια πρόχειρη ματιά στη συνάρτηση επιμερισμού μιας κατάστασης γίνεται εμφανές πως προκειμένου να πραγματοποιήσουμε υπολογισμούς κάποιων παρατηρήσιμων ποσοτήτων του συστήματος (observable) απαιτείται η εξαντλητική ανάλυση ενός τεράστιου όγκου παραμέτρων και στοιχείων του. Αυτό, δυστυχώς, είναι κατά κανόνα πρακτικά αδύνατο να πραγματοποιηθεί σε εύλογες χρονικές κλίμακες. Γι' αυτό το λόγο καταφεύγουμε στη λύση των προσομοιώσεων Monte Carlo, δηλ. στην εκτίμηση (estimation) των παρατηρήσιμων μεγεθών μέσω δειγματοληψίας.

Στοιχείο-κλειδί για την αποτυχία ή επιτυχία μιας στατιστικής εκτίμησης ποσοτήτων είναι το κατά πόσο θα καταφέρουμε να επιλέξουμε ένα αντιπροσωπευτικό δείγμα των πιθανών καταστάσεων του συστήματος, δηλ. με τρόπο που να προσεγγίζει την επιλογή που θα έκανε η ίδια η φύση. Αυτή η διαδικασία επιλογής των 'σωστών' (ή 'σημαντικών') καταστάσεων που θα βελτιώσει την εκτίμησή μας, λέγεται importance-sampling. Σε περιπτώσεις όπως του μοντέλου Potts αυτό πραγματοποιείται μέσω της υλοποίησης μιας δυναμικής διαδικασίας η οποία θα εναλλάσσει τυχαία καταστάσεις έτσι ώστε, όταν επέλθει "ίσοροπία", οι πιθανότητες εμφάνισής τους να ακολουθούν την κατανομή Boltzmann.

2.2 Διαδικασίες Markov

Οι διαδικασίες Markov λύνουν το πρόβλημα της επιλογής σημαντικών καταστάσεων προκειμένου να προσομοιώσουμε μια αλληλουχία καταστάσεων που θα ακολουθεί την κατανομή Boltzmann. Περιληπτικά η λογική έχει ως εξής:

- Έστω το σύστημα βρίσκεται σε μια κατάσταση E_μ ,
- Η επιλογή της κατάστασης E_ν στην οποία τελικά θα μεταβεί το σύστημα είναι τυχαία, δηλ. κάθε φορά που το σύστημα θα βρίσκεται στην κατάσταση E_μ δεν θα μεταβαίνει κατ' ανάγκη στην ίδια κατάσταση E_ν .
- Συνεπώς, για κάθε δυνατή νέα κατάσταση E_ν του συστήματος υπάρχει πιθανότητα μετάβασης $P(\mu \rightarrow \nu)$.

Οι πιθανότητες μετάβασης $P(\mu \rightarrow \nu)$ πρέπει να ικανοποιούν κάποιες ιδιότητες:

- Να εξαρτώνται μόνο από τις λεπτομέρειες των καταστάσεων μ και ν και όχι από άλλες καταστάσεις από τις οποίες πέρασε το σύστημα

$$P(\mu \rightarrow \nu) = f(\mu, \nu) \tag{2.1}$$

- Να μην μεταβάλλονται στο χρόνο

$$\frac{dP(\mu \rightarrow \nu)}{dt} = 0 \quad (2.2)$$

- Το άθροισμα των πιθανοτήτων μετάβασης προς διαφορετικές υποψήφιες καταστάσεις να ισούται με τη μονάδα, ώστε να είναι βέβαιο ότι πάντα θα επιλέγεται με νέα κατάσταση

$$\sum_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu) = 1 \quad (2.3)$$

- Η πιθανότητα το σύστημα να παραμείνει στην ίδια κατάσταση $P(\mu \rightarrow \mu)$ δεν είναι κατ' ανάγκη 0

$$P(\mu \rightarrow \mu) = P \in [0, 1]$$

Εκτός από τις παραπάνω παρατηρήσεις και απαιτήσεις που αφορούν στις πιθανότητες μετάβασης $P(\mu \rightarrow \nu)$, μια διαδικασία Markov πρέπει συνολικά να ικανοποιεί δυο επιπλέον συνθήκες, την συνθήκη της *εργοδικότητας* και της *λεπτομερούς ισοζύγησης*:

Συνθήκη Εργοδικότητας Όλες οι καταστάσεις πρέπει να είναι προσβάσιμες από οποιαδήποτε τυχούσα κατάσταση ακόμη κι αν χρειαστεί η διαδικασία να 'τρέξει' για μεγάλο διάστημα.

Η συνθήκη αυτή πρακτικά μας δίνει την ευχέρεια να μηδενίζουμε πολλές πιθανότητες μετάβασης, αρκεί να εξασφαλίσουμε ότι ανάμεσα σε δυο καταστάσεις υπάρχει πάντα ένα μονοπάτι μη-μηδενικής πιθανότητας. Έτσι βεβαιώνουμε ότι καμία κατάσταση δεν θα αποκλειστεί πλήρως από την προσομοίωση.

Συνθήκη Λεπτομερούς Ισοζύγησης Κατά μέσο όρο στο σύστημα θα πρέπει να συμβαίνουν μεταβάσεις από την κατάσταση μ στην κατάσταση ν εξίσου συχνά με τις αντίστροφες μεταβάσεις, δηλ. από την ν στην μ .

Η συνθήκη αυτή μας εξασφαλίζει την συμφωνία με την κατανομή των καταστάσεων που επιθυμούμε, εν προκειμένω την κατανομή Boltzmann. Η μαθηματική διατύπωση έχει ως εξής: Αν οι καταστάσεις μ και ν έχουν βάρη Boltzmann p_{μ} και p_{ν} τότε οι πιθανότητες μετάβασης $P(\mu \rightarrow \nu)$ και $P(\nu \rightarrow \mu)$ συνδέονται με την εξίσωση

$$p_{\mu}P(\mu \rightarrow \nu) = p_{\nu}P(\nu \rightarrow \mu) \Leftrightarrow \frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{p_{\nu}}{p_{\mu}} \quad (2.4)$$

Λαμβάνοντας υπ' όψιν την έκφραση των p_{μ} και p_{ν} , καταλήγουμε στην εξίσωση

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\beta(E_{\mu} - E_{\nu})} \quad (2.5)$$

2.3 Ο πηγαίος κώδικας

Οι αλγόριθμοι προσομοίωσης που χρησιμοποιήθηκαν έχουν υλοποιηθεί στη γλώσσα προγραμματισμού C. Η βάση των υλοποιήσεων των αλγορίθμων Metropolis και Heat-bath ήταν εκείνη των Newman & Barkema [2] που τροποποιήθηκαν και επεκτάθηκαν στις D . Στις D διαστάσεις επεκτάθηκε επίσης η υλοποίηση του αλγορίθμου Swendsen-Wang του J. S. Wang [1].

Προς διευκόλυνση του αναγνώστη, και προκειμένου ο κώδικας να είναι διαθέσιμος στην ολότητά του, τα αρχεία που συνιστούν το τελικό πρόγραμμα έχουν παρατεθεί στο παράρτημα Α. Συνεπώς η ανάλυση που θα γίνει παρακάτω θα περιέχει αναφορές στα οικεία παραρτήματα των αρχείων πηγαίου κώδικα αντί να παρατίθεται ανάμεσα στις γραμμές του κειμένου ο ίδιος ο κώδικας.

2.4 Υπολογιστικός ορισμός συνοριακών συνθηκών στις D διαστάσεις

Η γενίκευση των αλγορίθμων στις D διαστάσεις πρακτικά ανάγεται στην γενίκευση του τρόπου με τον οποίον λογίζονται οι σχέσεις γειτνίασης ανάμεσα στα spin. Κατά την συνήθη πρακτική τα πλέγματα $N = L^D$ σημείων (όπου L η γραμμική διάσταση σε αριθμό πλεγματικών θέσεων, D ο αριθμός των διαστάσεων και N το σύνολο των πλεγματικών θέσεων) αναπαρίστανται με έναν μονοδιάστατο πίνακα N ακέραιων αριθμών. Έπειτα, η τοπολογία υλοποιείται μέσω των πράξεων που οδηγούν από ένα τυχαίο σημείο k στο επόμενο ή/και στο προηγούμενό του, δηλ. πραγματοποιούν την έννοια της φοράς σε μια ορισμένη διεύθυνση (ή διάσταση). Συνεπώς η διαδικασία αυτή δεν αφορά μόνο στο πλήθος των διαστάσεων αλλά και στο είδος των συνοριακών συνθηκών.

Στον κώδικα που παρατίθεται στο παράρτημα και χρησιμοποιήθηκε στις προσομοιώσεις, διακρίνονται οι δυο τύποι διαθέσιμων συνοριακών συνθηκών, που κωδικοποιούνται στο αρχείο common.h (παράρτημα A.1):

- Στις γραμμές 25-34 υλοποιούνται οι πράξεις των περιοδικών συνοριακών συνθηκών
 - Στις γραμμές 40-47 βρίσκονται αντίστοιχα οι πράξεις των ελικοειδών συνοριακών συνθηκών
- Ο τύπος των περιοδικών συνθηκών ορίζεται κατά τη μεταγλώττιση του κώδικα.

2.5 Χρήση των συνοριακών συνθηκών στον πηγαίο κώδικα

Οι ‘μακροεντολές’ που ορίστηκαν προηγουμένως για τις συνοριακές συνθήκες δίνουν ένα ενιαίο σχήμα που μπορεί να χρησιμοποιηθεί στους αλγορίθμους προσομοίωσης και καθιστούν τη συγγραφή των αλγορίθμων καθαυτών ανεξάρτητη από την επιλογή των οριακών συνθηκών.

Η διαδικασία εφαρμογής αυτού του σχήματος σε έναν αλγόριθμο είναι τετριμμένη:

- Στο αρχικό τμήμα του ορισμού των μεταβλητών του αλγορίθμου χρησιμοποιείται η μακροεντολή BOUNDARY_VARIABLES που ορίζει κάποιες ‘κρυφές’ μεταβλητές, αναγκαίες στα επόμενα βήματα.
- Στο τμήμα που χρειάζεται διέλευση ανάμεσα στους γείτονες ενός σημείου k , χρησιμοποιείται ένας απλός βρόχος της παρακάτω μορφής:

```

1   for (BOUNDARY_START; BOUNDARY_HOLDS; BOUNDARY_NEXT) {
2       s_forward = s [BOUNDARY_FORWARD(k)];
3       s_backward = s [BOUNDARY_BACKWARD(k)];
   }

```

Η τελευταία τετράδα γραμμών κάνει το εξής απλό: Στην πρώτη γραμμή δίνονται οι απαραίτητες οδηγίες (ανάλογα με τις συνοριακές συνθήκες που έχουμε επιλέξει) ώστε ο κώδικας να διατρέξει όλες τις διαστάσεις του πλέγματος. Μπαίνοντας, λοιπόν, στην καρδιά του βρόχου, βρισκόμαστε στην d -οστή διάσταση (ή διεύθυνση) από τις D διαστάσεις μας. Στο σημείο αυτό υπάρχουν δυο ακόμα δυνατές εντολές:

- Η BOUNDARY_FORWARD(k) που υπολογίζει τη θέση του ‘επόμενου’ (ή ‘εμπρός’) στοιχείου του k στην διεύθυνση d
- Η BOUNDARY_BACKWARD(k) που υπολογίζει τη θέση του ‘προηγούμενου’ (ή ‘πίσω’) στοιχείου του k στην διεύθυνση d

Με το πέρας αυτού του βρόχου έχουν σαρωθεί όλοι οι απαραίτητοι (εμπρός ή πίσω) γείτονες του στοιχείου k σε όλες τις διαστάσεις ή διευθύνσεις του πλέγματος.

2.6 Αλγόριθμος Heat-bath

2.6.1 Περιγραφή αλγορίθμου

Ο αλγόριθμος Heat-bath είναι ένας αλγόριθμος εναλλαγής μεμονωμένων spin (single-spin-flip). Ομοιάζει στη λογική με τον γνωστό αλγόριθμο Metropolis, με τη διαφορά ότι γίνεται πιο αποδοτικός ειδικά για μεγάλα q , γεγονός που τον καθιστά προτιμότερο στην περίπτωση της προσομοίωσης μοντέλων όπως το Potts.

Ο αλγόριθμος αποτελείται από τα παρακάτω βασικά βήματα:

1. Επιλέγουμε μια τυχαία θέση στο πλέγμα, έστω k .
2. Το k έχει spin $s_k = \mu \in \mathcal{Q}$, δηλ. βρισκόμαστε στην κατάσταση μ με ενέργεια E_μ .
3. Επιλέγουμε νέα τιμή spin $s_k = \nu \in \mathcal{Q}$ με πιθανότητα Boltzmann που ορίζει τη νέα κατάσταση ν με ενέργεια E_ν

$$P(\mu \rightarrow \nu) = \frac{e^{-\beta E_\nu}}{\sum_i^q e^{-\beta E_i}} \quad (2.6)$$

δηλ. ανεξάρτητη από την τρέχουσα κατάσταση $s_k = \mu$.

Το όνομα του αλγορίθμου σχετίζεται με τη διαδικασία επιλογής του νέου spin: Κάθε νέα τιμή spin έχει πιθανότητα επιλογής ανάλογη του βάρους Boltzmann, συνεπώς μπορεί κανείς μεταφορικά να πει ότι το καινούριο spin αντλείται από ένα ‘θερμό λουτρό’. Αυτό είναι και το κλειδί της αποδοτικότητάς του.

Η νέα τιμή n του spin στη θέση s_k μπορεί να ταυτίζεται με την προηγούμενη, δηλ. το πλεγματικό σημείο να μην αλλάξει τιμή. Επιπλέον, οι πιθανότητες επιλογής κάθε υποψήφιας κατάστασης n είναι κανονικοποιημένες ώστε να έχουν άθροισμα 1. Έτσι εξασφαλίζεται ότι κάποια από τις καταστάσεις θα επιλεγεί, δεδομένου ότι η γεννήτρια τυχαίων αριθμών δίνει τιμές στο διάστημα $[0, 1]$.

2.6.2 Υλοποίηση αλγορίθμου

Ένα πέρασμα (sweep) Heatbath περιλαμβάνει $N = L^D$ επαναλήψεις του αλγορίθμου Heatbath (heatbath.c, A.6) που μπορεί χονδρικά να χωριστεί σε τέσσερις ενότητες:

1. Γραμμή 16: Επιλέγεται ένα τυχαίο πλεγματικό σημείο k με spin s_k .
2. Γραμμές 18-34: Υπολογίζονται τα βάρη επιλογής για κάθε μία από τις q διαθέσιμες καταστάσεις αναλόγως με τις ήδη κατηλειμμένες καταστάσεις των γειτόνων.
3. Γραμμές 36-46: Επιλέγεται με βάση αυτά τα βάρη μια νέα κατάσταση s'_k .
4. Γραμμές 49-58: Αν η νέα κατάσταση s'_k είναι διαφορετική από την αρχική s_k ενημερώνεται το πλέγμα.

Στην ενότητα 2 αρχικά γίνεται μια καταμέτρηση του αριθμού των γειτόνων που καταλαμβάνουν κάθε μία από τις q καταστάσεις. Το αποτέλεσμα αυτής της καταμέτρησης καταχωρίζεται στον πίνακα state_freq συχνοτήτων που αποτελείται από q ακέραιους αριθμούς, όλοι αρχικοποιημένοι στο 0. Η δέσμευση της μνήμης για αυτόν τον πίνακα βρίσκεται στο main.c (A.2), γραμμή 179.

Κατόπιν υπολογίζονται τα βάρη επιλογής κάθε κατάστασης. Για ένα πλέγμα D διαστάσεων και 2 πλησιέστερους γείτονες ανά διάσταση, έχουμε $NN = 2D$ πλησιέστερους γείτονες (βλ. A.2, γραμμή 101). Επομένως, οι ακραίες περιπτώσεις για μια κατάσταση i είναι είτε κανένας γείτονας να μην βρίσκεται σε αυτήν την κατάσταση, είτε όλοι οι γείτονες να βρίσκονται σε αυτήν. Καθώς, δε, οι υπολογισμοί των εκθετικών είναι υπολογιστικά δαπανηροί, χρησιμοποιούμε τον βοηθητικό πίνακα weight_exp $2D + 1$ στοιχείων, με κάθε θέση a να αντιστοιχεί στον πραγματικό αριθμό $\exp(-\beta a)$.

2.7 Αλγόριθμος Swendsen-Wang

2.7.1 Περιγραφή αλγορίθμου

Ο αλγόριθμος Swendsen-Wang χωρίζει ολόκληρο το πλέγμα σε ομάδες (clusters) και κατόπιν αλλάζει την κατάσταση όλων των ομάδων, δίνοντας ένα τυχαίο spin στην καθεμία, ώστε όλα τα σημεία που ανήκουν σε μια ομάδα να λάβουν την ίδια τιμή. Η ακολουθία έχει ειδικότερα ως εξής:

1. Αρχικά θεωρούμε ότι υπάρχουν τόσες ομάδες όσες και τα σημεία του πλέγματος.
2. Επιλέγουμε με τη σειρά ένα προς ένα όλα τα σημεία του πλέγματος. Έστω ότι εν προκειμένω έχει επιλεγεί το στοιχείο s_k .
3. Εξετάζουμε έναν προς έναν όλους τους γείτονες του s_k , έστω s_j .
4. Αν τα δυο spin είναι ίδια, τότε δημιουργούμε έναν “δεσμό” ανάμεσά τους, δηλ. τα τοποθετούμε στην ίδια ομάδα, με πιθανότητα $p_{add} = 1 - e^{-\beta}$
5. Όταν ολοκληρωθεί η διαδικασία για όλα τα s_k και s_j , κάθε ένα από τα πλεγματοειδή σημεία ανήκει σε κάποια ομάδα.
6. Κάθε ομάδα παίρνει ένα τυχαίο spin $n \in \mathcal{Q}$, όχι κατ’ ανάγκη διαφορετικό από το προηγούμενο, και το επιβάλλει σε όλα τα spin που ανήκουν σε αυτήν.

2.7.2 Υλοποίηση αλγορίθμου

Ένα πέρασμα (sweep) Swendsen-Wang περιλαμβάνει μια πλήρη σάρωση όλου του πλέγματος $N = L^D$ (sw.c, A.7). Στόχος του αλγορίθμου είναι να χωρίσει το πλέγμα σε clusters και να αποδώσει σε κάθε cluster μια νέα τιμή spin. Οι οριακές περιπτώσεις είναι ένας cluster να περιέχει όλα τα πλεγματοειδή σημεία ή κάθε πλεγματοειδή σημείο να αποτελεί ένα cluster από μόνο του.

Το πρώτο πρόβλημα που αντιμετωπίζει κανείς είναι η ταυτοποίηση των clusters. Στην διαδρομή αυτού του αλγορίθμου, λοιπόν, κρίσιμο ρόλο παίζει ο πίνακας cluster που αποτελείται από N στοιχεία ορίζεται στο αρχείο main.c (A.2), γραμμή 168. Σημαντική κατά τη χρήση του πίνακα αυτού είναι η εξής σύμβαση/ιδιότητα: Σε κάθε θέση i του πίνακα (που αναφέρεται στην πλεγματοειδή θέση n) αντιστοιχίζεται μια πλεγματοειδή θέση m . Αν $n = m$, τότε το στοιχείο n εκπροσωπεί τον cluster υπ’ αριθμόν n . Αν $n \neq m$, τότε η πλεγματοειδή θέση ανήκει στον cluster m . Αναδρομικά, αν στην θέση m του πίνακα αντιστοιχίζεται η τιμή $p \neq m$, τότε ο m (αλλά και ο n) ανήκουν στον p , κ.ο.κ..

Προκειμένου να εξασφαλιστεί η συνέχεια της αλυσίδας που, όπως περιγράφηκε προηγουμένως, αναδρομικά ομαδοποιεί τα σημεία του πλέγματος, ορίζουμε μια φθίνουσα φορά στον τρόπο που οι αναφορές των cluster εμφανίζονται εντός του πίνακα. Δηλ., όταν έχουμε στη διάθεσή μας δυο στοιχεία a και b , και πρέπει να τα εντάξουμε στο ίδιο cluster, οφείλουμε να αποφασίσουμε αν το a θα ενταχθεί στο cluster του b , ή το αντίστροφο. Κατά σύμβαση, λοιπόν, εντάσσουμε το αριθμητικά μεγαλύτερο στοιχείο στο cluster του αριθμητικά μικρότερου.

Με αυτά κατά νου μπορούμε να καταταμήσουμε και πάλι τον κώδικα σε τρεις ενότητες:

- Γραμμές 15-17: Αρχικοποιείται ο πίνακας cluster ώστε κάθε πλεγματοειδή στοιχείο να συνιστά ένα cluster από μόνο του
- Γραμμές 20-43: Σαρώνεται όλο το πλέγμα και κάθε σημείο εντάσσεται στο ίδιο cluster με ένα από τα παράλληλα (δηλ. με ίδιο spin) γειτονικά spin με πιθανότητα $p_{add} = 1 - \exp(-\beta)$, όπως αυτή ορίζεται στο main.c (A.2), γραμμή 166.
- Γραμμές 46-59: Οι clusters καταμετρώνται και επαναριθμοδοτούνται με ακέραιους αριθμούς από το 0 έως το cluster_count - 1, καθώς η διαδικασία δημιουργίας τους που προηγήθηκε είχε σαν αποτέλεσμα αραιή διασπορά των ακέραιων ταυτοτήτων των clusters στο ευρύ διάστημα 0 έως $N - 1$.
- Γραμμές 61-69: Κάθε cluster παίρνει μια νέα τιμή spin με πιθανότητα $1/q$, η οποία επιβάλλεται σε κάθε ένα από τα πλεγματοειδή σημεία που το αποτελούν.

2.8 Αριθμητικοί υπολογισμοί

Έχοντας στο οπλοστάσιό μας τους αλγόριθμους προσομοίωσης του φυσικού μοντέλου, δε μένει παρά να υπολογίσουμε τα μεγέθη ενδιαφέροντος. Το κυρίως πρόγραμμα προσομοίωσης εκτελείται για έναν αριθμό βημάτων (steps), για κάθε ένα από τα οποία δίνει μια ενέργεια E_s και μαγνήτιση M_s του συστήματος. Για κάθε β που προσομοιώνουμε, παίρνουμε αυτά τα E_s και M_s και με βοηθητικά προγράμματα εφαρμόζουμε την κατάλληλη στατιστική επεξεργασία προκειμένου να εξάγουμε την εκτίμηση των τελικών μεγεθών που θα καταλήξουν στα γραφήματα.

Η ενέργεια E_s μετά από κάθε βήμα του αλγορίθμου στη θερμοκρασία της προσομοίωσης υπολογίζεται μάλλον εύκολα, με απ' ευθείας εφαρμογή της Χαμιλτονιανής της Εξ. (1.2):

$$E_s = \sum_{\langle ij \rangle} \delta(s_i, s_j) \quad (2.7)$$

Η μαγνήτιση σε κάθε βήμα μεταφέρεται στο πεδίο των υπολογισμών ελαφρώς διαφορετικά: Έστω spin N_i τα πλήθη των σημείων που βρίσκονται στην κατάσταση q_i . Αν N_{max} είναι το πλήθος των spin στην πολυπληθέστερη κατάσταση q_{max} τότε η μαγνήτιση του συστήματος υπολογίζεται από τη σχέση

$$M_s = N_{max} - \frac{N - N_{max}}{q - 1} \quad (2.8)$$

Έχοντας ένα αρκούντως μεγάλο πλήθος από ζεύγη (E_s, M_s) για ένα δεδομένο β , προχωρούμε στην στατιστική επεξεργασία και παίρνουμε τα παρακάτω μεγέθη (με τα αντίστοιχα σφάλματά τους) για το εν λόγω β , όπου $N = L^2$ το πλήθος των spin στο τετραγωνικό πλέγμα διάστασης L .

Μαγνήτιση ανά πλεγματοεικό σημείο

$$m = \frac{\langle |M_s| \rangle}{N} \quad (2.9)$$

Ενέργεια ανά δεσμό

$$e = \frac{\langle E_s \rangle}{2N} \quad (2.10)$$

Ειδική θερμότητα ανά δεσμό

$$c = \beta^2 \frac{\langle E_s^2 \rangle - \langle E_s \rangle^2}{2N} \quad (2.11)$$

Μαγνητική επιδεκτικότητα

$$\chi = N(\langle |M_s|^2 \rangle - \langle |M_s| \rangle^2) \quad (2.12)$$

Binder Cumulant

$$bc = \frac{\langle M_s^4 \rangle}{\langle M_s^2 \rangle^2} - 1 \quad (2.13)$$

Energy Cumulant

$$ec = \frac{\langle E_s^4 \rangle}{\langle E_s^2 \rangle^2} - 1 \quad (2.14)$$

2.9 Ανάλυση αποτελεσμάτων

Όπως τονίστηκε και στις πρώτες παραγράφους, τα αποτελέσματα της μελέτης που παρουσιάζονται είναι ως επί το πλείστον ποιοτικά. Παρόλα αυτά, με τα αριθμητικά αποτελέσματα που έχουμε στη διάθεσή μας έχει ενδιαφέρον να δει κανείς και κάποιες ποσοτικές εκτιμήσεις που ανακύπτουν φυσικά και αναφέρονται σε σημαντικά χαρακτηριστικά του συστήματος, όπως είναι η κρίσιμη θερμοκρασία και ο τύπος της μετάβασης φάσης.

Η πρώτη απ' ευθείας απεικόνιση του κρίσιμου σημείου γίνεται με γράφημα του Binder Cumulant (Εξ. (2.8)), καθώς το μέγεθος αυτό έχει την ιδιότητα οι καμπύλες για τα διάφορα L να διασταυρώνονται στο κρίσιμο σημείο, επιτρέποντας μια εκτίμησή του.

Ένας άλλος τρόπος είναι η προσαρμογή των ψευδοκρίσιμων θερμοκρασιών, δηλ. εκείνων των β για τα οποία η μαγνητική επιδεκτικότητα γίνεται μέγιστη, σε μια καμπύλη της μορφής

$$\beta_{pc}(L^{-1/\nu}; q) = \beta_{num}(q) + c(q) \cdot L^{-1/\nu} \quad (2.15)$$

Όσον αφορά στον τύπο της μετάβασης, σε υπολογιστικό επίπεδο οι μεταβάσεις πρώτης τάξης έχουν ένα επιπλέον χαρακτηριστικό που βοηθά να διαχωριστούν από της δεύτερης τάξης: το φαινόμενο της **μαγνητικής υστέρησης**. Προσομοιώνοντας για μικρό αριθμό sweeps με μαγνητισμένη αρχική κατάσταση η μετάβαση γίνεται σε διαφορετική θερμοκρασία απ' ό,τι αν ξεκινήσουμε από αμαγνήτιστη κατάσταση. Μάλιστα, το φαινόμενο γίνεται πιο έντονο για μεγάλα L και εντείνεται για μεγαλύτερα q .

2.10 Διενέργεια προσομοιώσεων

Με πυξίδα αυτές τις πληροφορίες είναι κανείς σε θέση να πραγματοποιήσει προσομοιώσεις και να εξαγάγει συμπεράσματα. Σκιαγραφώντας τον χαρακτήρα αυτής της διαδικασίας, στις παραγράφους που ακολουθούν περιέχονται προσομοιώσεις για διαφορετικά q .

Τα q για τα οποία προβλέπεται αναλυτικά μετάβαση δεύτερης τάξης:

- $q = 2$. Ο χαρακτήρας της περίπτωσης αυτής, όπως θα φανεί, είναι περισσότερο διερευνητικός και προπαρασκευαστικός, καθώς γίνεται μια αντιπαραβολή με το πρότυπο Ising. Εδώ δοκιμάζεται και ο αλγόριθμος Heatbath.
- $q = 3$. Η μετάβαση φάσης αναμένεται να είναι αμιγώς συνεχής, συνεπώς αξίζει να συγκρίνει κανείς με την ήδη γνωστή περίπτωση του $q = 2$.
- $q = 4$. Καθώς πρόκειται για το μεταίχμιο ανάμεσα στις μεταβάσεις πρώτης και δεύτερης τάξης, αξίζει να μελετηθεί η συμπεριφορά του μοντέλου, ώστε να διαπιστωθεί πως μεταβάλλεται η εικόνα της εξέλιξης του συστήματος.

Τα q στα οποία αναμένεται μετάβαση πρώτης τάξης:

- $q = 5$. Ομοίως με την περίπτωση του $q = 4$, πρόκειται για μια οριακή περίπτωση, αυτή τη φορά με αναμενόμενα τα χαρακτηριστικά της πρώτης τάξης.
- $q = 6$. Οι δυσκολίες που αντιμετωπίζει κανείς στην ιδιόμορφη περίπτωση του $q = 6$ οδηγούν στη μετριοπαθή ανάπτυξη σε μεγαλύτερα q .
- $q = 10$. Τα στοιχεία πρώτης τάξης είναι έντονα, αλλά λόγω των απαγορευτικά μεγάλων χρόνων προσομοίωσης, θα παρουσιαστούν μόνο καμπύλες υστέρησης μαγνήτισης.

Κεφάλαιο 3

Δυο καταστάσεις ($q = 2$)

3.1 “Επιστροφή” στο μοντέλο Ising

Η περίπτωση του $q = 2$ σε τετραγωνικό πλέγμα μπορεί να θεωρηθεί μάλλον γνωστή. Είναι η συνθήκη με την οποία το μοντέλο Potts “έκφυλιζεται” στο Ising, όπως είναι αναμενόμενο, αν αναλογιστεί κανείς την ιστορική πορεία και την μαθηματική θεμελίωση των δυο μοντέλων. Ανακαλώντας την Χαμιλτονιανή \mathcal{H} του Potts από την Εξ. (1.2) και την \mathcal{H}_I του Ising από την Εξ. (1.1) παρατηρούμε ότι το άθροισμα της συνάρτησης Kronecker μπορεί να γραφεί ισοδύναμα ως εξής:

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= -\mathcal{J} \sum_{\langle ij \rangle} \delta(s_i, s_j) \\ &= -\mathcal{J} \sum_{\langle ij \rangle} \frac{s_i \cdot s_j + 1}{2} \\ &= -\frac{1}{2} \mathcal{J} \sum_{\langle ij \rangle} s_i \cdot s_j - \frac{1}{2} \mathcal{J} \sum_{\langle ij \rangle} 1 \\ &= \frac{1}{2} \mathcal{H}_I - \frac{\mathcal{J}N}{2}\end{aligned}$$

Ευλόγως περιμένει, λοιπόν, κανείς τα κρίσιμα χαρακτηριστικά των δυο μοντέλων να παραμείνουν ίδια με μια αριθμητική διαφορά στην κρίσιμη θερμοκρασία κατά έναν παράγοντα 2. Ειδικότερα, στο μοντέλο Ising το κρίσιμο σημείο υπολογίζεται αναλυτικά

$$\beta_{c,I} = \frac{1}{2} \ln(1 + \sqrt{2}) \approx 0.4407$$

ενώ σύμφωνα με την εξ. (1.19) στο Potts

$$\beta_c(2) = \ln(1 + \sqrt{2}) = 2\beta_{c,I} \approx 0.8813 \quad (3.1)$$

Τα παραπάνω καθιστούν την περίπτωση $q = 2$ ιδανική για επαλήθευση των αριθμητικών και ποιοτικών αποτελεσμάτων της διερεύνησης που θα ακολουθήσει, ώστε κατόπιν να γίνει η ανάπτυξη σε μεγαλύτερα q .

3.2 Αναζήτηση του κρίσιμου σημείου με Heat-bath

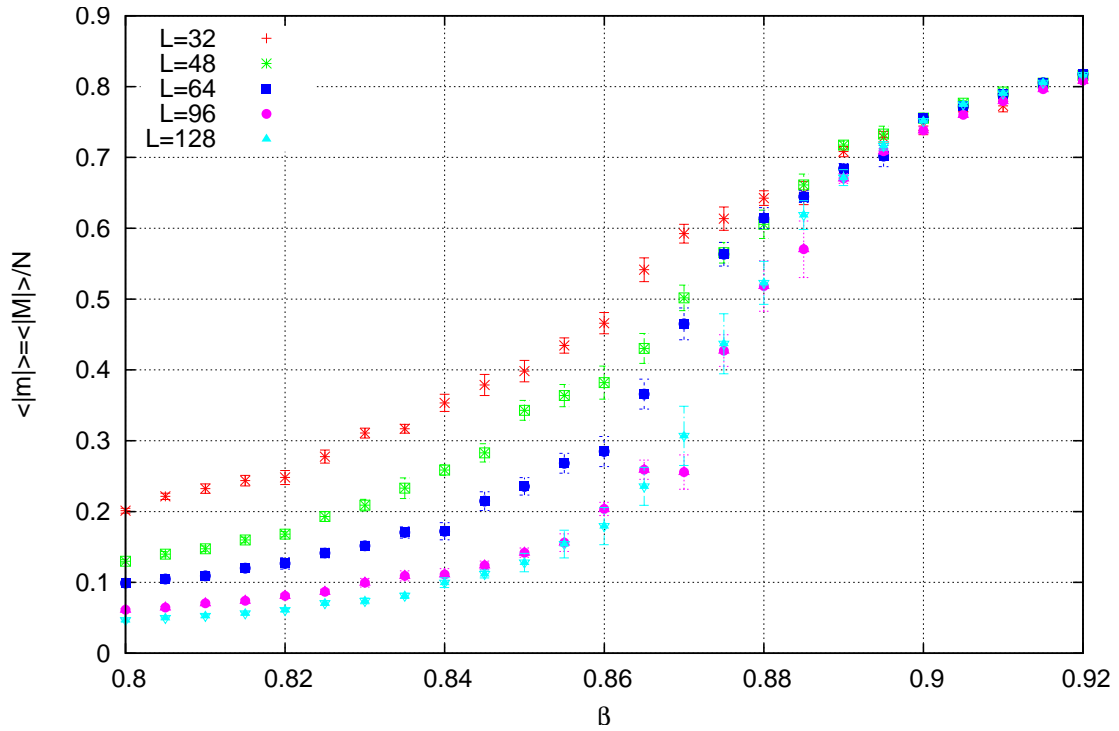
Η πρώτη σειρά προσομοιώσεων πραγματοποιήθηκε με τον αλγόριθμο Heat-bath σε μια περιοχή γύρω από το $\beta_c(2) \approx 0.8813$ (εξ. (3.1)) με 9.6×10^4 sweeps. Τα αποτελέσματα για $L = 32, 48, 64, 96, 128$ συνοψίζονται στα ακόλουθα γραφήματα της παραμέτρου τάξης m (Σχ. 3.1), δηλ. της απόλυτης μαγνήτισης ανά πλεγματοειδές σημείο, της ενέργειας ανά δεσμό e (Σχ. 3.2), της ειδικής θερμότητας c (Σχ. 3.5), της μαγνητικής επιδεκτικότητας χ (Σχ. 3.6) και των cumulants της ενέργειας (Σχ. 3.4) και της μαγνήτισης (Σχ. 3.3) συναρτήσει της ανηγμένης θερμοκρασίας β .

Με μια πρώτη ματιά στο γράφημα της μαγνήτισης (Σχ. 3.1) αξίζει να σημειωθούν κάποια στοιχεία:

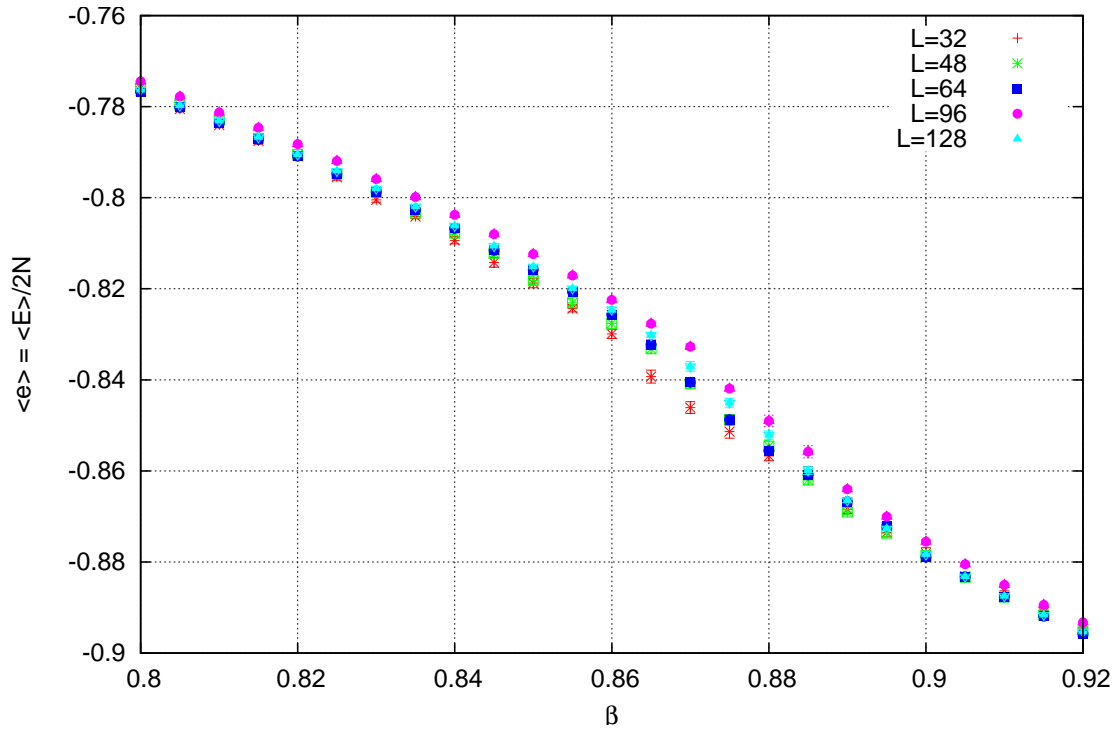
- Η γραφική παράσταση χωρίζεται σε τρεις περιοχές, όπως ήταν αναμενόμενο, δηλ. (I) στην πρώτη περιοχή της πλήρους αταξίας, (II) στην στενότερη, κρίσιμη περιοχή μετάβασης φάσης και (III) στην περιοχή της τάξης.
- Η μετάβαση φάσης φαίνεται να γίνεται με συνεχή τρόπο (δηλ. δεύτερης τάξης) στο αναμενόμενο $\beta_c(2) \approx 0.8813$.
- Στην στενά κρίσιμη περιοχή, δηλ. για $\beta \in (0.8, 0.9)$, τα σφάλματα είναι σημαντικά σε αντίθεση με τις δυο άλλες περιοχές, γεγονός που υποβαθμίζει και την ποιοτική μορφή της καμπύλης.
- Στις περιοχές (I) και (II) οι καμπύλες των διαφορετικών L έχουν μια συστηματική μετατόπιση, με τα μεγάλα L να προσεγγίζουν καλύτερα την πραγματική συμπεριφορά του συστήματος.
- Στην περιοχή (III) τα σημεία των καμπυλών ταυτίζονται.

Σε ό,τι αφορά τα υπόλοιπα γραφήματα

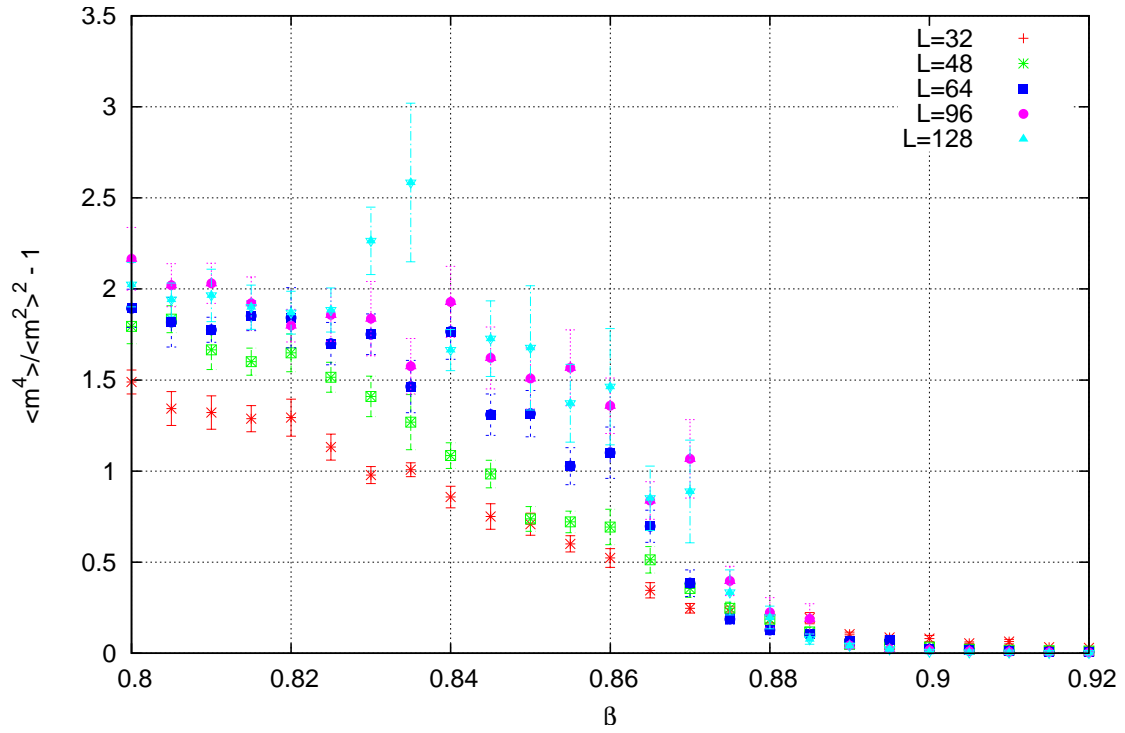
- Όλα ποιοτικά παρουσιάζουν τις αναμενόμενες εικόνες στο εύρος των β που πραγματοποιήθηκαν οι προσομοιώσεις.
- Η ενέργεια e παρουσιάζει πολύ μικρά σφάλματα σε αντίθεση με τα άλλα μεγέθη, καθώς πρόκειται για στατιστικό πρώτης τάξης.
- Τα σφάλματα των εκτιμώμενων ποσοτήτων ανώτερης τάξης, δηλ. των c , χ , Binder Cumulant και Energy Cumulant είναι τόσο μεγάλα που οριακά επιτρέπουν να αναδειχθούν κάποια βασικά στοιχεία των γραφημάτων.



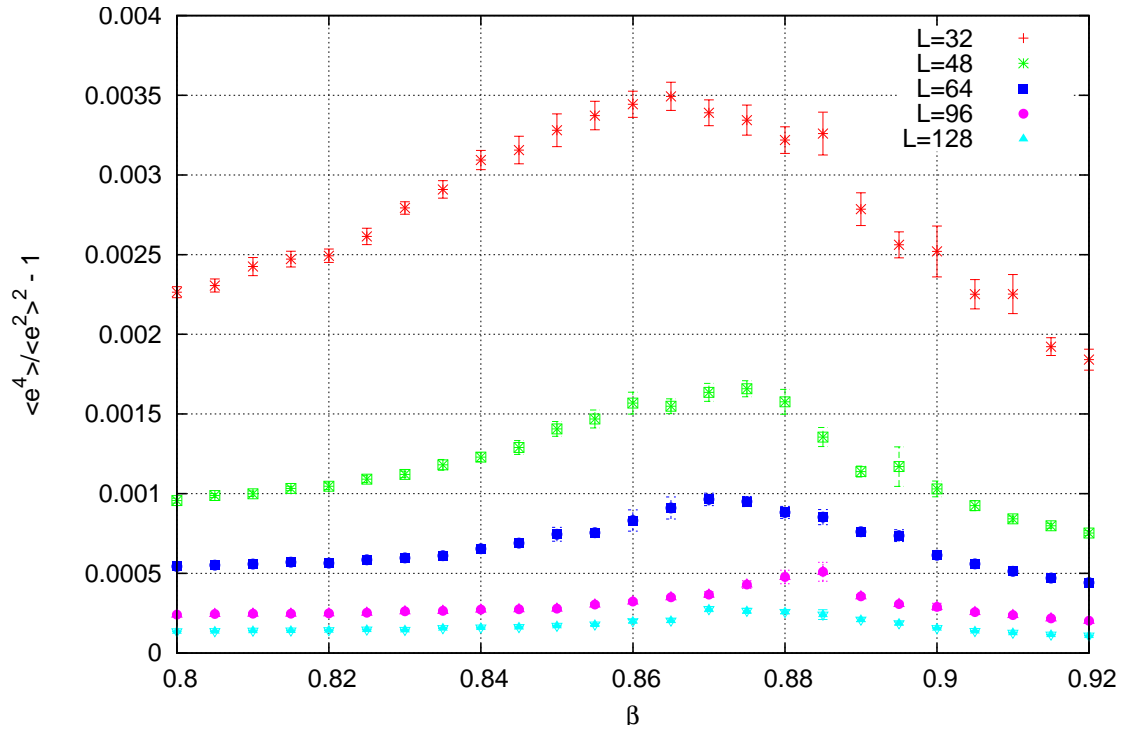
Σχήμα 3.1: Μαγνήτιση για $q = 2$ με Heatbath, 9.6×10^4 sweeps



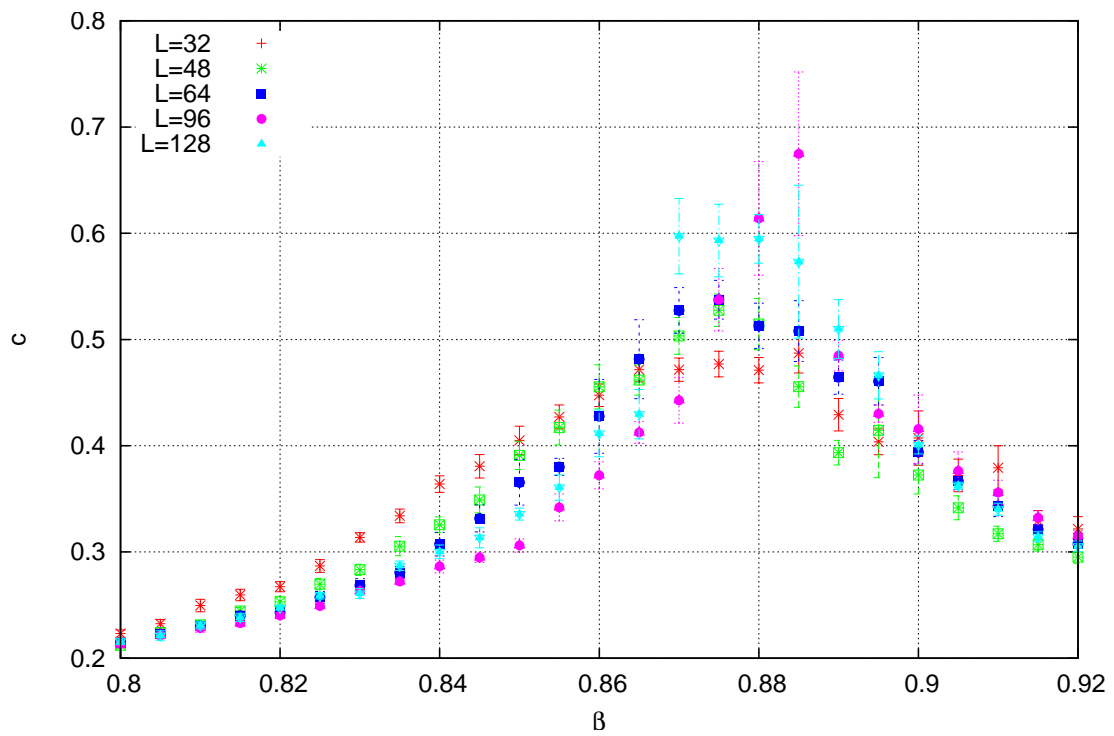
Σχήμα 3.2: Ενέργεια ανά δεσμό για $q = 2$ με Heatbath, 9.6×10^4 sweeps



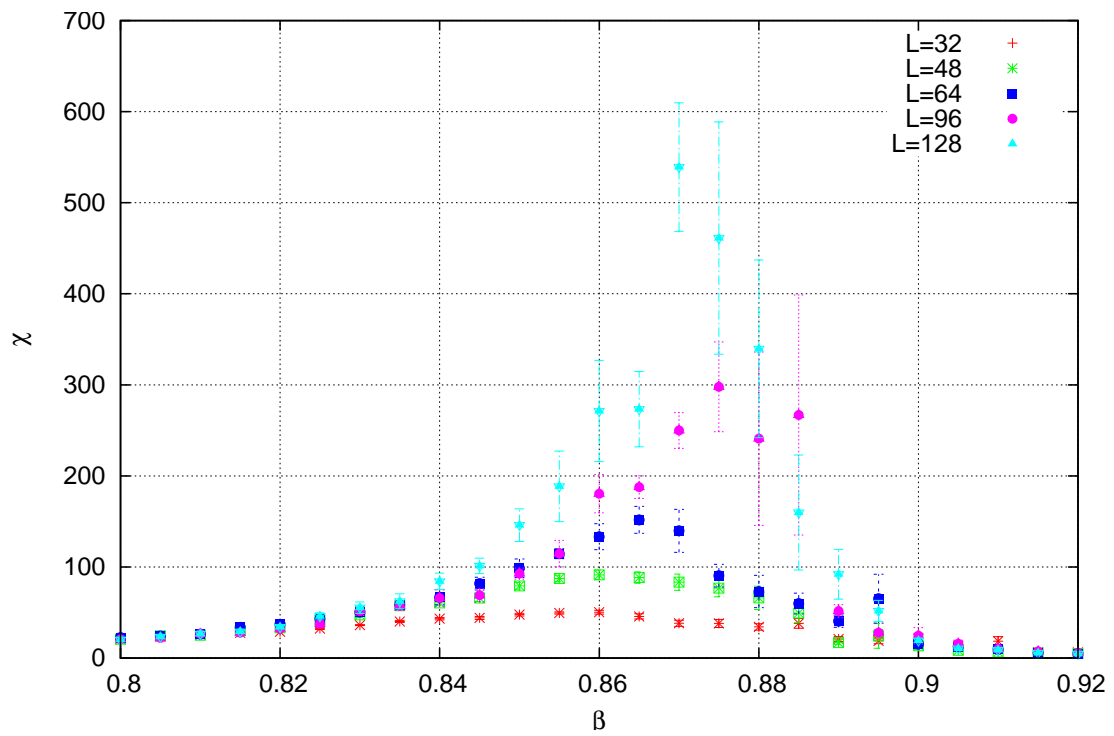
Σχήμα 3.3: Binder Cumulant για $q = 2$ με Heatbath, 9.6×10^4 sweeps



Σχήμα 3.4: Energy Cumulant για $q = 2$ με Heatbath, 9.6×10^4 sweeps



Σχήμα 3.5: Ειδική θερμότητα για $q = 2$ με Heatbath, 9.6×10^4 sweeps



Σχήμα 3.6: Μαγν. επιδεκτικότητα για $q = 2$ με Heatbath, 9.6×10^4 sweeps

3.3 Διερεύνηση σφαλμάτων στην κρίσιμη περιοχή

Οι αποκλίσεις που παρουσιάζουν οι μετρήσεις στην κρίσιμη περιοχή σχετίζονται με μια σειρά παραμέτρων της προσομοίωσης, βασικότερες εκ των οποίων είναι οι παρακάτω:

1. Το πλήθος των επαναλήψεων (sweeps) της προσομοίωσης
2. Το μέγεθος του πλέγματος L
3. Ο αλγόριθμος προσομοίωσης (εδώ Heatbath)

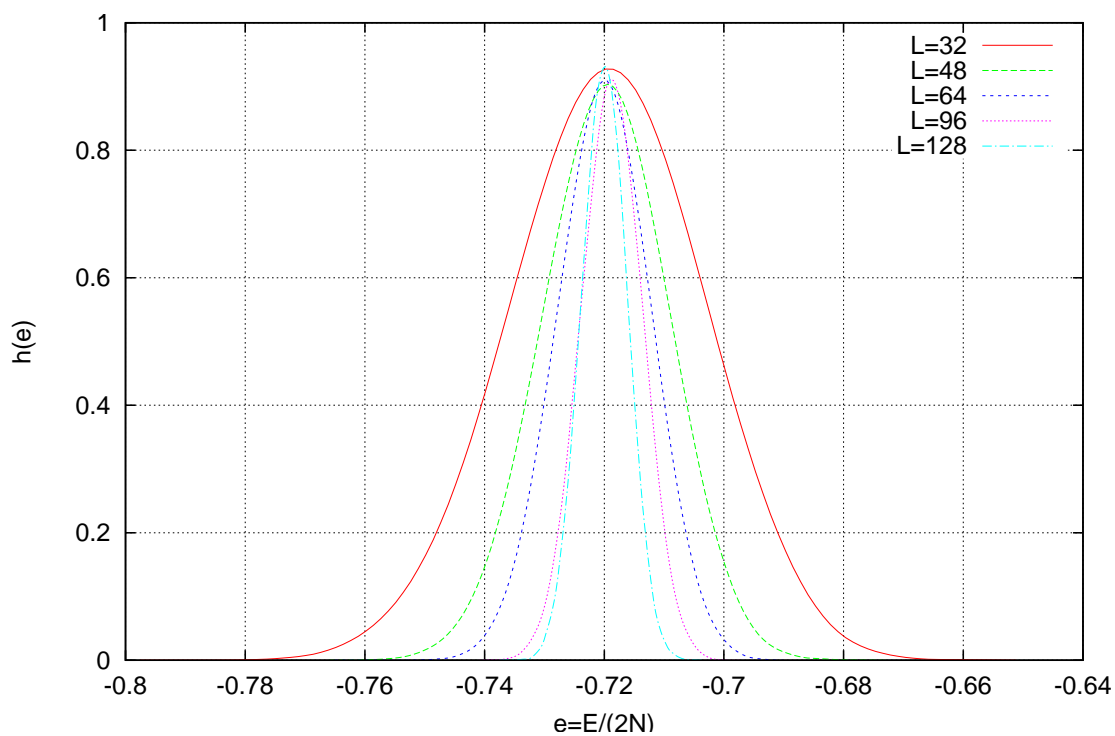
Εξετάζοντας μια προς μια αυτές τις παραμέτρους έχει αξία να δούμε τις λεπτομέρειες κάποιων χαρακτηριστικών σημείων της προσομοίωσης διαλέγοντας τρία β , καθένα αντιπροσωπευτικό για μια από τις τρεις περιοχές της γραφικής παράστασης (Πίνακας 3.1). Στις λεπτομέρειες που αξίζουν ανάλυσης ανήκουν τα ιστογράμματα ενέργειας e και μαγνήτισης m και ο ολοκληρωμένος χρόνος αυτοσυσχέτισης τ_{int} .

Περιοχή	Κατάσταση	Αντιπροσωπευτικό β
Περιοχή I	Αμαγνήτιστη	$\beta = 0.70$
Περιοχή II	Κρίσιμη	$\beta = 0.88$
Περιοχή III	Μαγνητισμένη	$\beta = 1.10$

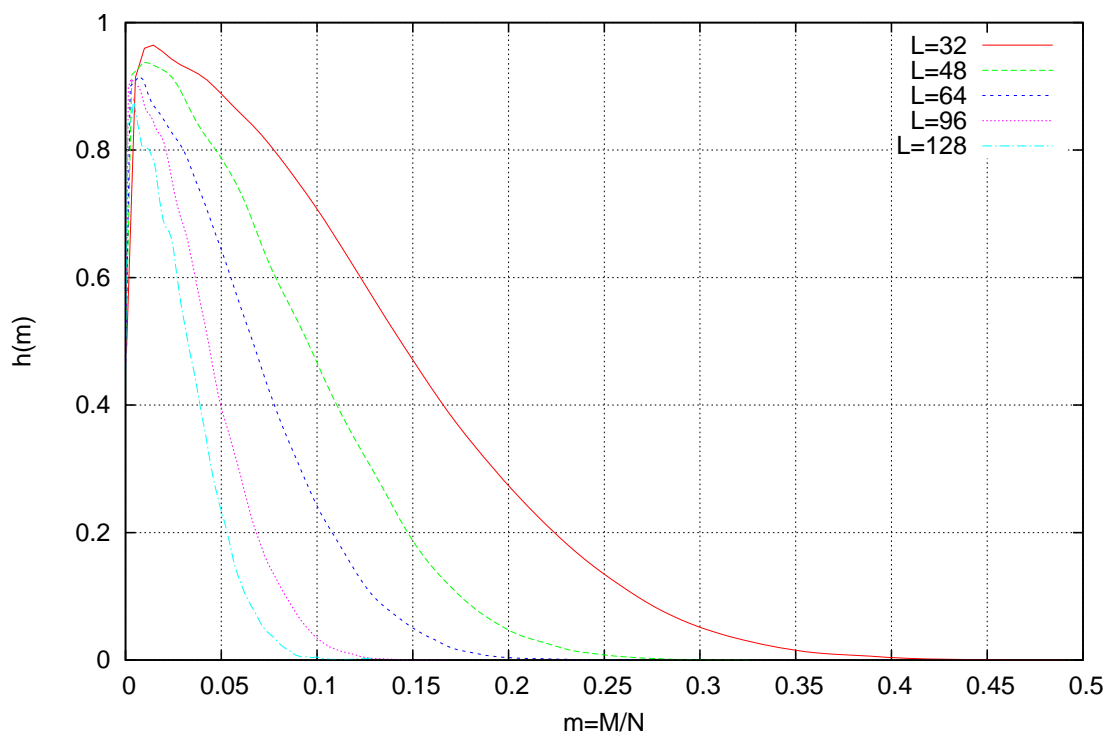
Πίνακας 3.1: Αντιπροσωπευτικές περιοχές μαγνήτισης για Heatbath, $q = 2$

Στο γράφημα 3.7 για την περιοχή (I), η ενέργεια φαίνεται να κυμαίνεται γύρω από μια ακραία, χαμηλή τιμή (-0.72). Όπως αναδεικνύεται και στα υπόλοιπα γραφήματα, για αυξανόμενα L η διασπορά των μετρήσεων μικραίνει. Αντίστοιχα, η μαγνήτιση κυμαίνεται γύρω από το 0, καθώς βρισκόμαστε σε μεγάλη θερμοκρασία (Σχ. 3.8).

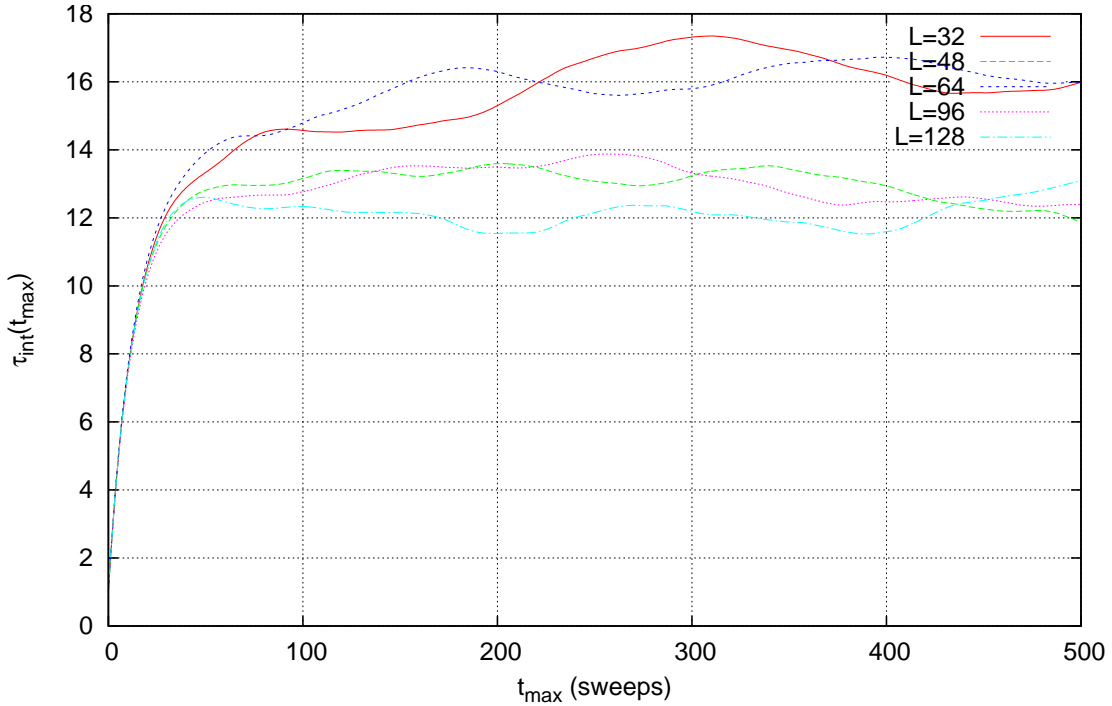
Ο τ_{int} (Σχ. 3.9) κυμαίνεται ανάμεσα σε 12 έως 16 sweeps, δηλ. πρακτικά δεν μεταβάλλεται συναρτήσει του L . Δεδομένου, λοιπόν, ότι έχουμε μια ανεξάρτητη μέτρηση ανά 24-32 sweeps (το διπλάσιο του χρόνου αυτοσυσχέτισης) και ότι οι προσομοιώσεις περιελάμβαναν 9.6×10^4 sweeps παίρνουμε χονδρικά 3000-4000 πραγματικά ανεξάρτητες μετρήσεις.



Σχήμα 3.7: Περιοχή (I), Ιστόγρ. ενέργειας για $q = 2$, $\beta = 0.7$, Heatbath, 9.6×10^4 sweeps



Σχήμα 3.8: Περιοχή (I), Ιστόγρ. μαγνήτισης για $q = 2$, $\beta = 0.7$, Heatbath, 9.6×10^4 sweeps



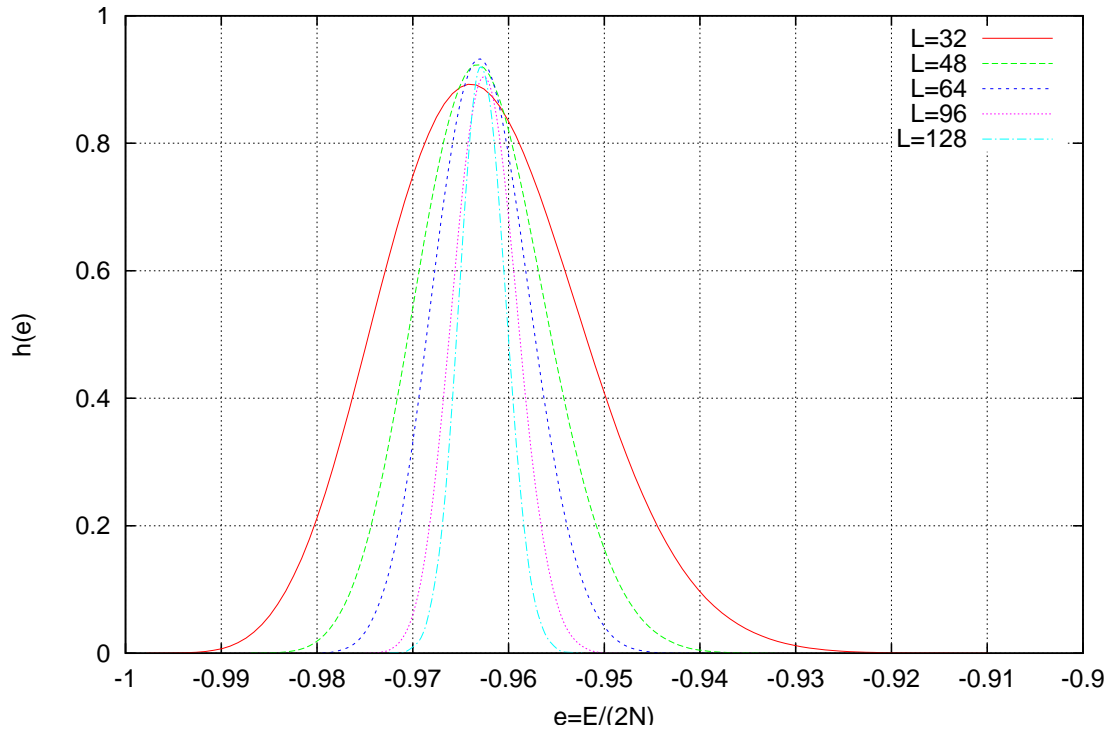
Σχήμα 3.9: Περιοχή (I), Ολοκληρ. χρόνος αυτοσυσχέτισης για $q = 2$, $\beta = 0.7$, Heatbath, 9.6×10^4 sweeps

Στην περιοχή (III) τα συμπεράσματα ομοιάζουν με εκείνα της περιοχής (I), με 3 επιπλέον με παρατηρήσεις:

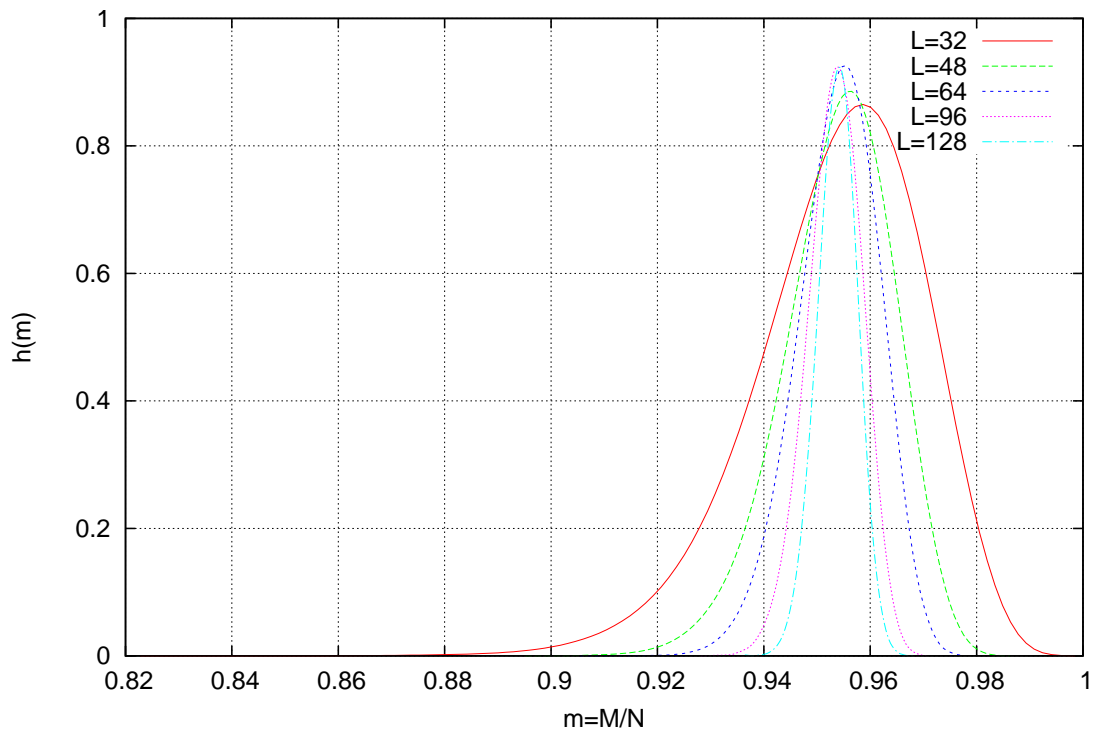
- Οι τιμές της μαγνήτισης (Σχ. 3.14) είναι συσσωρευμένες γύρω από μια τιμή πολύ κοντά στο 1, δηλ. στην μαγνητισμένη φάση.
- Το ιστόγραμμα της ενέργειας (Σχ. 3.13) έχει μετατοπιστεί προς τη χαμηλότερη τιμή $e \approx 0.965$
- Όπως και στην αμαγνήτιστη φάση, μακριά από την κρίσιμη περιοχή, έτσι και στην μαγνητισμένη, ο ολοκληρωμένος χρόνος αυτοσυσχέτισης (Σχ. 3.15) είναι πολύ χαμηλός (4.0 έως 5.5) και ανεξάρτητος από το L . Ένας νέος πρόχειρος υπολογισμός με αυτά τα στοιχεία μας δίνει 17500-24000 ανεξάρτητες μετρήσεις!

Τα πράγματα διαφοροποιούνται στην κρίσιμη περιοχή (II). Οι τ_{int} αποκλίνουν χαρακτηριστικά, με τα μεγάλα L να παρουσιάζουν όλο και μεγαλύτερους τ_{int} . Αυτή είναι άλλωστε και η αιτία των μεγάλων σφαλμάτων που παρατηρήθηκαν στην κρίσιμη περιοχή των αρχικών γραφημάτων. Με όμοιους υπολογισμούς εκτιμούμε 35 (για $L = 128$) έως 480 (για $L = 32$) ανεξάρτητες μετρήσεις.

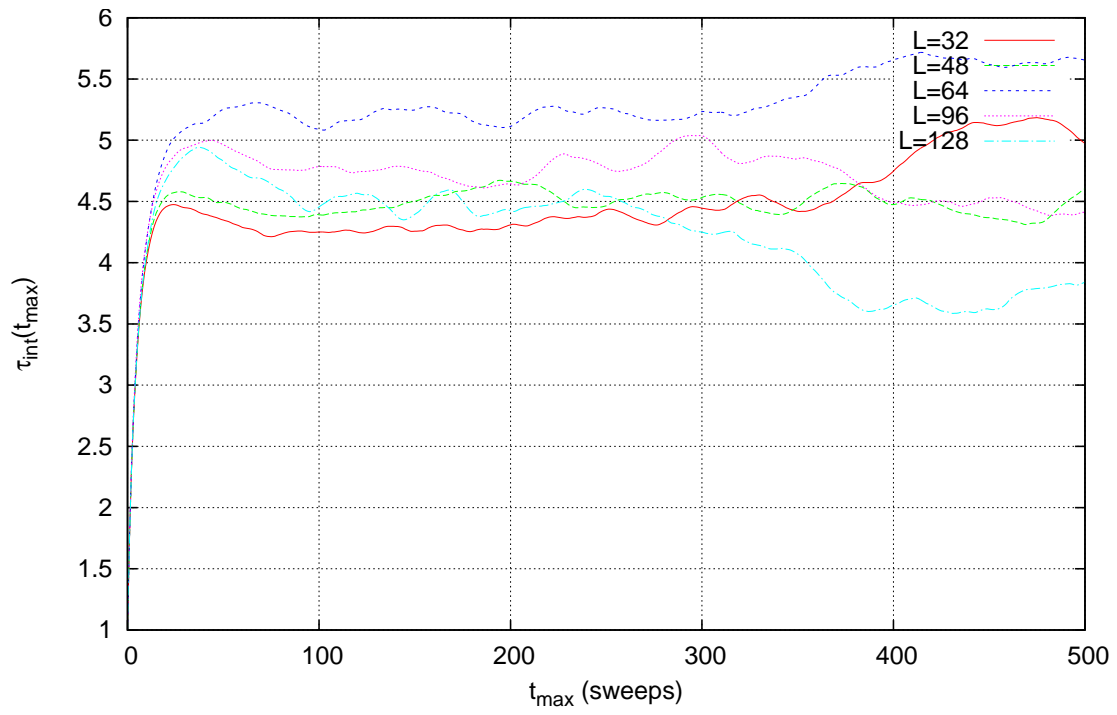
Πριν το κλείσιμο αυτής της παραγράφου είναι σκόπιμο να δούμε πώς αποτυπώνεται η έννοια του χρόνου εργοδικότητας στην χρονοσειρά της μαγνήτισης. Το γράφημα 3.16 που αφορά σε $L = 128$ με $\beta = 0.8813$ είναι ιδιαίτερα αποκαλυπτικό: Μπορεί να χωριστεί χονδρικά σε 6 τμήματα των 10.000 sweeps, κατά τη διάρκεια καθενός από τα οποία το σύστημα παραμένει σε μια από τις δυο καταστάσεις (τάξης και αταξίας) και κατόπιν μεταπηδά στην άλλη.



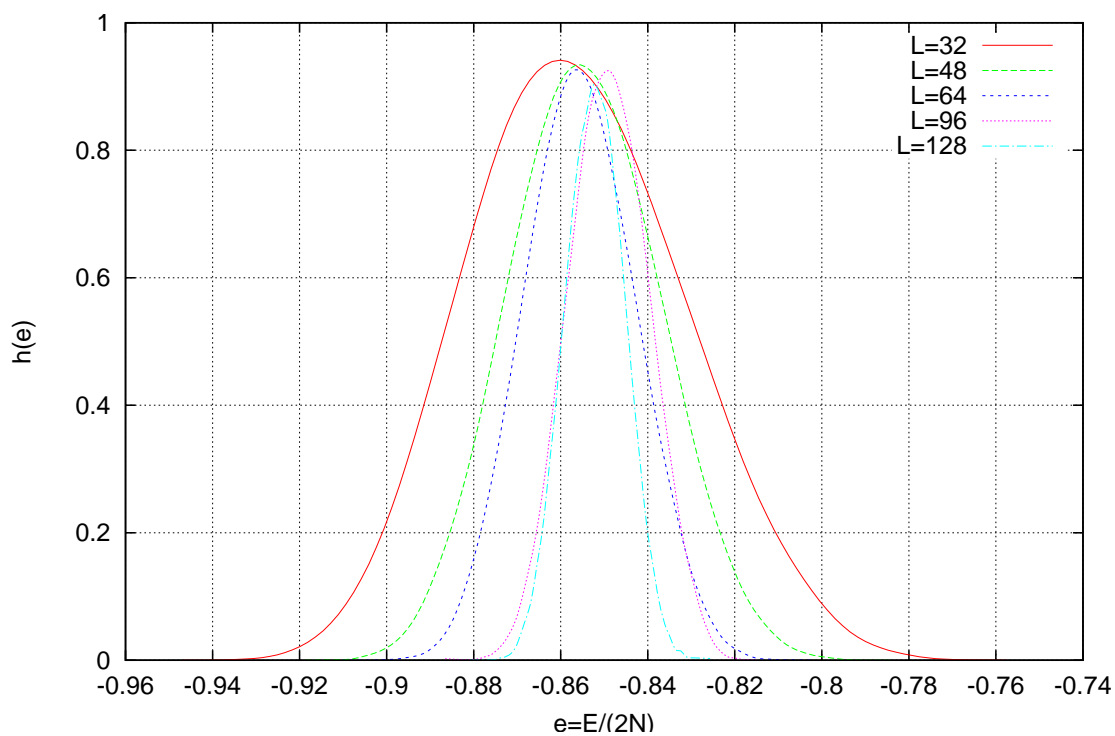
Σχήμα 3.10: Περιοχή (III), Ιστόγρ. ενέργειας για $q = 2$, $\beta = 1.1$, Heatbath, 9.6×10^4 sweeps



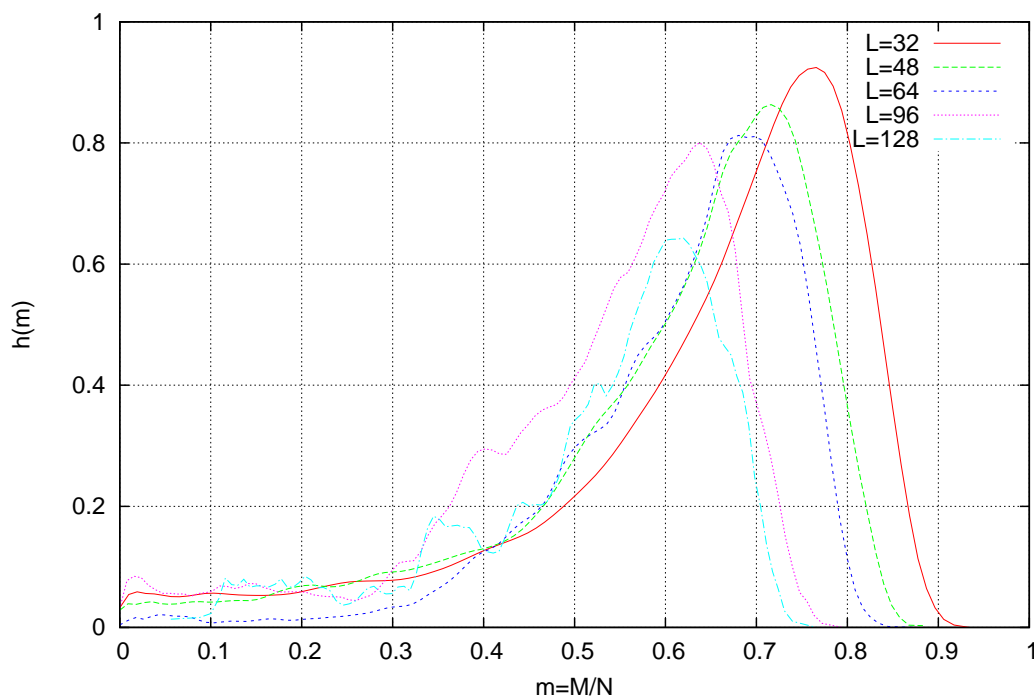
Σχήμα 3.11: Περιοχή (III), Ιστόγρ. μαγνήτισης για $q = 2$, $\beta = 1.1$, Heatbath, 9.6×10^4 sweeps



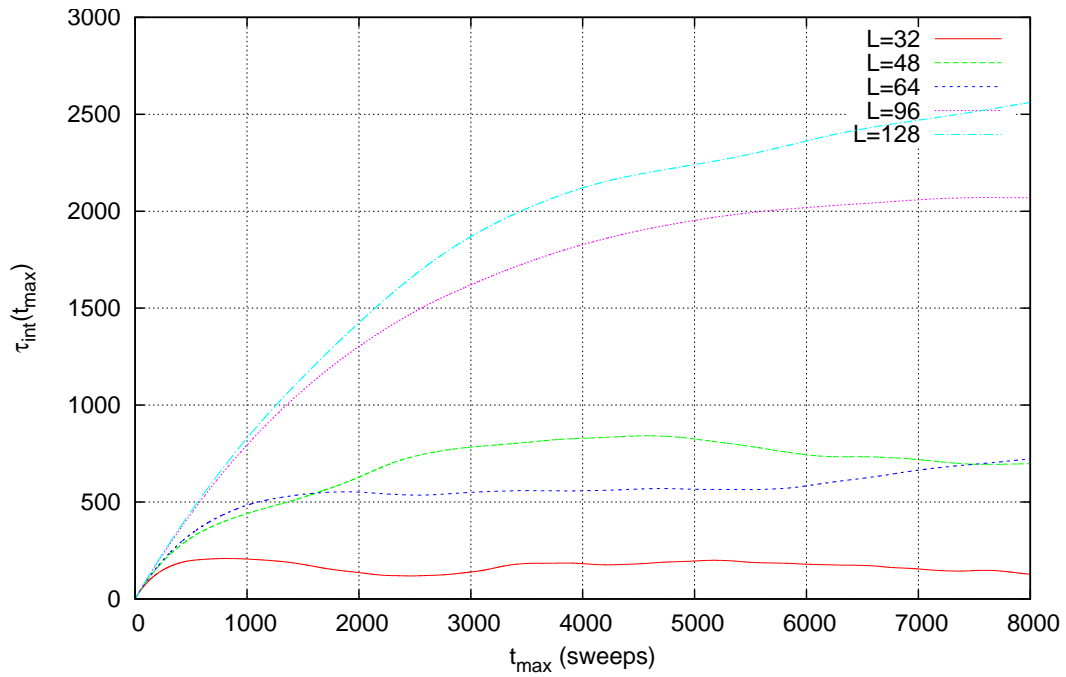
Σχήμα 3.12: Περιοχή (III), Ολοκληρ. χρόνος αυτοσυσχέτισης για $q = 2$, $\beta = 1.1$, Heatbath, 9.6×10^4 sweeps



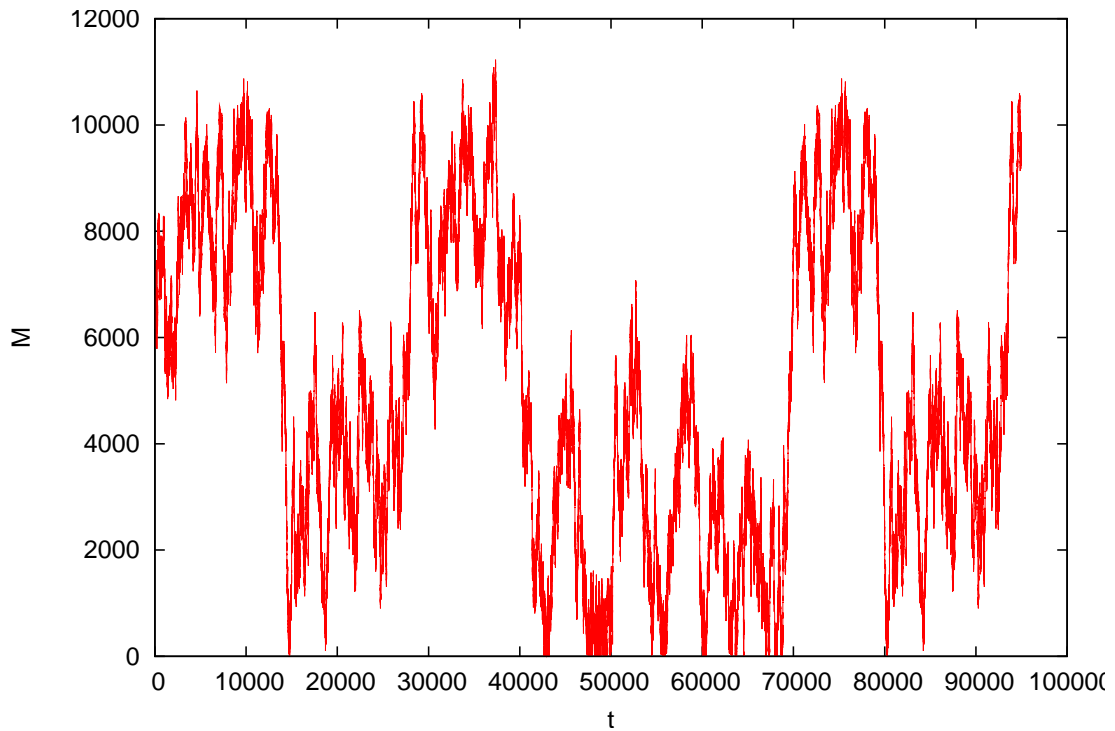
Σχήμα 3.13: Περιοχή (II), Ιστόγρ. ενέργειας για $q = 2$, $\beta = 0.88$, Heatbath, 9.6×10^4 sweeps



Σχήμα 3.14: Περιοχή (II), Ιστόγρ. μαγνήτισης για $q = 2$, $\beta = 0.88$, Heatbath, 9.6×10^4 sweeps



Σχήμα 3.15: Περιοχή (II), Ολ. χρόνος αυτοσυσχέτισης, $q = 2$, $\beta = 0.88$, Heatbath, 9.6×10^4 sweeps



Σχήμα 3.16: Περιοχή (II), Χρονοσειρά μαγνήτισης για $q = 2$, $\beta = 0.88$, Heatbath, 9.6×10^4 sweeps, $L = 128$

3.4 Η επικράτηση του αλγόριθμου Swendsen-Wang

Πριν προχωρήσει κανείς στη μελέτη των κρίσιμων παραμέτρων συστημάτων μεγαλύτερων L και q (που απαιτούν υπολογιστικά πιο δαπανηρές προσομοιώσεις), έχει αξία να δοκιμάσει συγκριτικά την απόδοση του cluster αλγόριθμου Swendsen-Wang (S-W). Αποφεύγοντας τετριμμένες επαναλήψεις, και κατόπιν δοκιμαστικών προσομοιώσεων που παραλείπονται χάριν οικονομίας, παρατίθενται τα αποτελέσματα των μετρήσεων για $L = 32, 48, 64, 96, 128, 192, 256$ και 9.6×10^4 sweeps με τον αλγόριθμο S-W.

Σε όλα τα γραφήματα ήδη βλέπουμε την συρρίκνωση των σφαλμάτων, συνεπώς την αναβάθμιση της ακρίβειας, την ποιοτική εξομάλυνση των καμπυλών και την τάση προσέγγισης των πραγματικών καμπυλών ($L \rightarrow \infty$) για αυξανόμενα L .

Στο γράφημα του Binder Cumulant (Σχ. 3.18) οι καμπύλες διασταυρώνονται εντός της στενής περιοχής

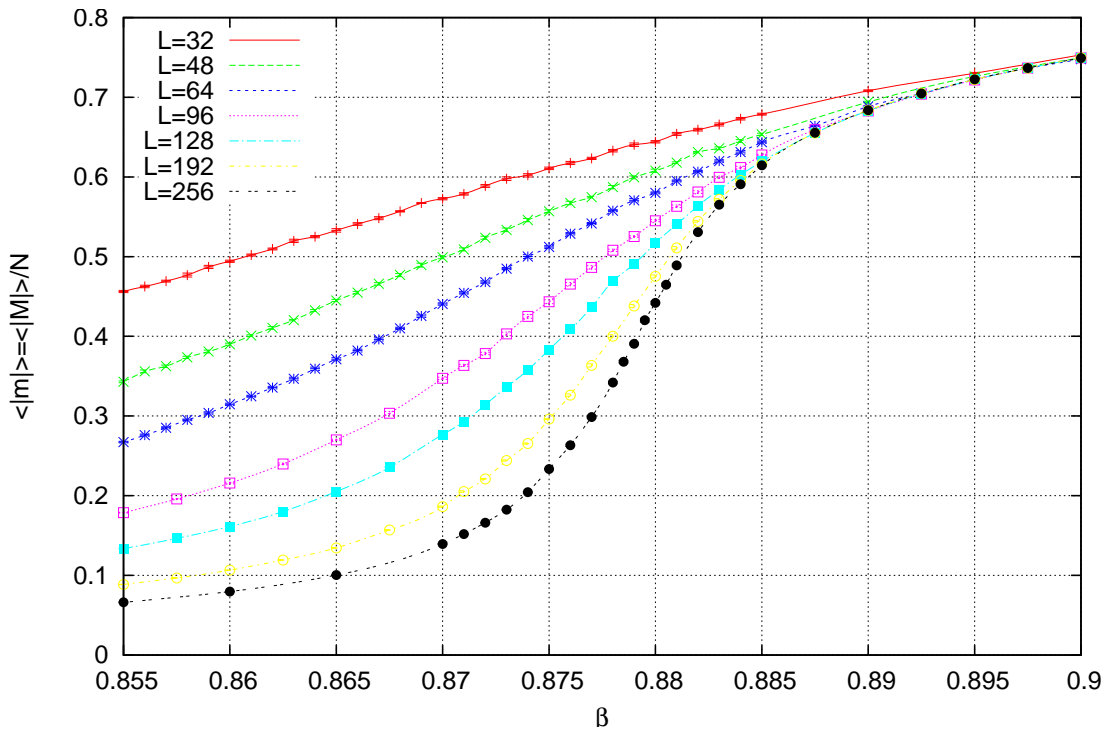
$$\beta_{binder}(2) \in [0.8805, 0.8825] \quad (3.2)$$

εντός της οποίας άλλωστε βρίσκεται το θεωρητικό κρίσιμο σημείο $\beta_c(2) \approx 0.8813$.

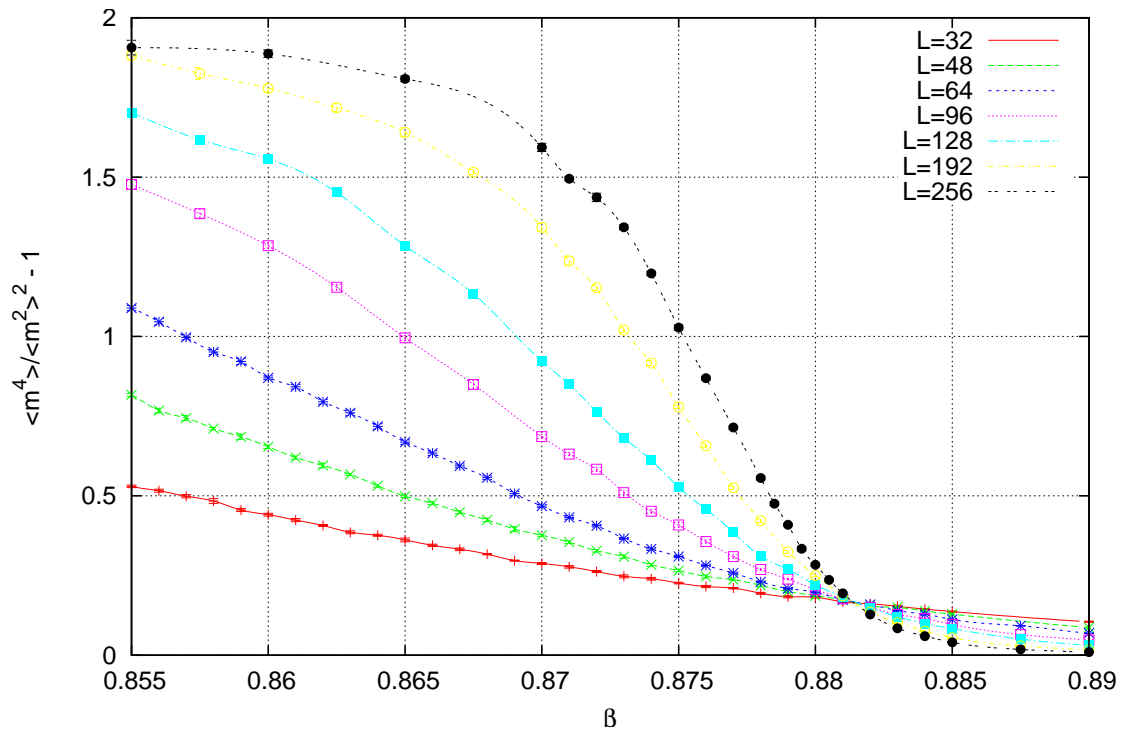
Ενδιαφέρον παρουσιάζει, επίσης, το γράφημα του Energy Cumulant που ακολουθεί (Σχ. 3.19). Η καμπύλες τείνουν για αυξανόμενο L προς το 0, όπως προς το 0 τείνουν τα ελαφρά μέγιστα που εμφανίζουν σε κάποια ψευδοκρίσιμα σημεία. Αυτή η μορφή των καμπυλών και η τάση των μεγίστων προς το 0 υποδεικνύει την απουσία λανθάνουσας θερμότητας που είναι χαρακτηριστικό στοιχείο μιας μετάβασης δεύτερης τάξης.

Βαρύνουσας σημασίας στην περίπτωση $q = 2$, καθότι η μετάβαση είναι δεύτερης τάξης, είναι το γράφημα της μαγνητικής επιδεκτικότητας που ακολουθεί στο Σχ. 3.20. Μάλιστα, τα μέγιστα των καμπυλών αυτού του γραφήματος, που αυξάνονται για τα διάφορα L , θα χρησιμοποιηθούν σε επόμενη παράγραφο για την επανακτίμηση του κρίσιμου σημείου.

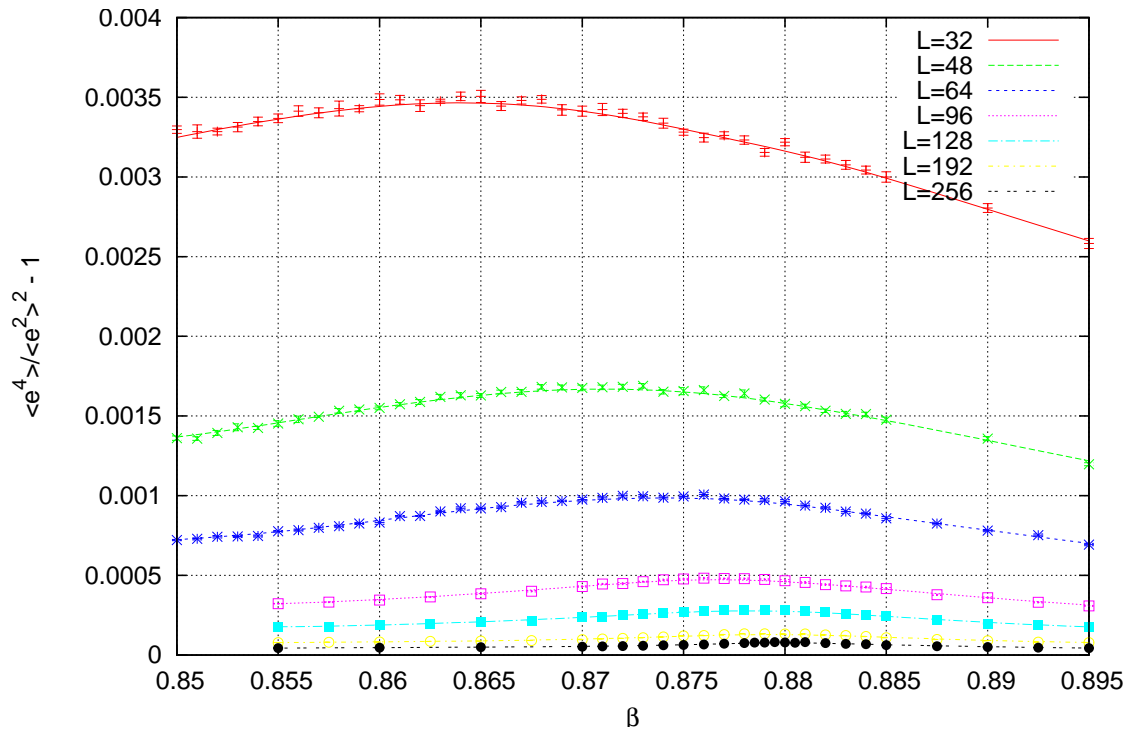
Τα υπόλοιπα μεγέθη συνοψίζονται στο γράφημα της ενέργειας (Σχ. 3.22) και της ειδικής θερμότητας (Σχ. 3.21), που παρατίθενται για λόγους πληρότητας και αντιπαραβολής με τα αντίστοιχα των μεγαλύτερων q .



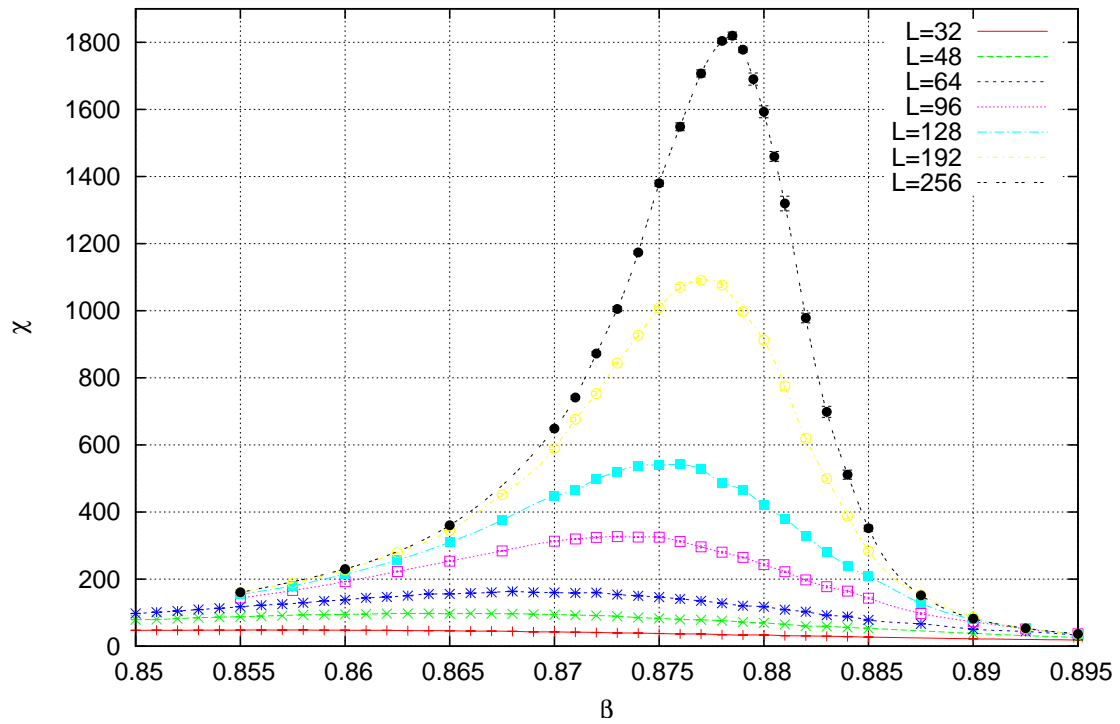
Σχήμα 3.17: Μαγνήτιση για $q = 2$ με S-W, 9.6×10^4 sweeps



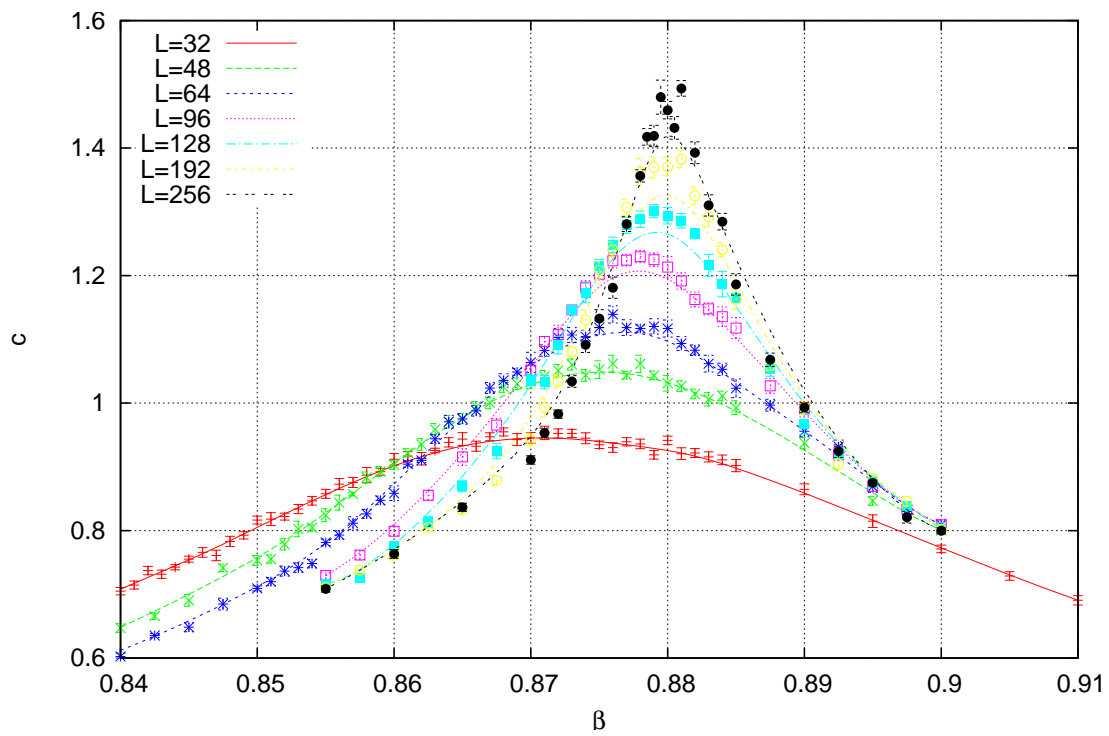
Σχήμα 3.18: Binder Cumulant για $q = 2$ με S-W, 9.6×10^4 sweeps



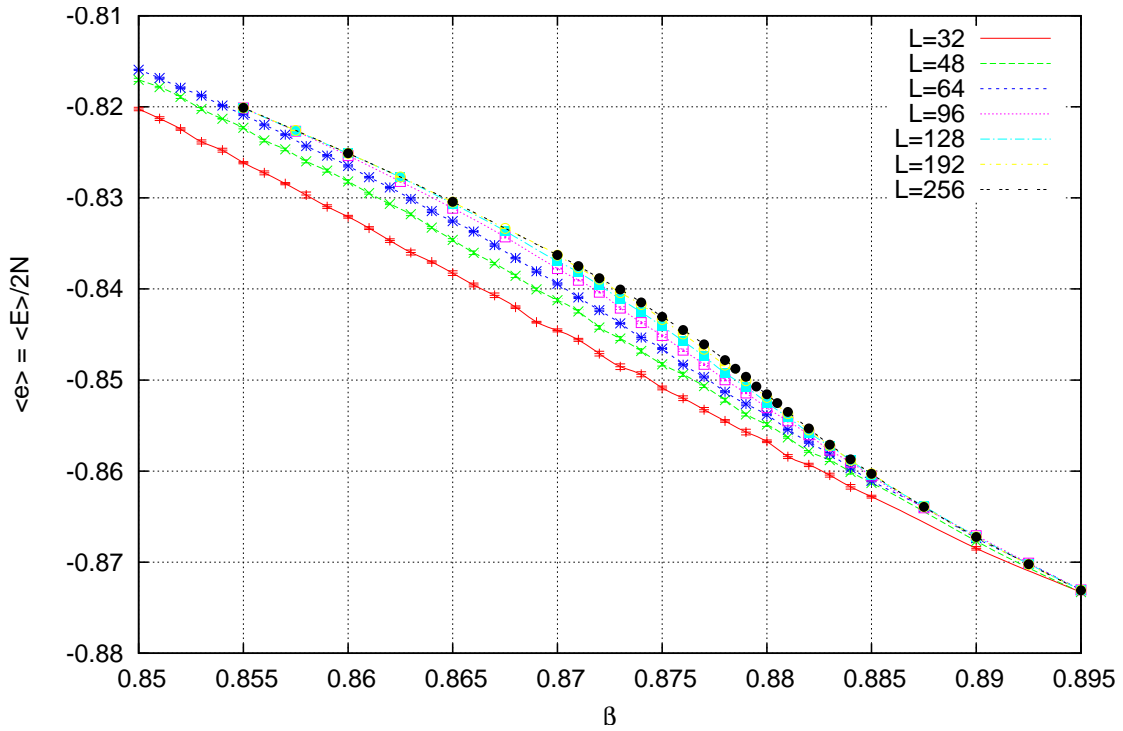
Σχήμα 3.19: Energy Cumulant για $q = 2$ με S-W, 9.6×10^4 sweeps



Σχήμα 3.20: Μαγν. επιδεκτικότητα για $q = 2$ με S-W, 9.6×10^4 sweeps



Σχήμα 3.21: Ειδ. θερμότητα για $q = 2$ με S-W, 9.6×10^4 sweeps



Σχήμα 3.22: Ενέργεια ανά δεσμό για $q = 2$ με S-W, 9.6×10^4 sweeps

3.5 Γραφήματα βάνμωσης & κρίσιμοι εκθέτες

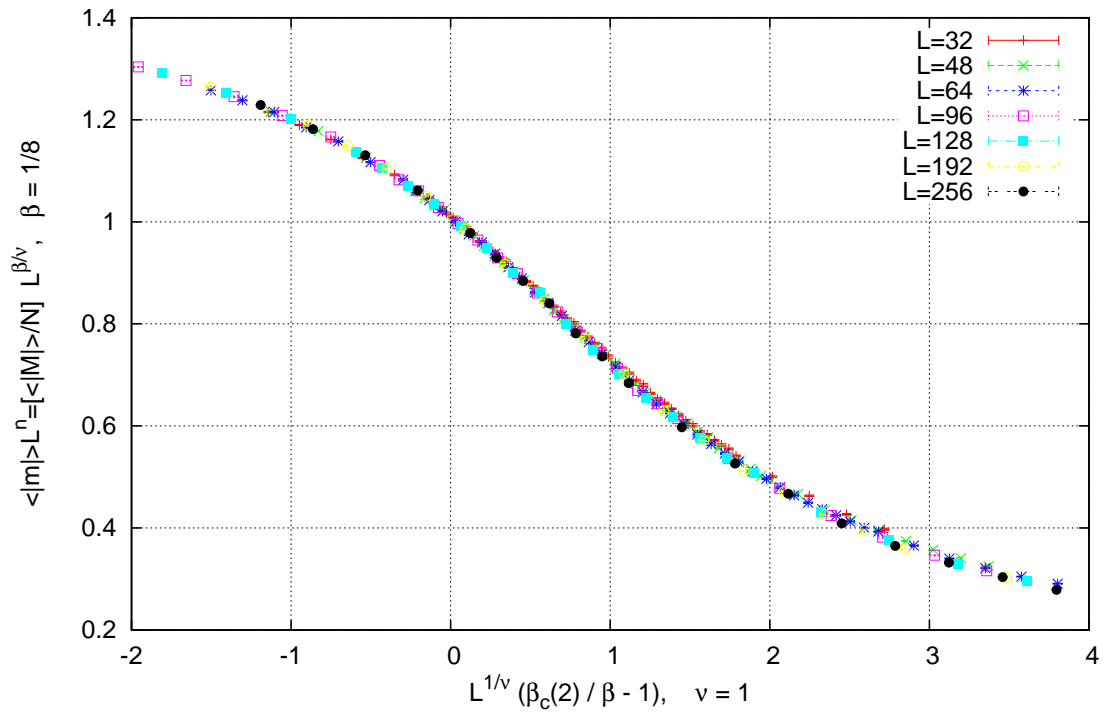
Το $q = 2$ εμφανίζει παγκοσμιότητα, συνεπώς μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τα εργαλεία της κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους. Μάλιστα οι κρίσιμοι εκθέτες είναι γνωστοί (3.2, $\nu = 1$), οπότε μπορούμε στις οικείες γραφικές παραστάσεις να επιλέξουμε εκείνο το $\beta_{f_{ss}}(2)$ για το οποίο οι καμπύλες των ενδιαφερόντων μεγεθών συμπίπτουν. Αυτό το $\beta_{f_{ss}}(2)$ είναι και μια εκτίμηση του κρίσιμου σημείου:

$$\beta_{f_{ss}}(2) \approx 0.8813 \quad (3.3)$$

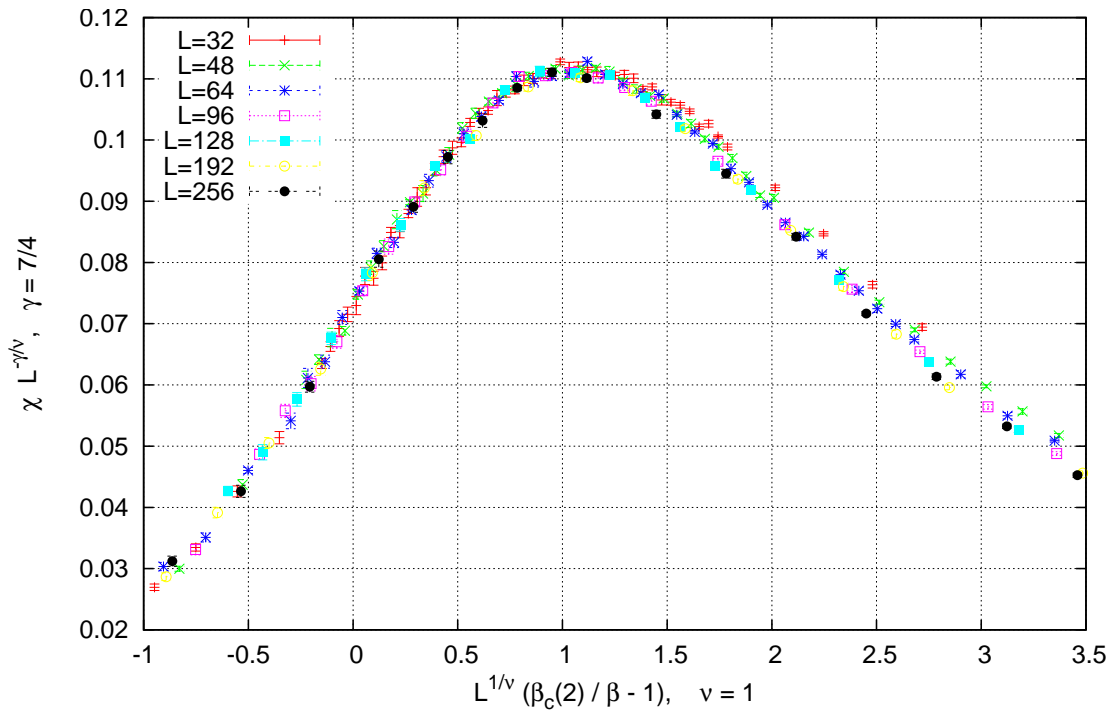
Μέγεθος	Εκθέτης	Τιμή
Μαγνήτιση	β	1/8
Μαγνητική επιδεκτικότητα	γ	7/4
Ειδική θερμότητα	α	4/17

Πίνακας 3.2: Κρίσιμοι εκθέτες για $q = 2$

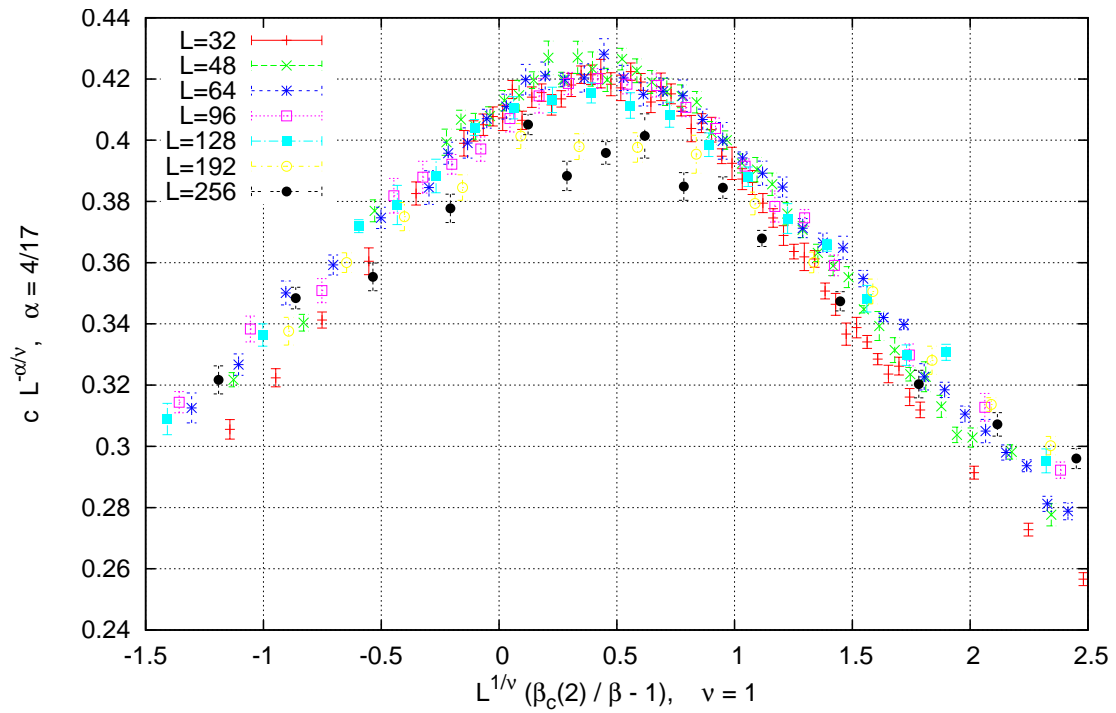
Άξιο σχολιασμού είναι το γεγονός ότι η βάνμωση της ειδικής θερμότητας δεν δίνει καλή ποιότητα σύμπτωσης γραφημάτων, καθιστώντας την εξαγωγή συμπερασμάτων επισφαλή.



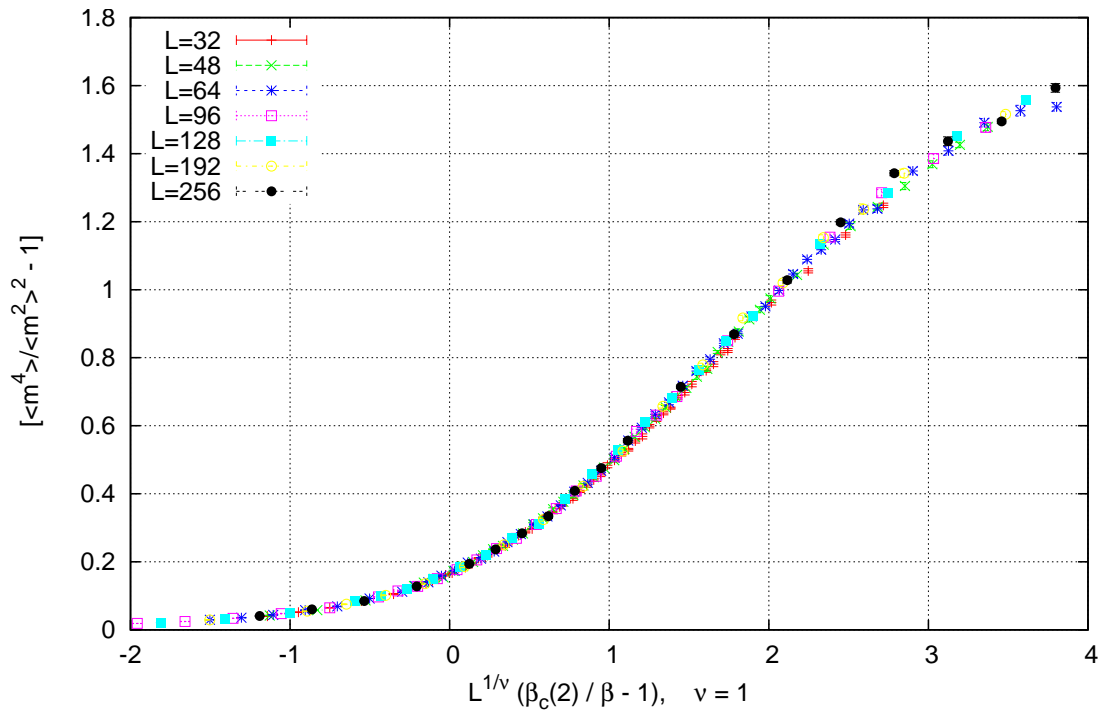
Σχήμα 3.23: Βάθμωση μαγνήτισης για $q = 2$ με S-W, 9.6×10^4 sweeps



Σχήμα 3.24: Βάθμωση μαγνητικής επιδεκτικότητας για $q = 2$ με S-W, 9.6×10^4 sweeps



Σχήμα 3.25: Βάθμωση ειδικής θερμότητας για $q = 2$ με S-W, 9.6×10^4 sweeps



Σχήμα 3.26: Βάθμωση Binder Cumulant για $q = 2$ με S-W, 9.6×10^4 sweeps

3.6 Στο κρίσιμο σημείο

Βρισκόμαστε ήδη στην τελική ευθεία ώστε να κάνουμε τις προσομοιώσεις πάνω στο κρίσιμο σημείο. Το ζήτημα είναι πως λόγω φαινομένων που οφείλονται στο πεπερασμένο μέγεθος των συστημάτων για διαφορετικά L έχουμε ένα ψευδοκρίσιμο σημείο (pseudo-critical point), το οποίο λαμβάνουμε από το μέγιστο της καμπύλης μαγνητικής επιδεκτικότητας (Σχ. 3.20). Οι επόμενες προσομοιώσεις έγιναν στα ψευδοκρίσιμα β_{pc} και αντίστοιχα L που καταγράφονται στον πίνακα 3.3 με τους χρόνους αυτοσυσχέτισης από το Σχ. 3.27.

L	β_{pc}	τ_{int} (sweeps)	sweeps	Ανεξάρτητες μετρήσεις
32	0.8550	3.4	10×10^4	1.47×10^4
48	0.8650	3.8	10×10^4	1.32×10^4
64	0.8680	3.9	20×10^4	2.56×10^4
96	0.8730	4.0	20×10^4	2.50×10^4
128	0.8750	4.4	20×10^4	2.27×10^4
192	0.8770	4.5	50×10^4	5.56×10^4
256	0.8785	4.9	50×10^4	5.10×10^4

Πίνακας 3.3: Ανεξάρτητες μετρήσεις στο κρίσιμο σημείο για $q = 2$

Η προσαρμογή των ψευδοκρίσιμων σημείων στην Εξ. (2.15) για $\nu = 1$ δίνει μια αριθμητική εκτίμηση του κρίσιμου σημείου $\beta_{num}(2)$, όπως φαίνεται και στο οικείο γράφημα (Σχ. 3.28):

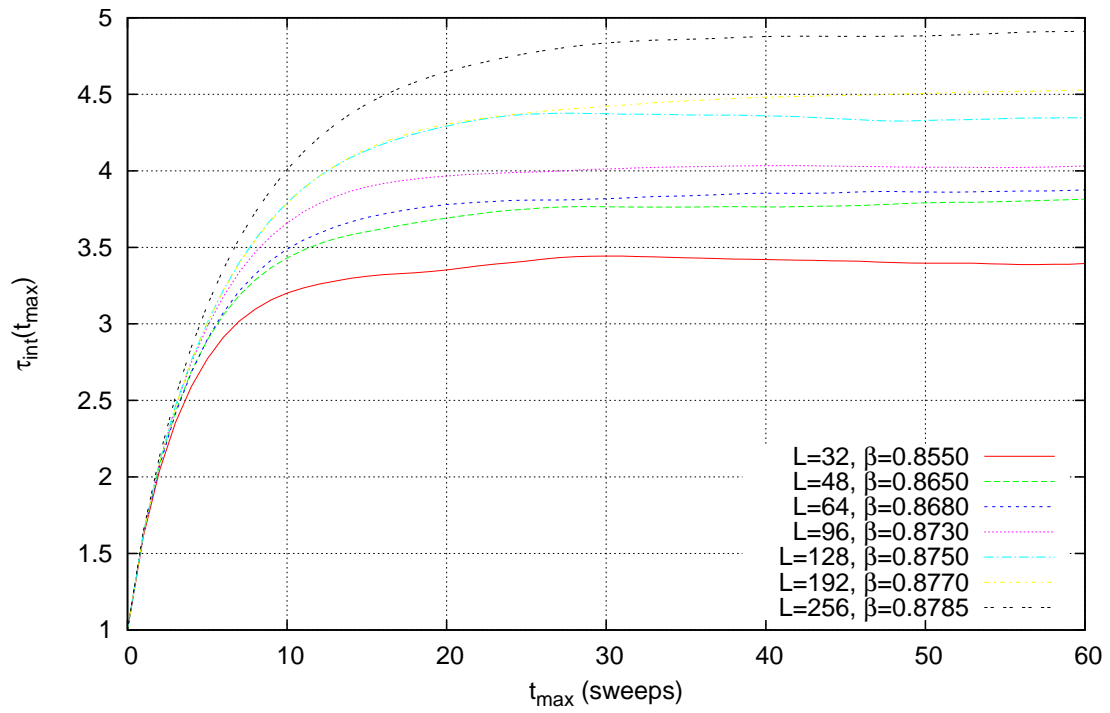
$$\beta_{num}(2) = 0.8816 \pm 0.0003, \quad (0.04\%) \quad (3.4)$$

$$c(2) = -0.84 \pm 0.02, \quad (2.5\%)$$

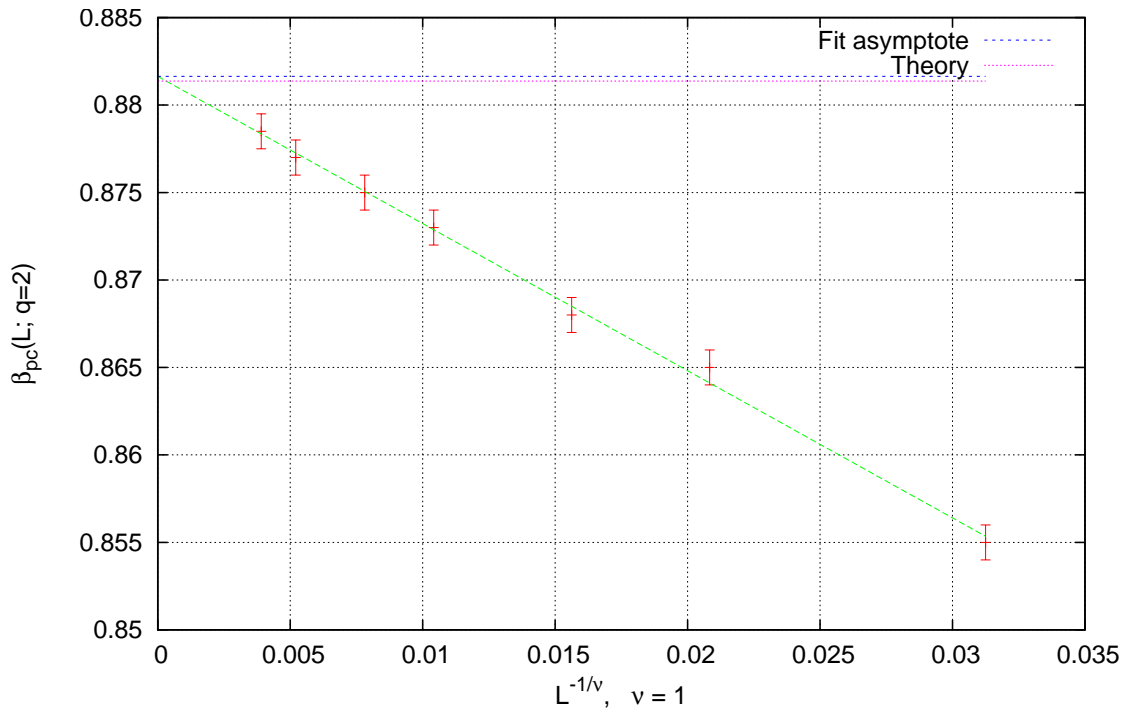
Στο τέλος αυτής της παραγράφου παρατίθενται, επίσης, τα ιστογράμματα ενέργειας (Σχ. 3.30) και μαγνήτισης (Σχ. 3.29) στα ίδια ψευδοκρίσιμα σημεία για συγκριτική αντιπαράβολή με τα αντίστοιχα ιστογράμματα των μεγαλύτερων q , καθώς η μορφή τους είναι γνωστή και αναμενόμενη από το μοντέλο Ising.

Η διερευνητική αυτή ανάλυση του Potts για $q = 2$ μπορεί να μην προσέθεσε κάποια φυσική πληροφορία παραπάνω απ' όσες μας έχει δώσει το Ising, αλλά ήταν αρκετά διδακτική ως προς τα εργαλεία που έχουμε στη διάθεσή μας για την διενέργεια των υπόλοιπων προσομοιώσεων:

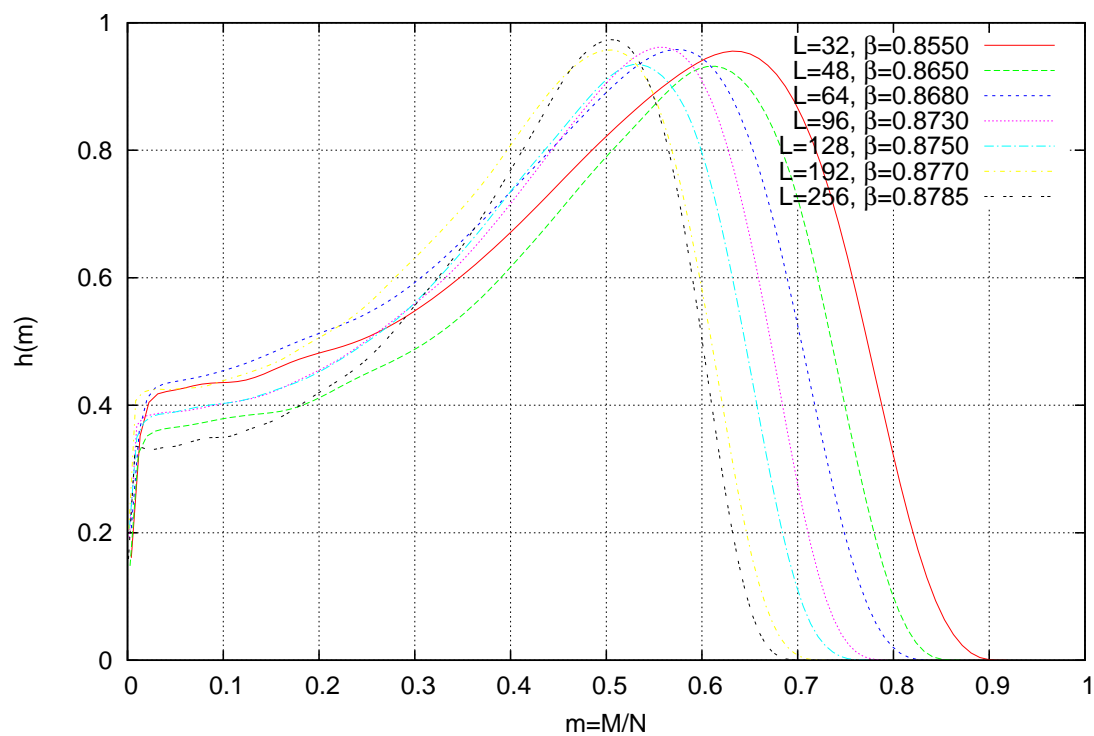
- Αναδείχθηκε η ανάγκη χρήσης ενός cluster αλγόριθμου, συγκεκριμένα του Swendsen-Wang που αποδίδει σαφώς καλύτερα στην κρίσιμη περιοχή.
- Δοκιμάστηκε επιτυχώς η επιλογή των διακριτών τιμών $L \in [32, 256]$ ως ένα σύνολο που οδηγεί σε ευανάγνωστα διαγράμματα τα οποία, ακόμη κι αν έχουν χαμηλό άνω όριο, μπορούν να αναδείξουν σημαντικά χαρακτηριστικά του μοντέλου και φυσικά της τάσης του για $L \rightarrow \infty$.
- Παρουσιάστηκε η εικόνα ενός κατά τα άλλα γνωστού προτύπου δεύτερης τάξης ($q = 2$) για αντιπαράβολή και σύγκριση στα επόμενα q .
- Αποδείχθηκε η αξία των ιστογραμμάτων της μαγνήτισης/ενέργειας καθώς και του γραφήματος του χρόνου αυτοσυσχέτισης για τον εντοπισμό του κρίσιμου σημείου και της αποτίμησης της ποιότητας της στατιστικής μας αντίστοιχα.



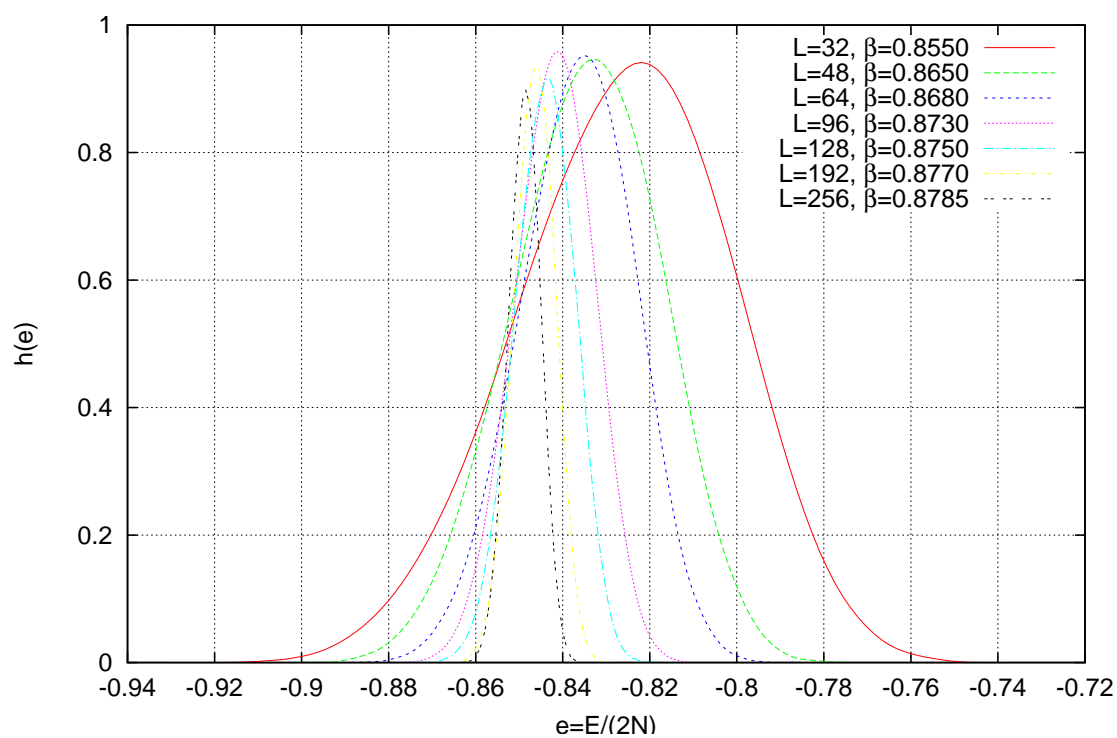
Σχήμα 3.27: τ_{int} για $q = 2$ με S-W στο κρίσιμο σημείο



Σχήμα 3.28: FSS L^{-1} για $q = 2$ με S-W στο κρίσιμο σημείο



Σχήμα 3.29: Ιστόγραμμα μαγνήτισης για $q = 2$ με S-W στο κρίσιμο σημείο



Σχήμα 3.30: Ιστόγραμμα ενέργειας για $q = 2$ με S-W στο κρίσιμο σημείο

Κεφάλαιο 4

Τρεις καταστάσεις ($q = 3$)

4.1 Εντοπισμός του κρίσιμου σημείου

Το μοντέλο Potts των 3 καταστάσεων είναι η πρώτη μη-γνωστή περίπτωση που αντιμετωπίζουμε, σε σύγκριση πάντα με τις 2 καταστάσεις που ισοδυναμούν με το μοντέλο Ising. Σύμφωνα με την θεωρητική ανάλυση αναμένεται η μετάβαση φάσης να είναι 2ης τάξης, με κρίσιμο σημείο το

$$\beta_c(3) = \ln(1 + \sqrt{3}) \approx 1.0050 \quad (4.1)$$

κάτι που δεν έχουμε παρά να επιβεβαιώσουμε και στην πράξη. Αυτή τη φορά, όπως και στα μεγαλύτερα q , θέτοντας σε εφαρμογή τα διδάγματα της παραγράφου για $q = 2$, θα χρησιμοποιηθεί αποκλειστικά ο αλγόριθμος S-W.

Η σειρά γραφημάτων που ακολουθεί έγινε σε μια στενή περιοχή γύρω από το $\beta_c(3)$. Όπως και στην περίπτωση του $q = 2$, στο γράφημα της μαγνήτισης (Σχ. 4.1) παρατηρεί κανείς τον διαχωρισμό των καμπυλών στις μεγάλες θερμοκρασίες (μικρά β) μέχρι και το κρίσιμο σημείο, και κατόπιν την ταύτισή τους στη μαγνητισμένη φάση. Αυτό προφανώς συμβαίνει λόγω του σημαντικά μεγαλύτερου πλήθους άτακτων καταστάσεων σε σύγκριση με εκείνες που θεωρούνται 'σε τάξη'.

Το γράφημα του Binder Cumulant (Σχ. 4.2) εμφανίζει ποιοτικά χαρακτηριστικά επίσης όμοια με της περίπτωσης $q = 2$. Οι καμπύλες των διαφορών L έχουν σημαντικές αποκλίσεις στα μικρά β αλλά όλες συνέρχονται στην στενή περιοχή

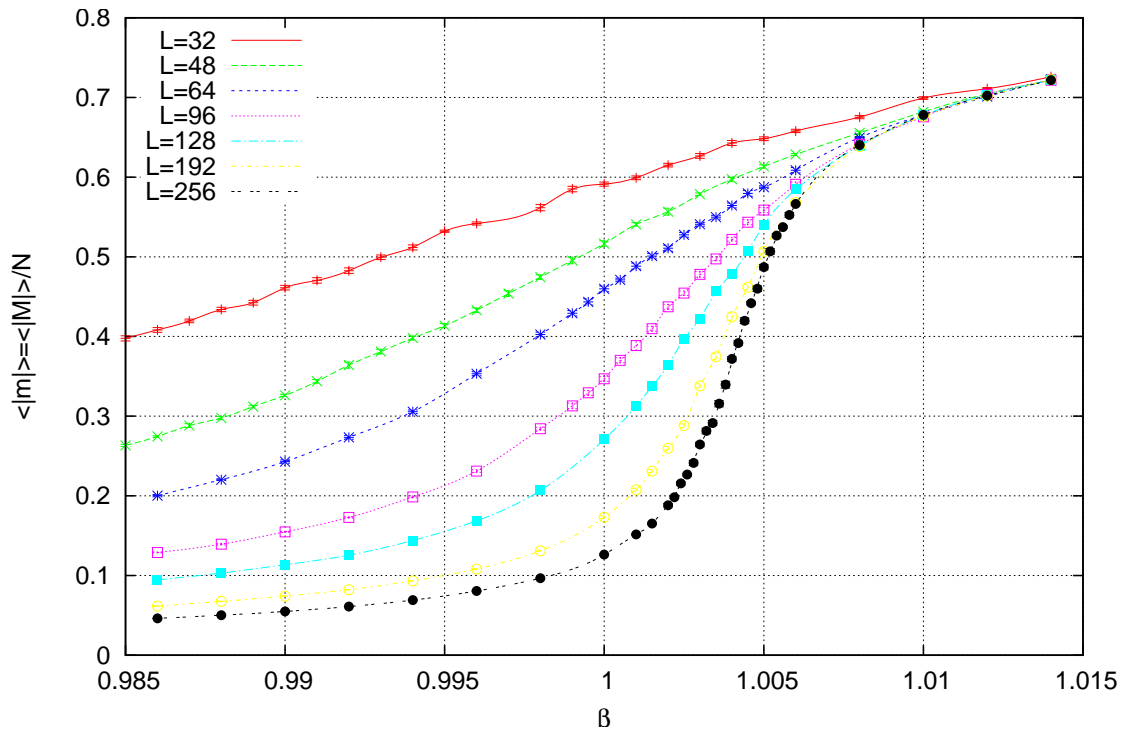
$$\beta_{binder}(3) \in [1.0043, 1.0056] \quad (4.2)$$

γύρω από το κρίσιμο σημείο $\beta_c(3) \approx 1.0050$. Αυτή είναι και μια πρώτη μέθοδος ανακάλυψης του κρίσιμου σημείου, ακόμη κι αν δεν το γνωρίζαμε από την μαθηματική ανάλυση του μοντέλου.

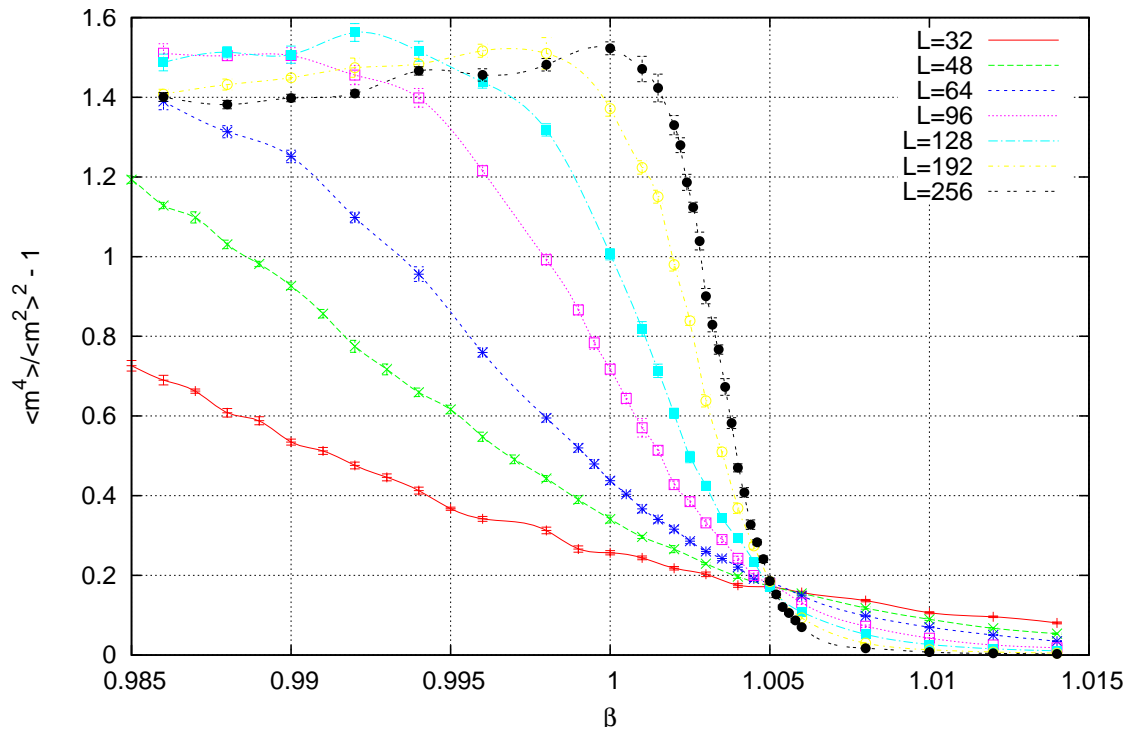
Στο ίδιο μοτίβο της $q = 2$ υπακούει και η οικογένεια καμπυλών του energy cumulant, όπου παρατηρείται συστηματική τάση των καμπυλών και των μεγίστων τους (άρα και της λανθάνουσας θερμοότητας) προς το 0 (Σχ. 4.3).

Παρόλα αυτά, όπως είναι πλέον αναμενόμενο, δεν εμφανίζουν όλα τα L κρίσιμη συμπεριφορά στο ίδιο σημείο β . Αντ' αυτού, υπάρχει ένα ψευδοκρίσιμο σημείο $\beta_{pc}(L)$, όπως άλλωστε φαίνεται από το γράφημα της μαγνητικής επιδεκτικότητας στο οποίο οι κορυφές μετατοπίζονται συστηματικά (Σχ. 4.4).

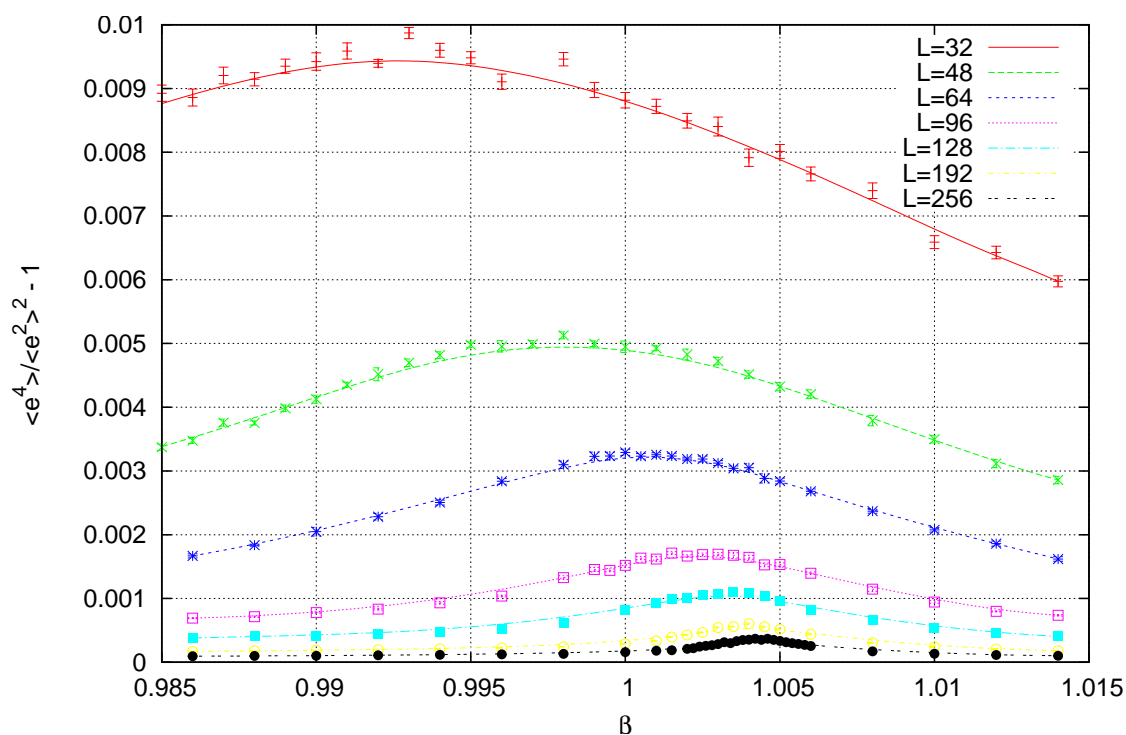
Στο τέλος αυτής της παραγράφου παρατίθενται τα γραφήματα της ενέργειας και της ειδικής θερμοότητας (Σχ. 4.5, 4.6). Η διαφοροποίηση σε σχέση με τα αντίστοιχα του $q = 2$ είναι εμφανής στο γράφημα της ενέργειας. Στην κρίσιμη περιοχή, και πιο έντονα στα μεγαλύτερα L , η ενέργεια ανά δεσμό καταβυθίζεται πιο απότομα, γεγονός που αποτυπώνεται ισοδύναμα στα αμυδρά μέγιστα του Energy Cumulant. Η παρατήρηση αυτή παρόλο που δεν οδηγεί στο συμπέρασμα ότι υπάρχει λανθάνουσα θερμοότητα δίνει την τάση εμφάνισής της όσο περνάμε σε μεγαλύτερα q . Αυτό, όμως, είναι κάτι που μέλλει να επαληθεύσουμε ή να καταρρίψουμε στα επόμενα κεφάλαια.



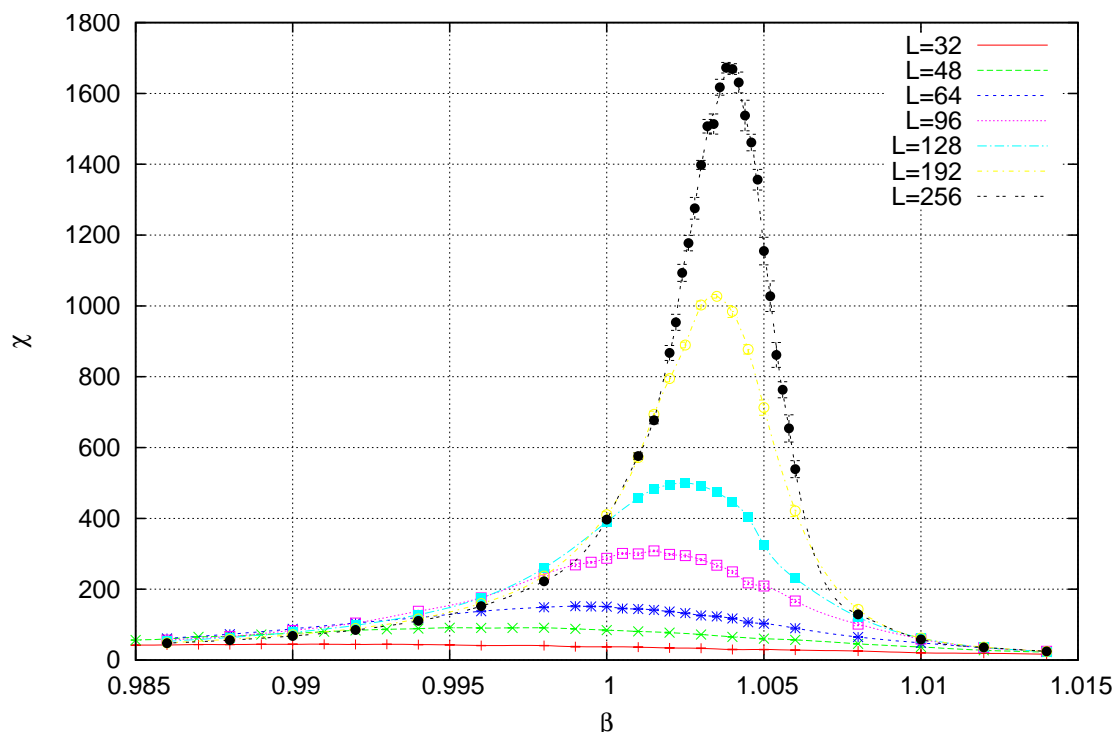
Σχήμα 4.1: Μαγνήτιση για $q = 3$ με S-W, 12×10^4 sweeps



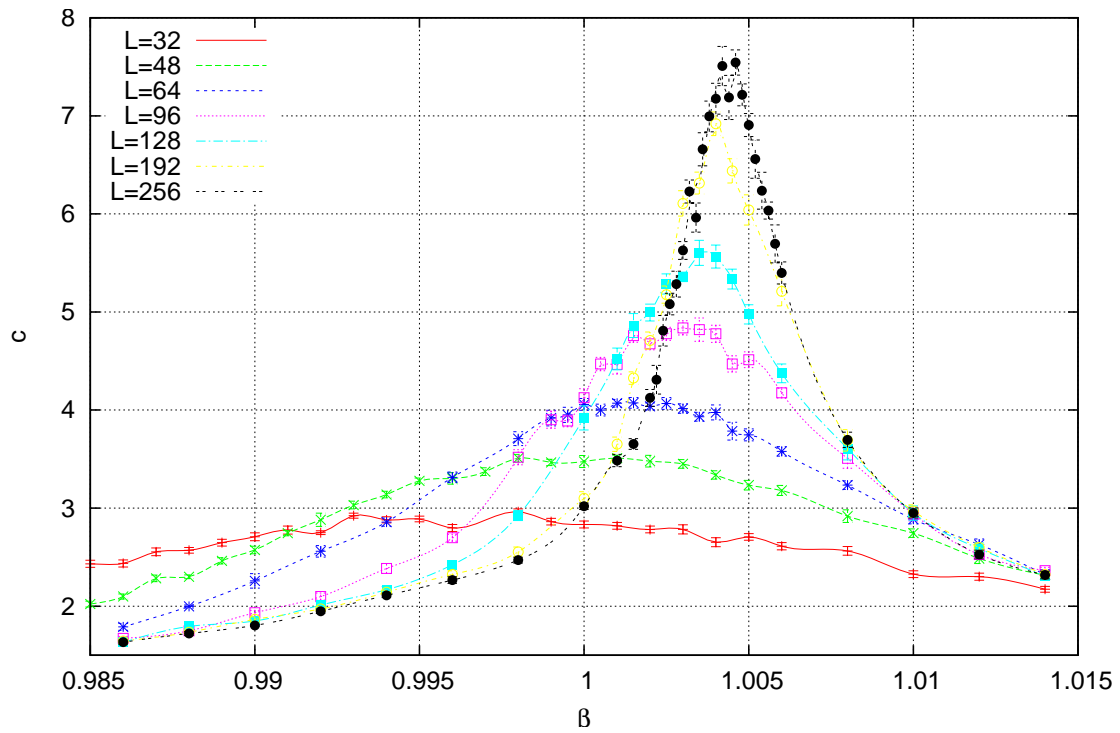
Σχήμα 4.2: Binder Cumulant για $q = 3$ με S-W, 12×10^4 sweeps



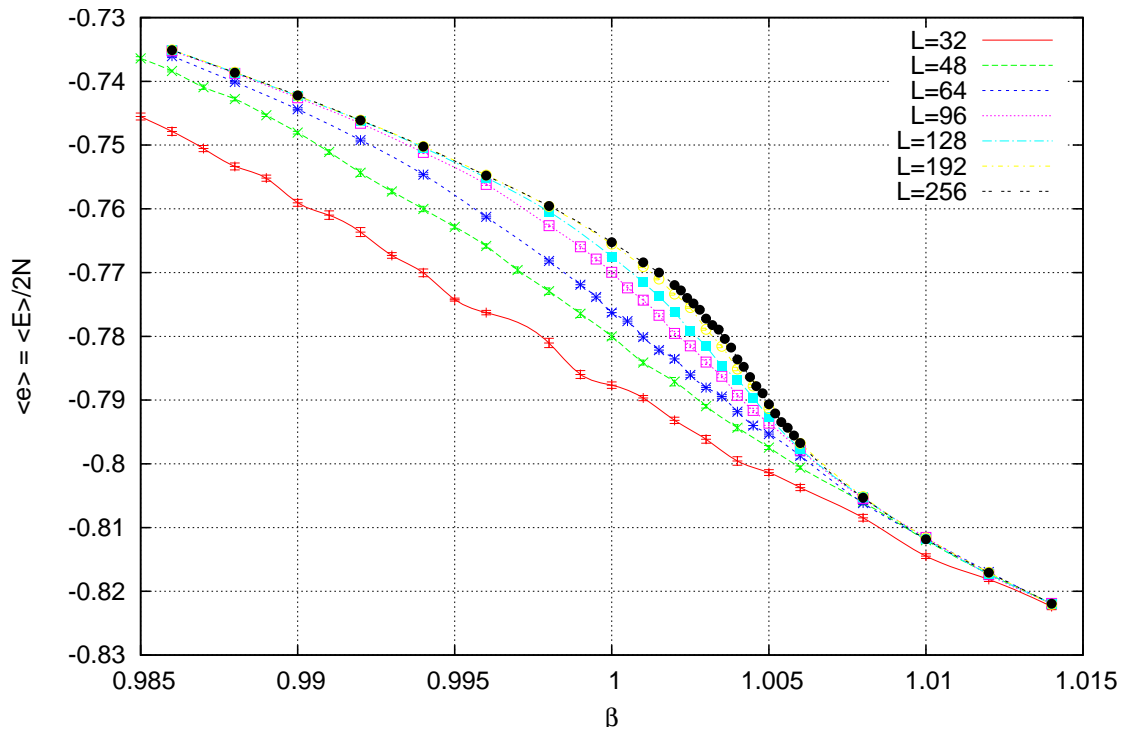
Σχήμα 4.3: Energy Cumulant για $q = 3$ με S-W, 12×10^4 sweeps



Σχήμα 4.4: Μαγνητική επιδεκτικότητα για $q = 3$ με S-W, 12×10^4 sweeps



Σχήμα 4.5: Ειδ. θερμότητα για $q = 3$ με S-W, 12×10^4 sweeps



Σχήμα 4.6: Ενέργεια ανά δεσμό για $q = 3$ με S-W, 12×10^4 sweeps

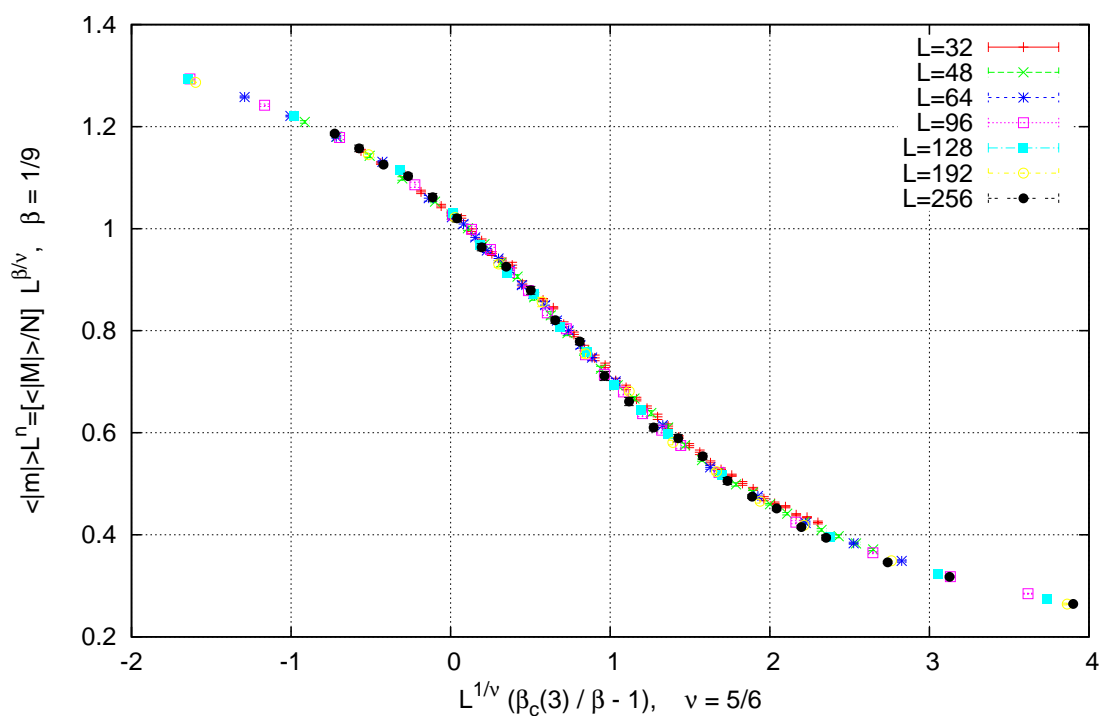
4.2 Γραφήματα βάθμωσης & κρίσιμοι εκθέτες

Όπως και στο $q = 2$, παρατηρείται παγκοσμιότητα και για το $q = 3$. Με τους γνωστούς κρίσιμους εκθέτες (4.1) και για $\nu = 5/6$, εκτιμούμε το κρίσιμο σημείο:

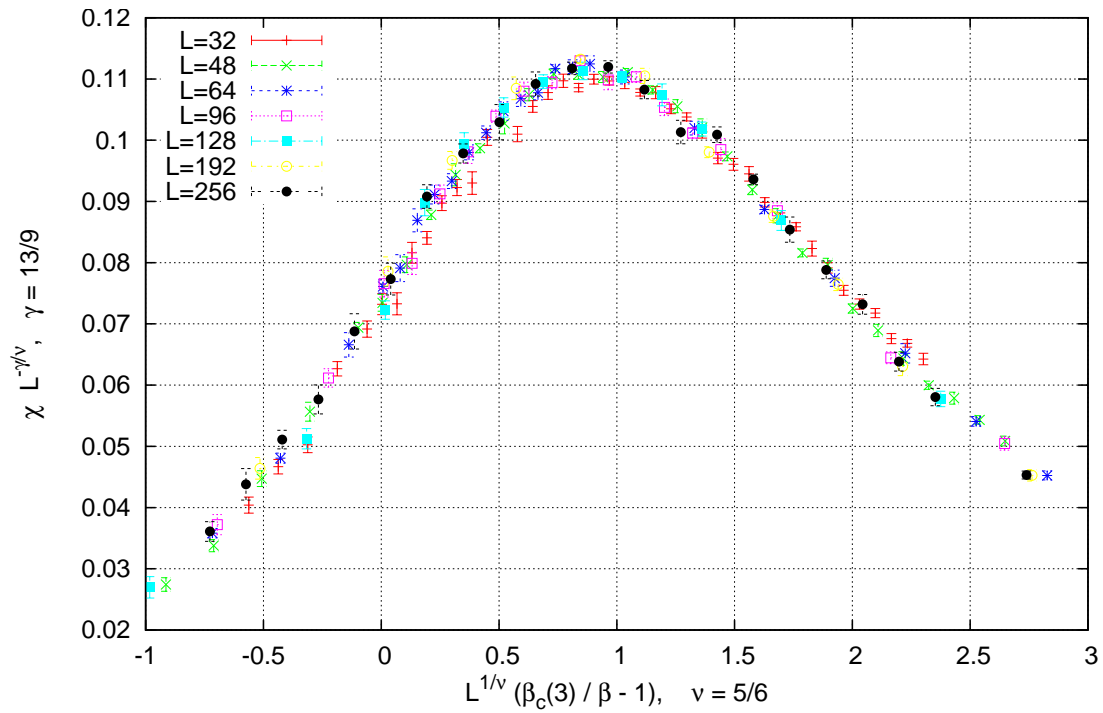
$$\beta_{fss}(3) \approx 1.0050 \quad (4.3)$$

Μέγεθος	Εκθέτης	Τιμή
Μαγνήτιση	β	1/9
Μαγνητική επιδεκτικότητα	γ	13/9
Ειδική θερμότητα	α	5/13

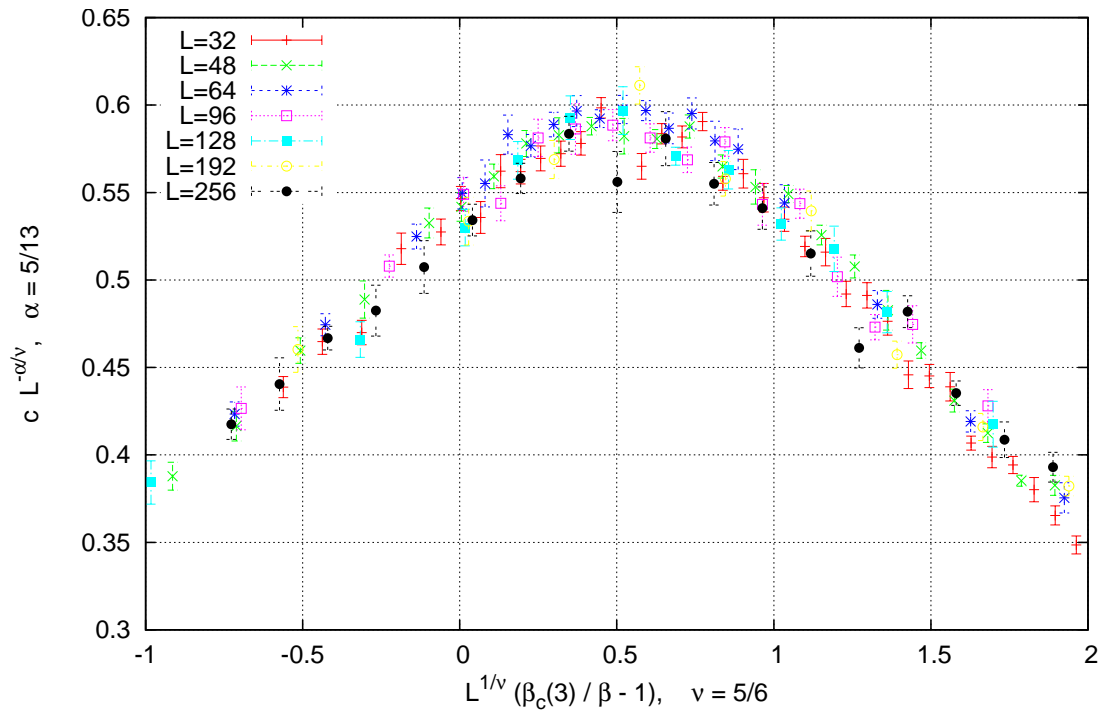
Πίνακας 4.1: Κρίσιμοι εκθέτες για $q = 3$



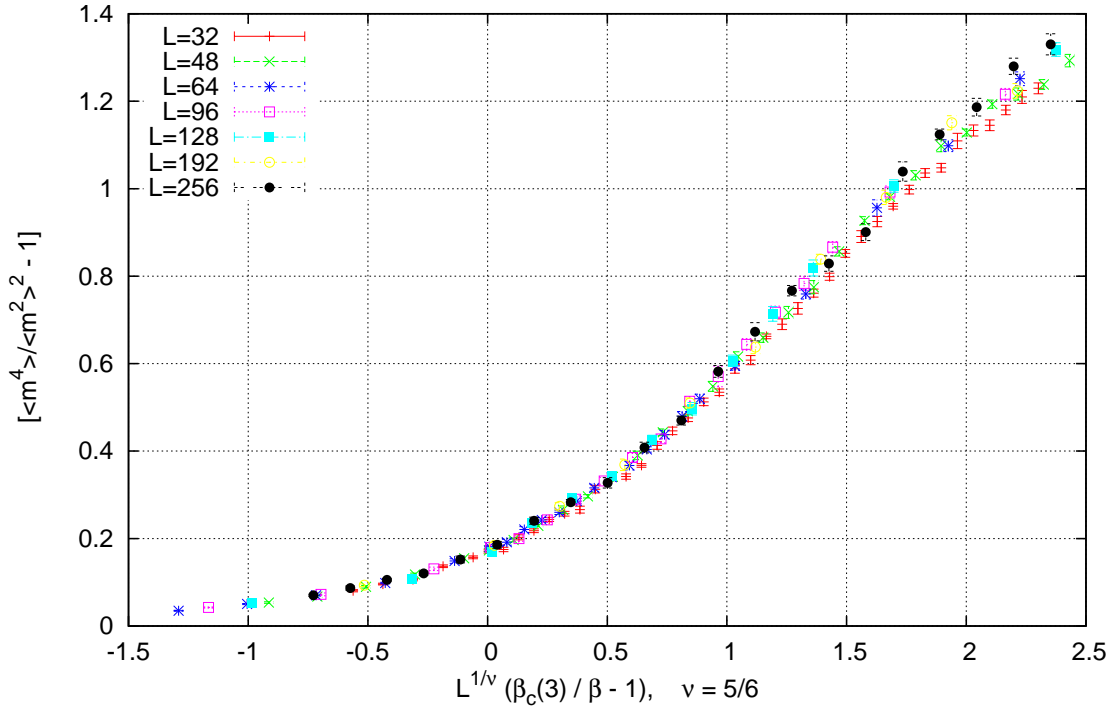
Σχήμα 4.7: Βάθμωση μαγνήτισης για $q = 3$ με S-W, 12×10^4 sweeps



Σχήμα 4.8: Βάθμωση μαγνητικής επιδεκτικότητας για $q = 3$ με S-W, 12×10^4 sweeps



Σχήμα 4.9: Βάθμωση ειδικής θερμότητας για $q = 3$ με S-W, 12×10^4 sweeps



Σχήμα 4.10: Βάθμωση Binder Cumulant για $q = 3$ με S-W, 12×10^4 sweeps

4.3 Επί του κρίσιμου σημείου

Οι προσομοιώσεις του κρίσιμου σημείου έγιναν με οδηγό τα μέγιστα των καμπυλών της μαγνητικής επιδεκτικότητας (Σχ. 4.4). Τα αποτελέσματα συνοψίζονται στον πίνακα 4.2 μαζί με το πλήθος των sweeps που χρησιμοποιήθηκε σε κάθε περίπτωση. Οι χρόνοι αυτοσυσχέτισης του Σχ. 4.11 χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό του πλήθους των πραγματικά ανεξάρτητων μετρήσεων αυτής της σειράς προσομοιώσεων.

L	β_{pc}	τ_{int} (sweeps)	sweeps	Ανεξάρτητες μετρήσεις
32	0.9910	12	50×10^4	2.08×10^4
48	0.9960	14.5	50×10^4	1.72×10^4
64	0.9990	17	50×10^4	1.47×10^4
96	1.0015	21	50×10^4	1.19×10^4
128	1.0025	23	100×10^4	2.17×10^4
192	1.0035	29	100×10^4	1.72×10^4
256	1.0038	35	100×10^4	1.43×10^4

Πίνακας 4.2: Ανεξάρτητες μετρήσεις στο κρίσιμο σημείο για $q = 3$

Εάν η εκτίμηση του $\beta_{num}(3)$ γίνεται με προσαρμογή των ψευδοκρίσιμων σημείων στην Εξ. (2.15) για $\nu = 5/6$, όπως φαίνεται και στο Σχ. 4.12:

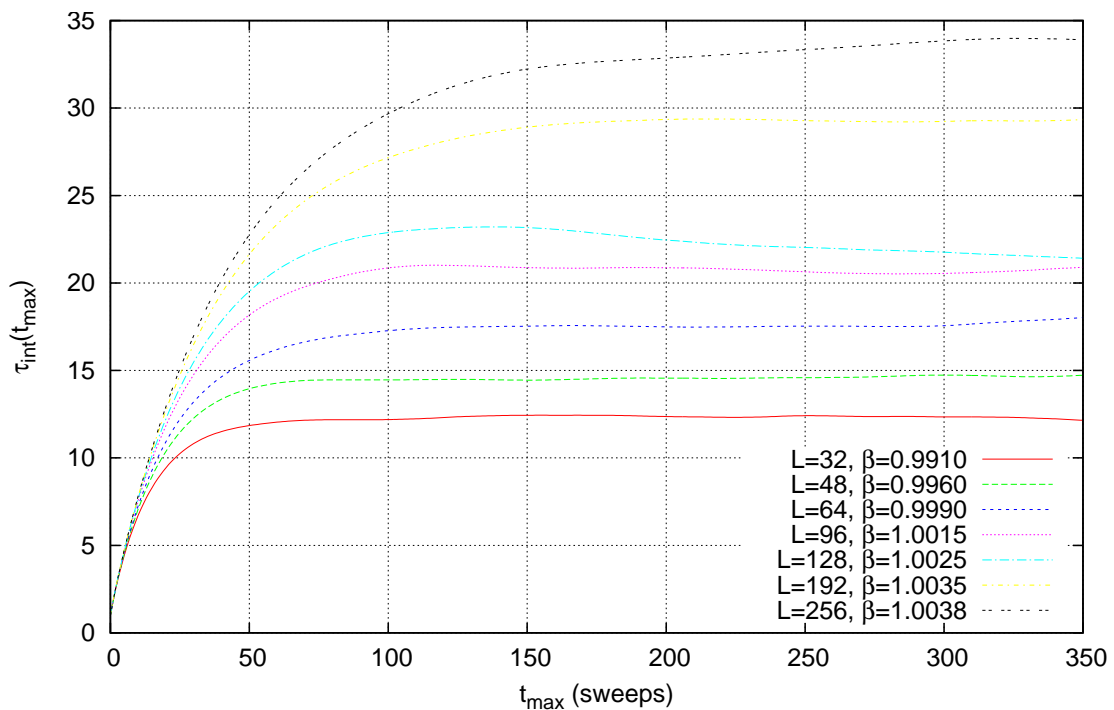
$$\beta_{num}(3) = 1.0051 \pm 0.0001, \quad (0.012\%) \quad (4.4)$$

$$c(3) = -0.91 \pm 0.02, \quad (1.9\%)$$

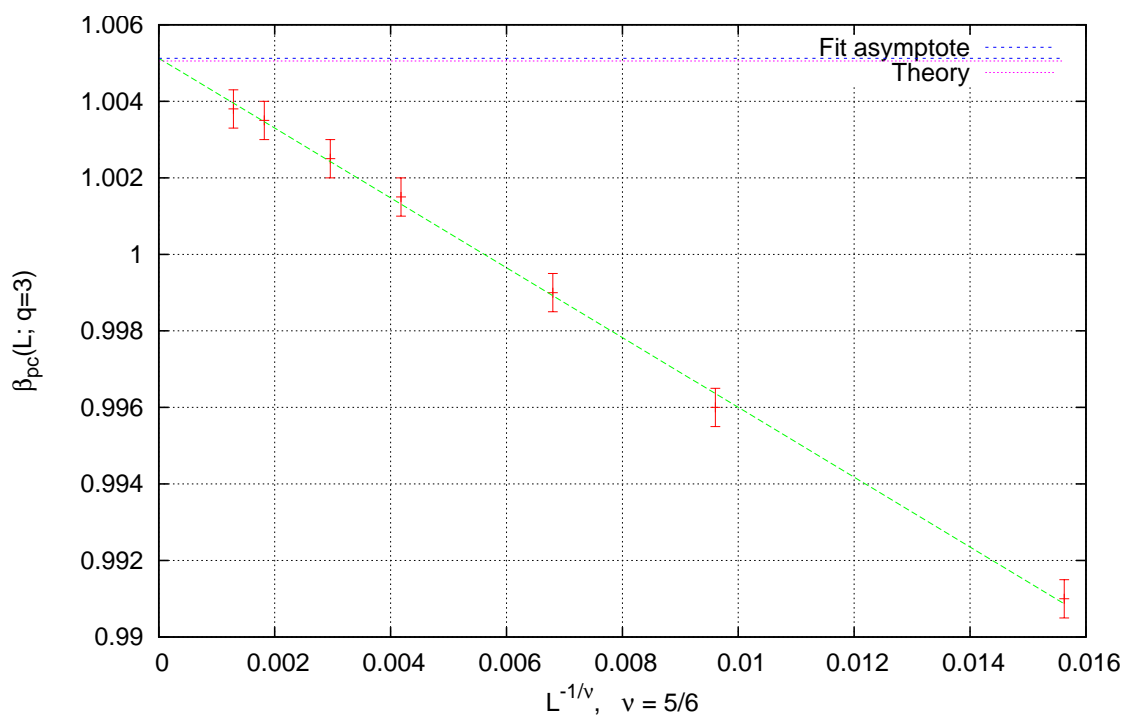
Η κατανομή της μαγνήτισης στο κρίσιμο σημείο αποτυπώνεται για τα διάφορα L στα παρακάτω συγκριτικά ιστογράμματα ενέργειας (Σχ. 4.14) και μαγνήτισης (Σχ. 4.13). Σε αντίθεση με την περίπτωση $q = 2$ στην οποία τα ιστογράμματα είχαν ένα ελάχιστο στις χαμηλές τιμές της μαγνήτισης και ένα μέγιστο στις υψηλές, το ιστόγραμμα της μαγνήτισης για $q = 3$ έχει δυο μέγιστα (M_1, M_2) και ενδιάμεσως ένα ελάχιστο (m). Στον πίνακα 4.3 φαίνονται οι λόγοι της διαφοράς μέσου όρου των μεγίστων (M) από το ελάχιστο (m), προς το M , που εξασφαλίζει την ανεξαρτησία του μεγέθους από την κλίμακα των ιστογραμμάτων και τα καθιστά συγκρίσιμα.

L	M_1	M_2	m	$M = \frac{M_1+M_2}{2}$	$\lambda = \frac{M-m}{M}$
32	0.93	0.58	0.55	0.76	0.027
48	0.97	0.67	0.63	0.82	0.052
64	0.95	0.60	0.56	0.78	0.052
96	0.97	0.59	0.55	0.78	0.075
128	0.98	0.59	0.57	0.79	0.059
192	0.98	0.61	0.58	0.80	0.065
256	0.98	0.72	0.68	0.85	0.050

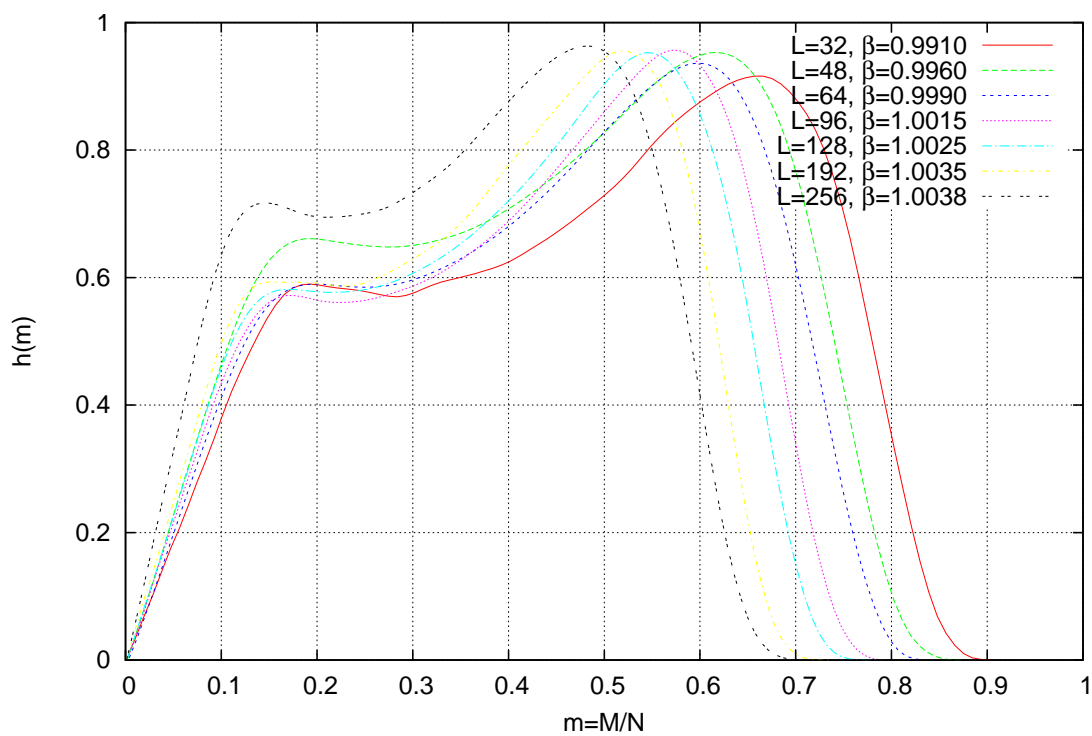
Πίνακας 4.3: Ακρότατα ιστογραμμάτων μαγνήτισης για $q = 3$



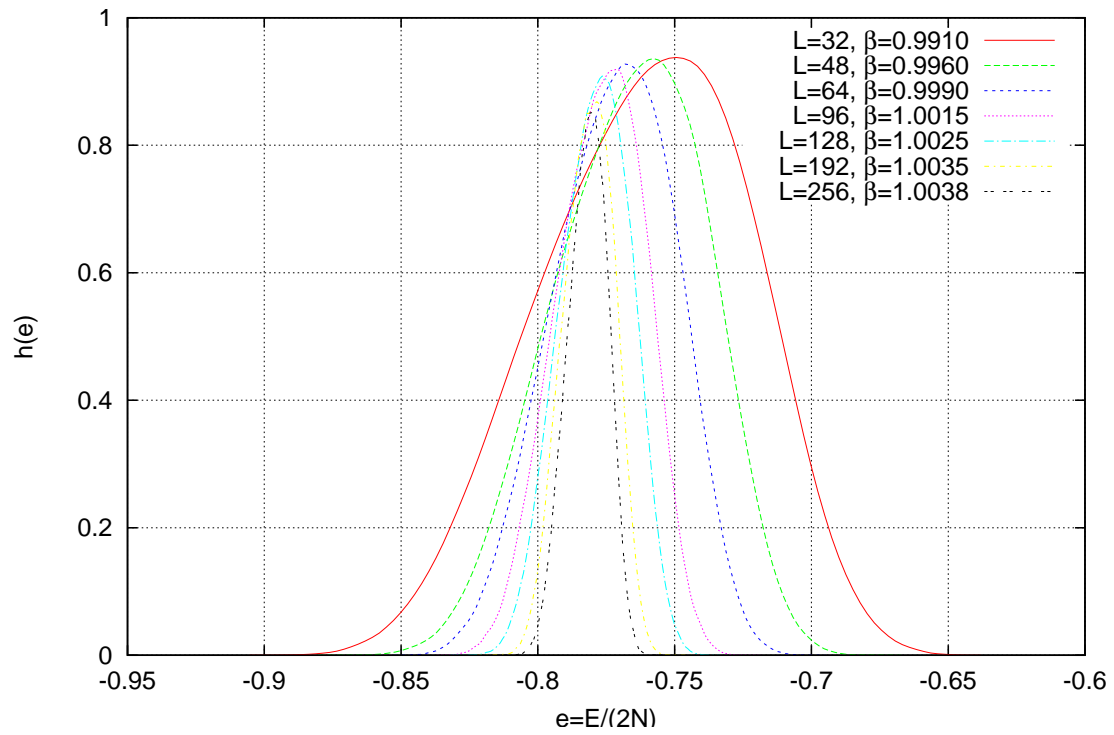
Σχήμα 4.11: τ_{int} για $q = 3$ με S-W στο κρίσιμο σημείο



Σχήμα 4.12: FSS $L^{-6/5}$ για $q = 3$ με S-W στο κρίσιμο σημείο



Σχήμα 4.13: Ιστόγραμμα μαγνήτισης για $q = 3$ με S-W στο κρίσιμο σημείο sweeps



Σχήμα 4.14: Ιστόγραμμα ενέργειας για $q = 3$ με S-W στο κρίσιμο σημείο sweeps

Κεφάλαιο 5

Τέσσερις καταστάσεις ($q = 4$)

5.1 Εντοπισμός του κρίσιμου σημείου

Συνεχίζοντας την μελέτη του διδιάστατου μοντέλου Potts, περνάμε στις τέσσερις καταστάσεις, την τελευταία περίπτωση που η αναλυτική διερεύνηση χαρακτηρίζει ως δεύτερης τάξης με κρίσιμο σημείο το

$$\beta_c(4) = \ln(1 + \sqrt{4}) \approx 1.0986 \quad (5.1)$$

Κατά τα γνωστά παρατίθεται μια πρώτη σειρά προσομοιώσεων για το σύνηθες σύνολο από L γύρω από το $\beta_c(4)$. Ο εντοπισμός του κρίσιμου σημείου γίνεται και πάλι σε πρώτη φάση με το σημείο τομής των καμπυλών Binder Cumulant (Σχ. 5.2) στην στενή περιοχή

$$\beta_{binder}(4) \in [1.0983, 1.0992] \quad (5.2)$$

όπου περιέχεται και η θεωρητικά αναμενόμενη τιμή $\beta_c(4) \approx 1.0986$.

Τα ιδιαίτερα χαρακτηριστικά της περίπτωσης του $q = 4$ φαίνονται αμέσως στα υπόλοιπα γραφήματα. Με μια ματιά στη μαγνήτιση (Σχ. 5.1) διαπιστώνουμε ότι οι καμπύλες στην κρίσιμη περιοχή μεταβάλλονται πολύ πιο απότομα σε σχέση με τα $q = 2$ και $q = 3$, συμπεριφορά που προσιδιάζει περισσότερο σε μετάβαση πρώτης τάξης. Επιπροσθέτως, το γράφημα του Energy cumulant (Σχ. 5.3) υποδεικνύει πλέον μη μηδενική λανθάνουσα θερμότητα, γεγονός που αναπαρίσταται ισοδύναμα στην απότομη πτώση της ενέργειας στην κρίσιμη περιοχή (Σχ. 5.6).

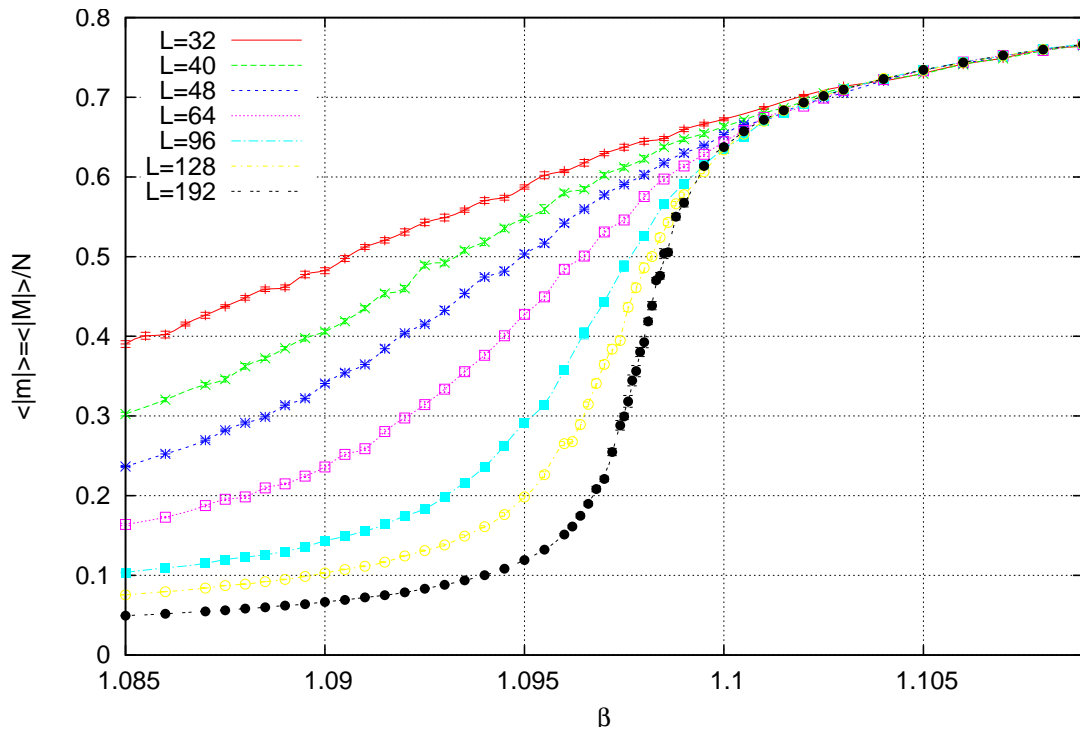
Ένα άλλο χαρακτηριστικό της ακολουθίας προσομοιώσεων με αυξανόμενα q που αναφάνεται ήδη στο $q = 4$ είναι η σύγκλιση των εναλλακτικών ψευδοκρίσιμων σημείων. Παρατηρώντας τα ιστογράμματα της μαγνήτισης και της ενέργειας καθώς και τα γραφήματα της μαγνητικής επιδεκτικότητας (Σχ. 5.4) και της ειδικής θερμότητας (Σχ. 5.5) διαπιστώνεται ότι υπάρχει η εξής αλληλουχία θερμοκρασιών για κάθε L :

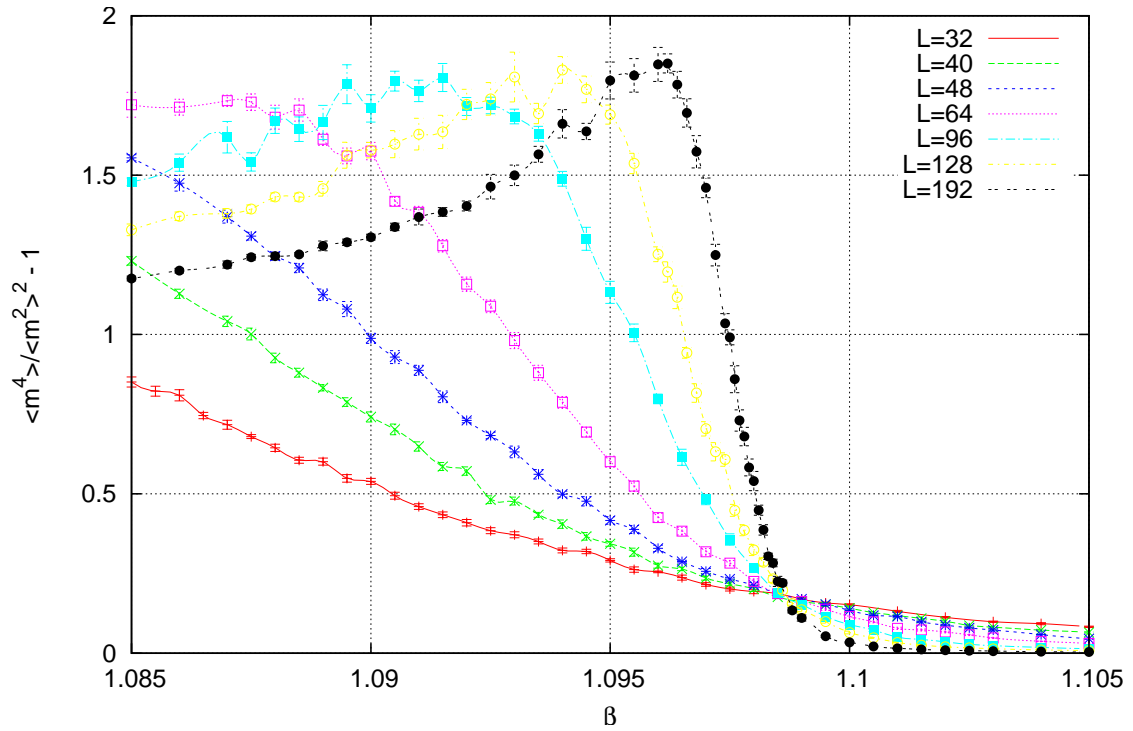
- Μια θερμοκρασία β_1 στην οποία το ιστόγραμμα της μαγνήτισης ($h(m)$) παρουσιάζει δυο κορυφές ίσου ύψους (χ_{max})
- Μια θερμοκρασία $\beta_2 > \beta_1$ στην οποία το γράφημα της μαγνητικής επιδεκτικότητας γίνεται μέγιστο
- Μια θερμοκρασία $\beta_3 > \beta_2$ στην οποία το ιστόγραμμα της ενέργειας ($h(e)$) παρουσιάζει δυο (δισδιάκριτες) κορυφές ίσου ύψους
- Μια θερμοκρασία $\beta_4 > \beta_3$ για την οποία το γράφημα της ειδικής θερμότητας γίνεται μέγιστο (c_{max}).

Όπως φαίνεται και στον πίνακα 5.1, τα ψευδοκρίσιμα αυτά σημεία έχουν την τάση να συμπέσουν καθώς το L αυξάνεται, και μάλιστα με την εξής σειρά:

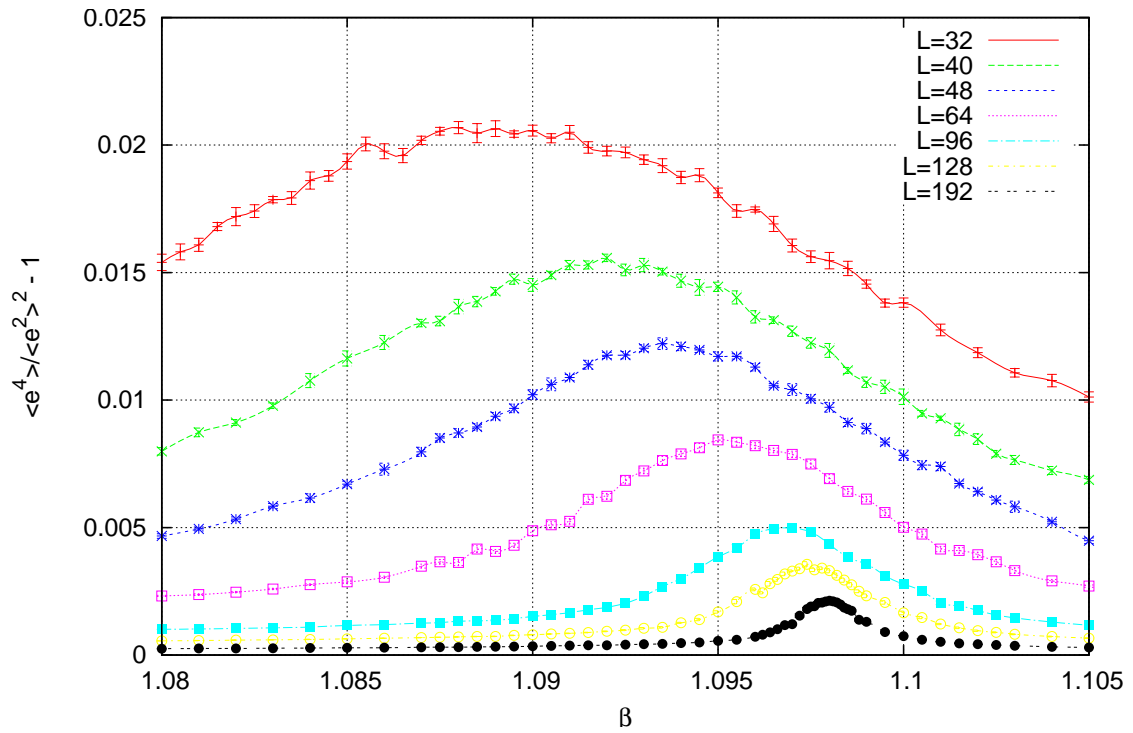
- Στα μικρότερα L παρατηρείται η τάση σύγκλισης των 'μαγνητικών' θερμοκρασιών προς μια ενιαία τιμή β_m , δηλ. $\beta_1 \rightarrow \beta_2 \rightarrow \beta_m$ και των 'ενεργειακών' προς μια β_e , δηλ. $\beta_3 \rightarrow \beta_4 \rightarrow \beta_e$.
- Όσο μεγαλώνουν τα L εμφανίζεται επιπλέον η τάση σύγκλισης των β_e και β_m προς μια ενοποιημένη ψευδοκρίσιμη θερμοκρασία β_{pc} .

L	c_{max}	$h(e)$	χ_{max}	$h(m)$
32	1.0920	1.0910	1.0890	1.0880
40	1.0930	1.0925	1.0920	1.0910
48	1.0950	1.0945	1.0935	1.0925
64	1.0960	1.0955	1.0950	1.0945
96	1.0971	1.0970	1.0965	1.0965
128	1.0976	1.0975	1.0974	1.0974
192	1.0980	1.0980	1.0978	1.0978

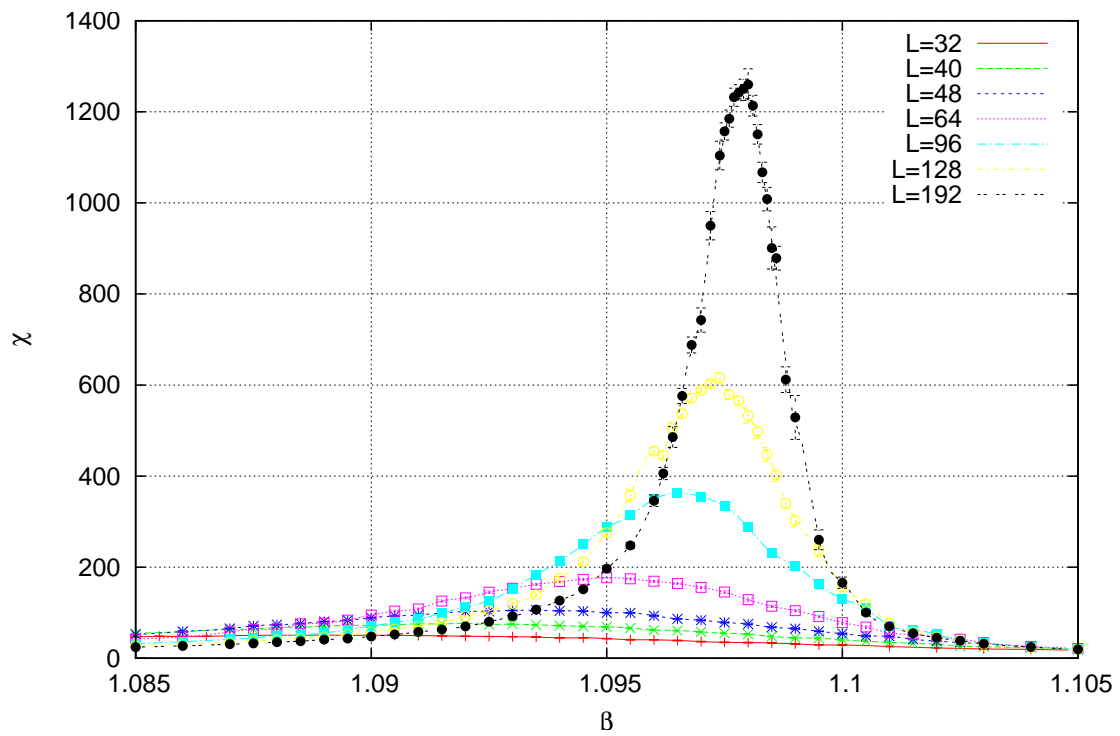
Πίνακας 5.1: Ψευδοκρίσιμα σημεία για $q = 4$ Σχήμα 5.1: Μαγνήτιση για $q = 4$ με S-W, 32×10^4 sweeps



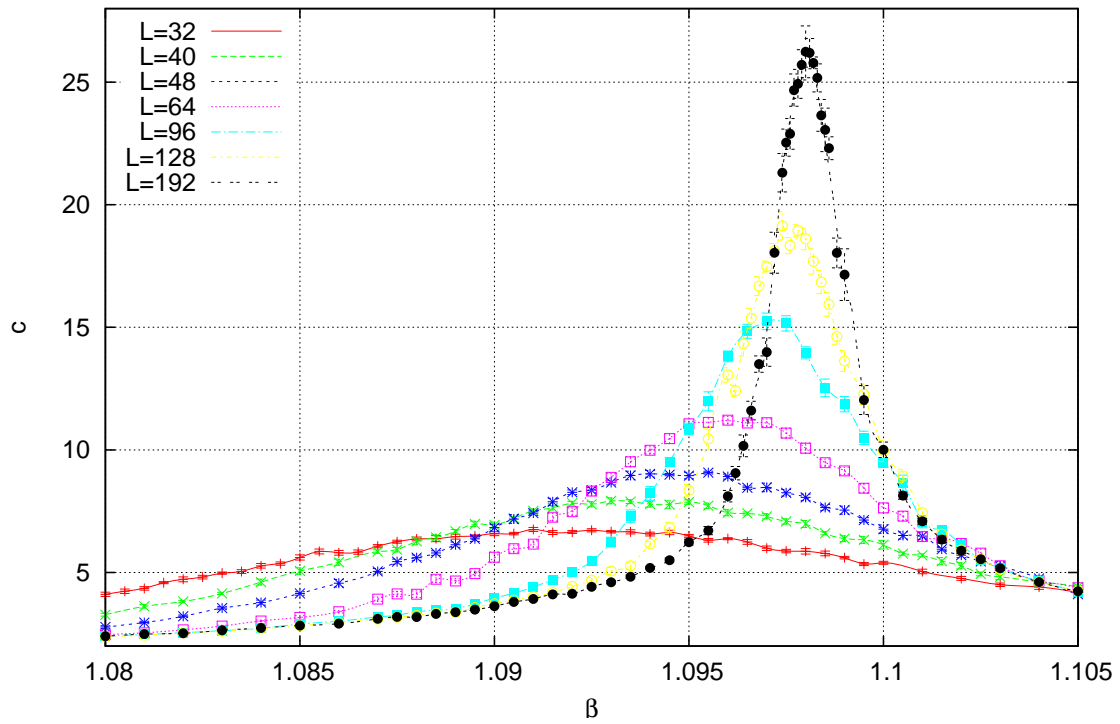
Σχήμα 5.2: Binder Cumulant για $q = 4$ με S-W, 32×10^4 sweeps



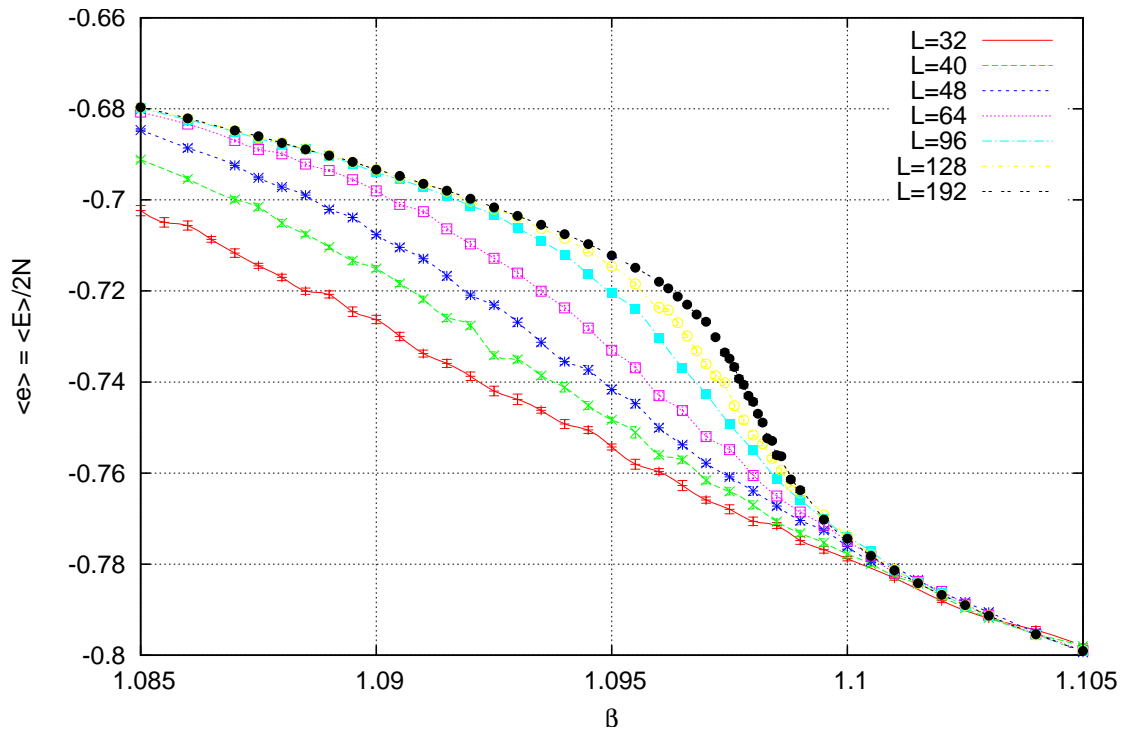
Σχήμα 5.3: Energy Cumulant για $q = 4$ με S-W, 32×10^4 sweeps



Σχήμα 5.4: Μαγνητική επιδεκτικότητα για $q = 4$ με S-W, 32×10^4 sweeps



Σχήμα 5.5: Ειδική θερμότητα για $q = 4$ με S-W, 32×10^4 sweeps



Σχήμα 5.6: Ενέργεια ανά δεσμό για $q = 4$ με S-W, 32×10^4 sweeps

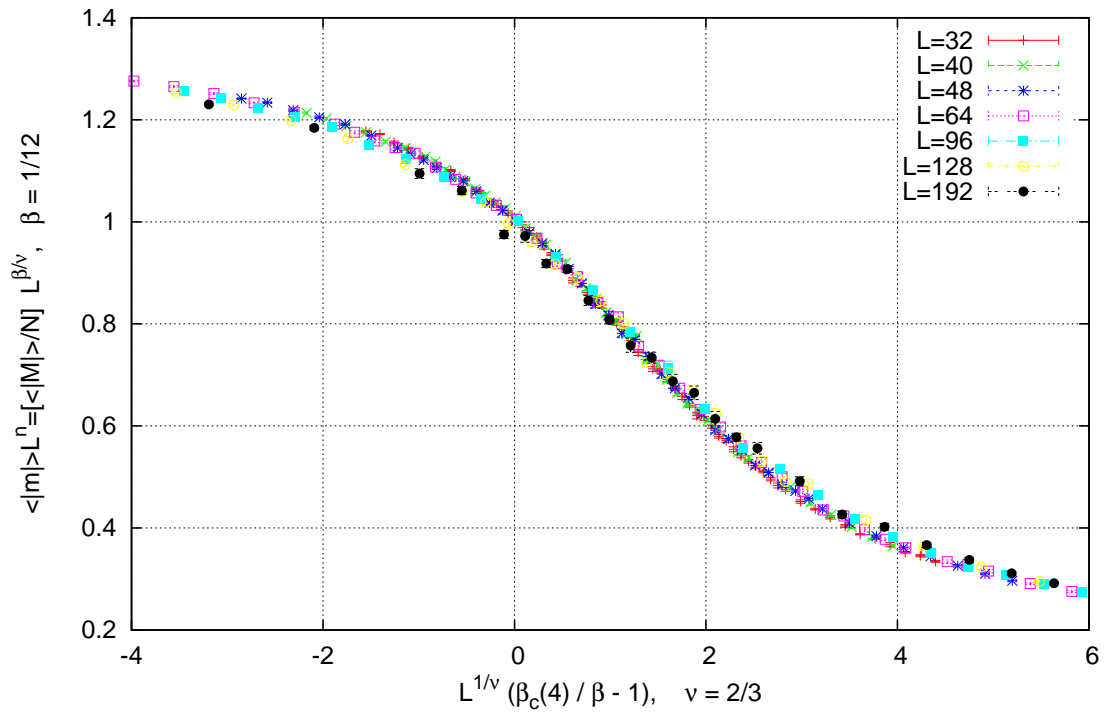
5.2 Γραφήματα βάθμωσης & κρίσιμοι εκθέτες

Χωρίς παρεκκλίσεις από την πρακτική που έχουμε υιοθετήσει μέχρι τώρα, εκμεταλλευόμαστε τους γνωστούς κρίσιμους εκθέτες του $q = 4$ (5.2) και για $\nu = 2/3$ εκτιμούμε το κρίσιμο σημείο:

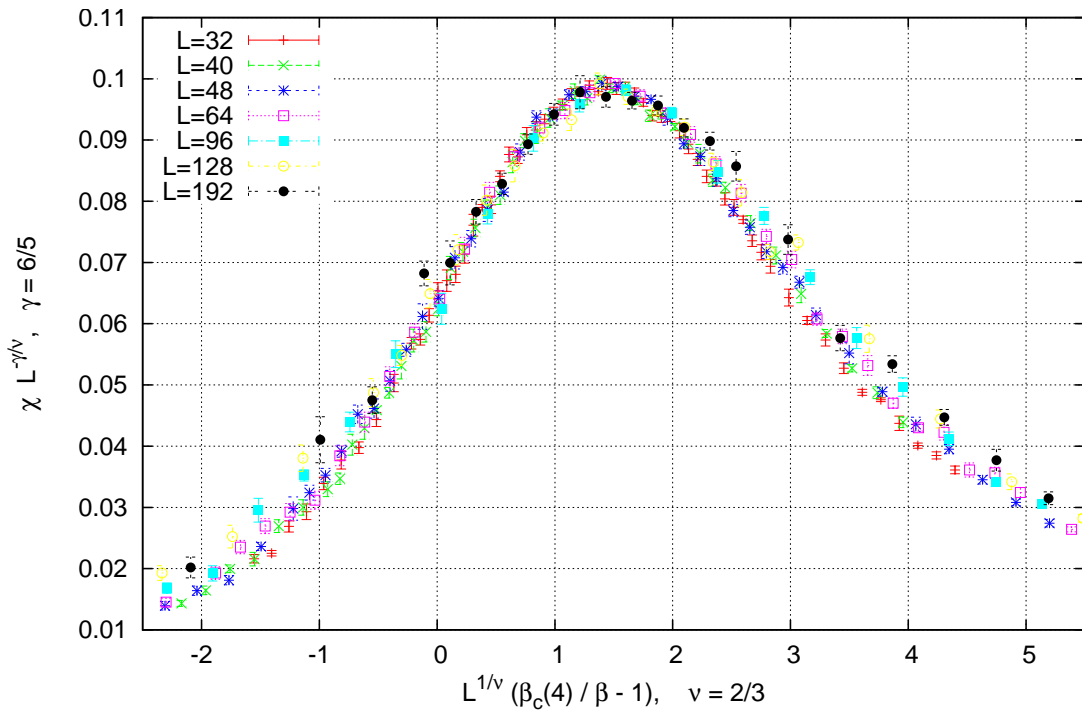
$$\beta_{fss}(4) \approx 1.09855 \quad (5.3)$$

Μέγεθος	Εκθέτης	Τιμή
Μαγνήτιση	β	1/2
Μαγνητική επιδεκτικότητα	γ	6/5
Ειδική θερμότητα	α	1/2

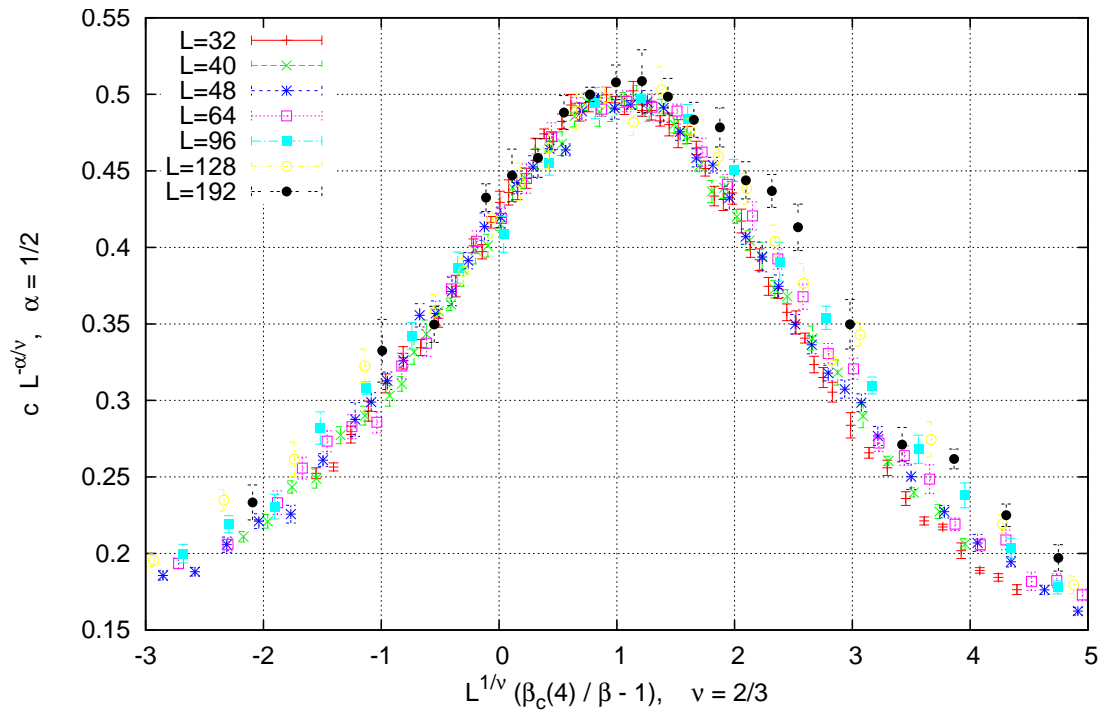
Πίνακας 5.2: Κρίσιμοι εκθέτες για $q = 4$



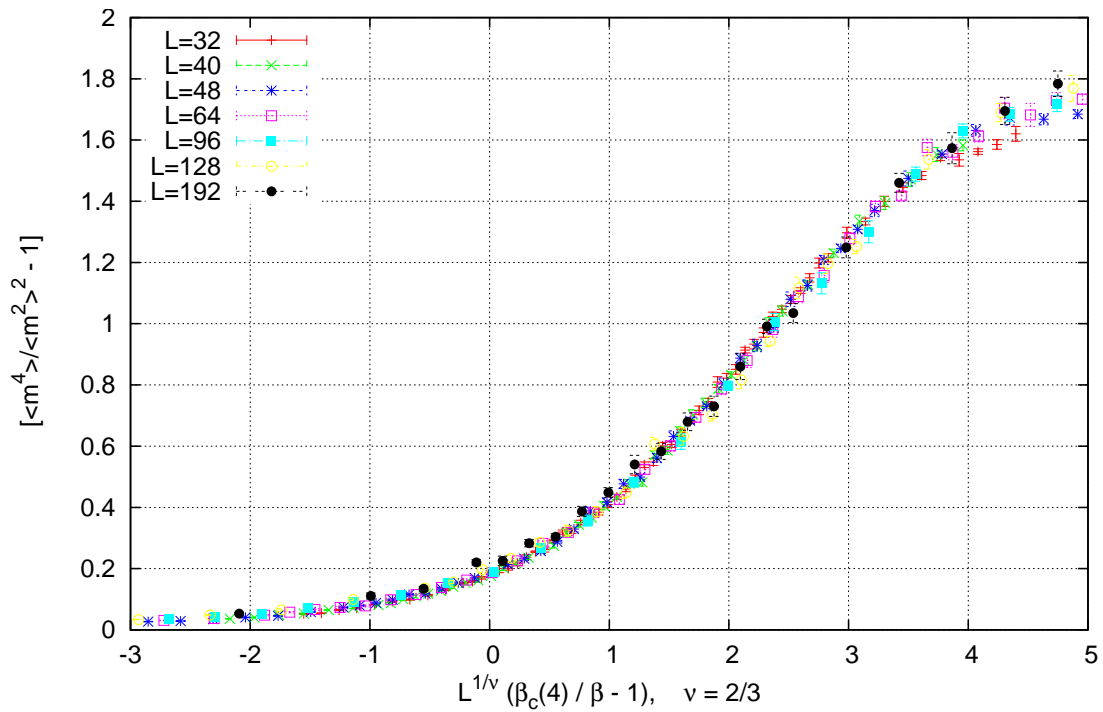
Σχήμα 5.7: Βάθμωση μαγνήτισης για $q = 4$ με S-W, 32×10^4 sweeps



Σχήμα 5.8: Βάθμωση μαγνητικής επιδεκτικότητας για $q = 4$ με S-W, 32×10^4 sweeps



Σχήμα 5.9: Βάθμωση ειδικής θερμότητας για $q = 4$ με S-W, 32×10^4 sweeps



Σχήμα 5.10: Βάθμωση Binder Cumulant για $q = 4$ με S-W, 32×10^4 sweeps

5.3 Επί του κρίσιμου σημείου

Ακολουθώντας την πεπατημένη εξάγουμε και πάλι τα ψευδοκρίσιμα σημεία από τα μέγιστα των καμπυλών της μαγνητικής επιδεκτικότητας του $\Sigma\chi$. 5.4. Για τα σημεία αυτά εκτελέστηκαν νέες προσομοιώσεις με αριθμό sweeps και ανεξάρτητων μετρήσεων που φαίνονται στον πίνακα 5.3. Οι ανεξάρτητες μετρήσεις, δε, υπολογίστηκαν μέσω των ολοκληρωμένων χρόνων αυτοσυσχέτισης του γραφήματος 5.4.

L	β_{pc}	τ_{int} (sweeps)	sweeps	Ανεξάρτητες μετρήσεις
32	1.0890	35	40×10^4	5.7×10^3
40	1.0920	42	40×10^4	4.8×10^3
48	1.0935	52	40×10^4	3.8×10^3
64	1.0950	60	60×10^4	5.0×10^3
96	1.0965	92	80×10^4	4.3×10^3
128	1.0975	115	150×10^4	6.5×10^3
192	1.0978	169	200×10^4	5.9×10^3

Πίνακας 5.3: Ανεξάρτητες μετρήσεις στο κρίσιμο σημείο για $q = 4$

Προσαρμόζοντας τη νέα σειρά αριθμητικών δεδομένων στην εξίσωση (2.15) παίρνουμε την εκτίμηση του κρίσιμου σημείου που απεικονίζεται και στο $\Sigma\chi$. 5.12:

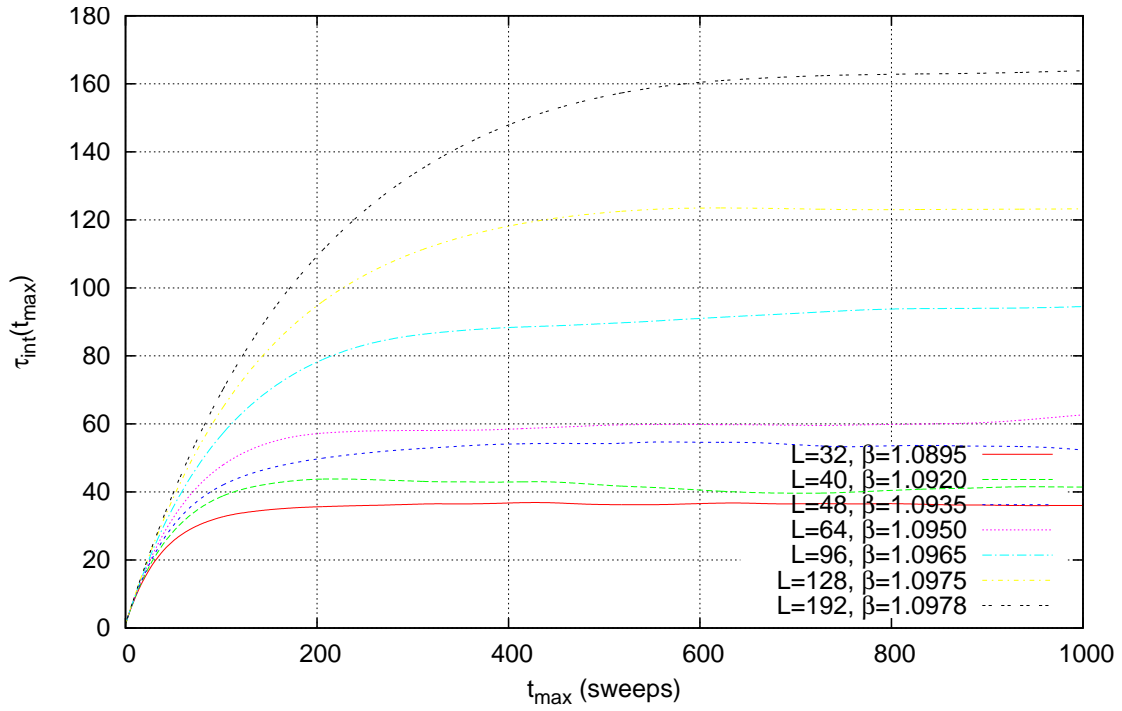
$$\beta_{num}(4) = 1.0985 \pm 0.0001, \quad (0.01\%) \quad (5.4)$$

$$c(4) = -1.70 \pm 0.04, \quad (2.3\%)$$

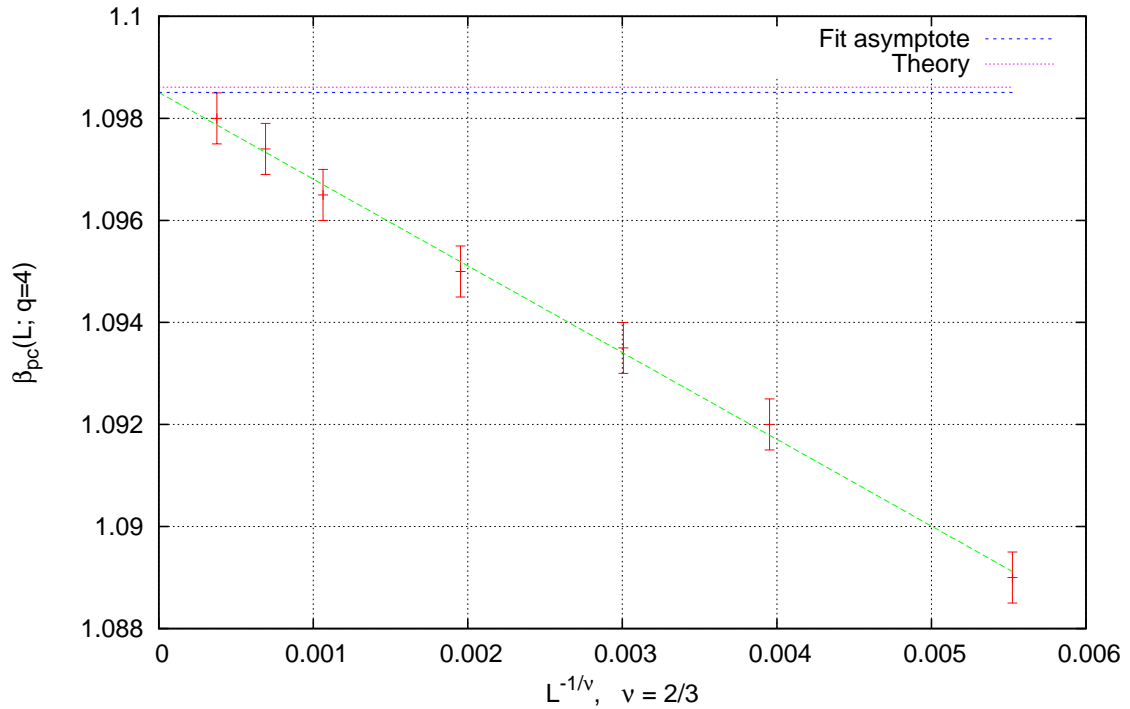
Επιπλέον, σε αντιστοιχία με την περίπτωση του $q = 3$, καταγράφονται σε πίνακα οι λόγοι μεγίστων-ελαχίστων των ιστογραμμάτων μαγνήτισης του $\Sigma\chi$. 5.13, τα οποία φέρουν πιο έντονα δευτερεύοντα μέγιστα κοντά στις χαμηλές μαγνητίσεις. Τα δεδομένα αυτά, παρόλα αυτά, δεν μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την εξαγωγή συμπερασμάτων, πιθανότατα λόγω επιδράσεων του πεπερασμένου των πλεγμάτων. Τέλος, στο $\Sigma\chi$. 5.14 των ιστογραμμάτων της ενέργειας παρατηρείται για πρώτη φορά και δεύτερη διακρισίμη κορυφή.

L	M_1	M_2	m
32	0.98	0.68	0.56
40	0.98	0.69	0.55
48	0.98	0.65	0.54
64	0.98	0.78	0.61
96	0.98	0.80	0.62
128	0.98	0.54	0.45
192	0.98	0.84	0.62

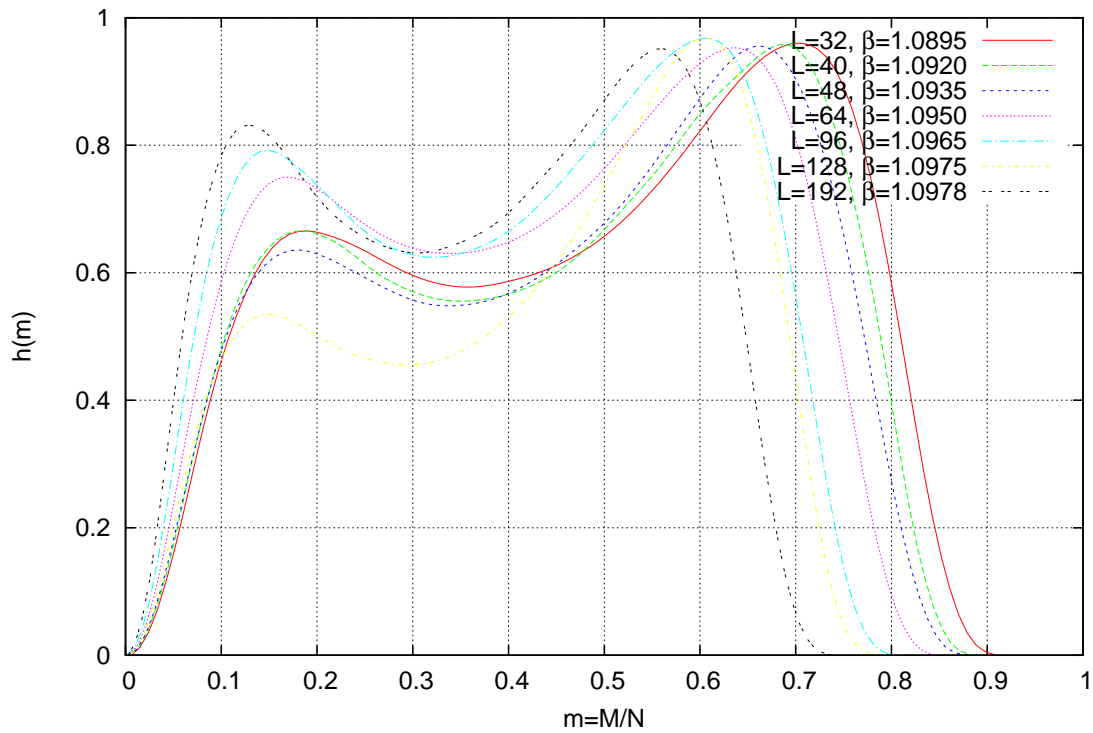
Πίνακας 5.4: Αχρότατα ιστογραμμάτων μαγνήτισης για $q = 4$



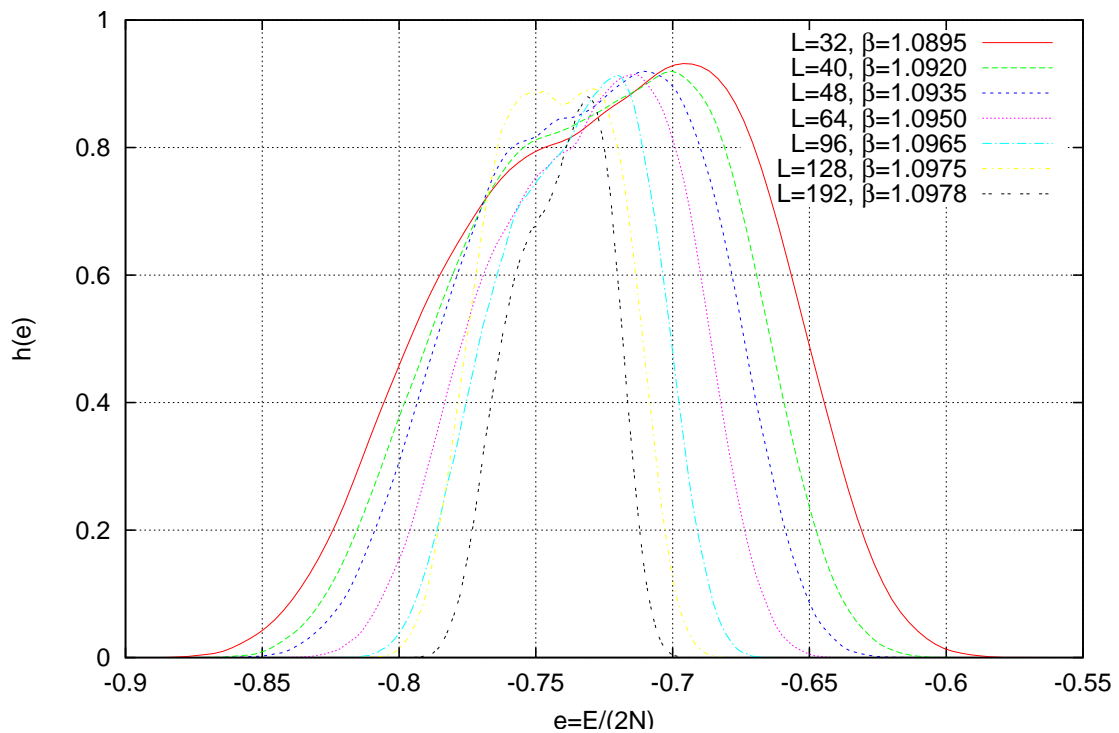
Σχήμα 5.11: τ_{int} για $q = 4$ με S-W στο κρίσιμο σημείο



Σχήμα 5.12: FSS $L^{-3/2}$ για $q = 4$ με S-W στο κρίσιμο σημείο



Σχήμα 5.13: Ιστόγραμμα μαγνήτισης για $q = 4$ με S-W στο κρίσιμο σημείο sweeps



Σχήμα 5.14: Ιστόγραμμα ενέργειας για $q = 4$ με S-W στο κρίσιμο σημείο sweeps

Κεφάλαιο 6

Πέντε καταστάσεις ($q = 5$)

6.1 Εντοπισμός του κρίσιμου σημείου

Το επόμενο βήμα, δηλαδή το $q = 5$, είναι η πρώτη κατάσταση με μετάβαση φάσης αμιγώς πρώτης τάξης γύρω από το

$$\beta_c(5) = \ln(1 + \sqrt{5}) \approx 1.1744 \quad (6.1)$$

Οι καμπύλες του Binder Cumulant (Σχ. 6.2) συνέρχονται μέσα στο διάστημα

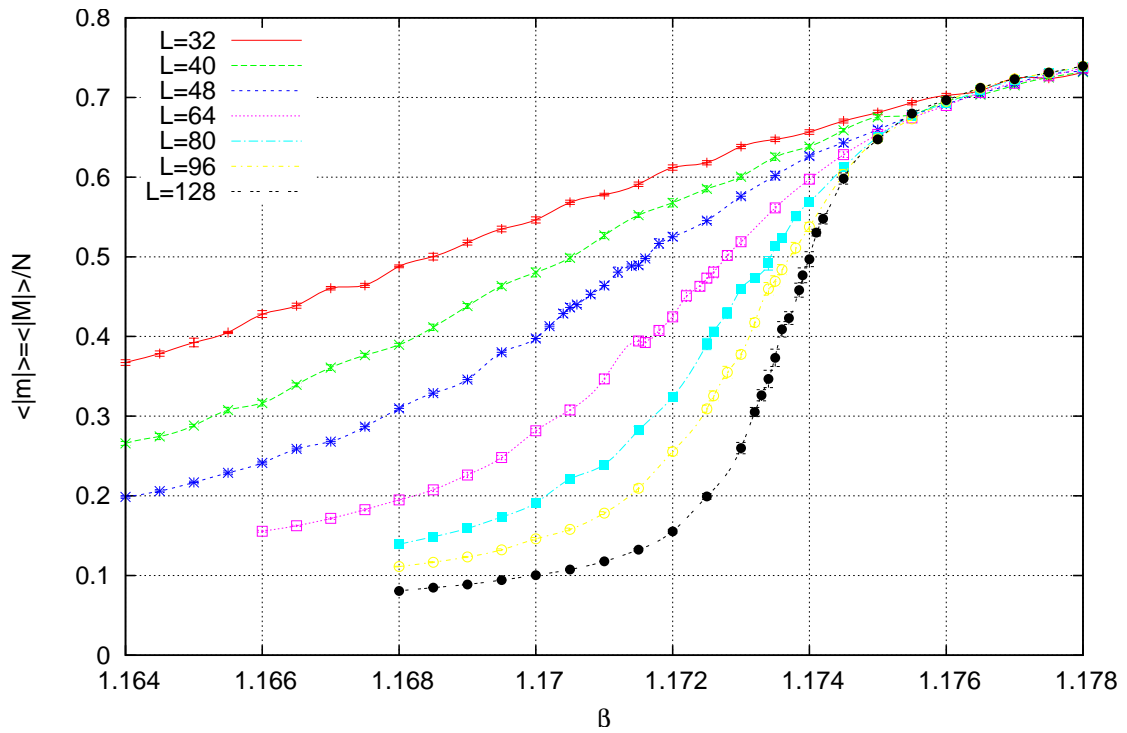
$$\beta_{binder}(5) \in [1.1742, 1.1746] \quad (6.2)$$

που περιέχει το θεωρητικώς αναμενόμενο $\beta_c(5)$. Στον Energy cumulant (Σχ. 6.3) και στην ενέργεια (Σχ. 6.6) εμφανίζεται καθαρά λανθάνουσα θερμότητα, χαρακτηριστικό μετάβασης πρώτης τάξης.

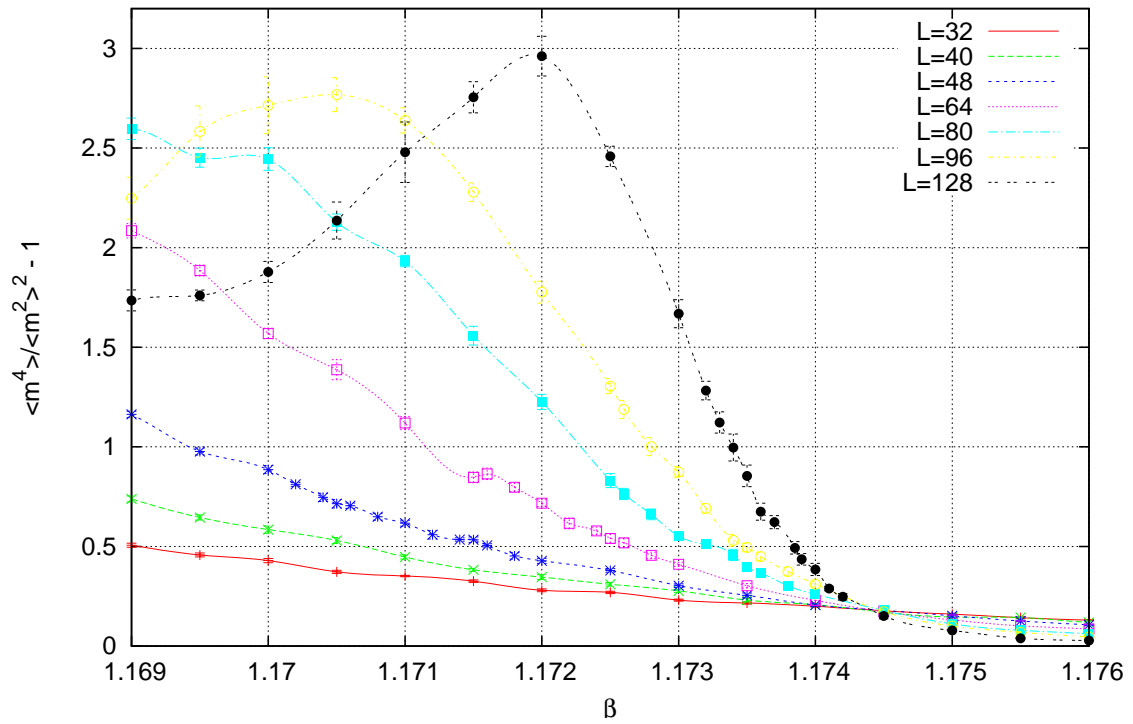
Η τάση ταύτισης των ψευδοκρίσιμων β συνεχίζεται στο $q = 5$ όπως φαίνεται στον πίνακα 6.1. Τα δεδομένα έχουν ληφθεί από τα αντίστοιχα ιστογράμματα και τις καμπύλες ειδικής θερμότητας (Σχ. 6.5) και μαγνητικής επιδεκτικότητας (Σχ. 6.4).

L	c_{max}	$h(e)$	χ_{max}	$h(m)$
32	1.1690	1.1685	1.1680	1.1675
40	1.1705	1.1700	1.1695	1.1690
48	1.1715	1.1715	1.1710	1.1705
64	1.1724	1.1724	1.1720	1.1720
80	1.1729	1.1729	1.1726	1.1726
96	1.1732	1.1732	1.1732	1.1732
128	1.1737	1.1737	1.1736	1.1736

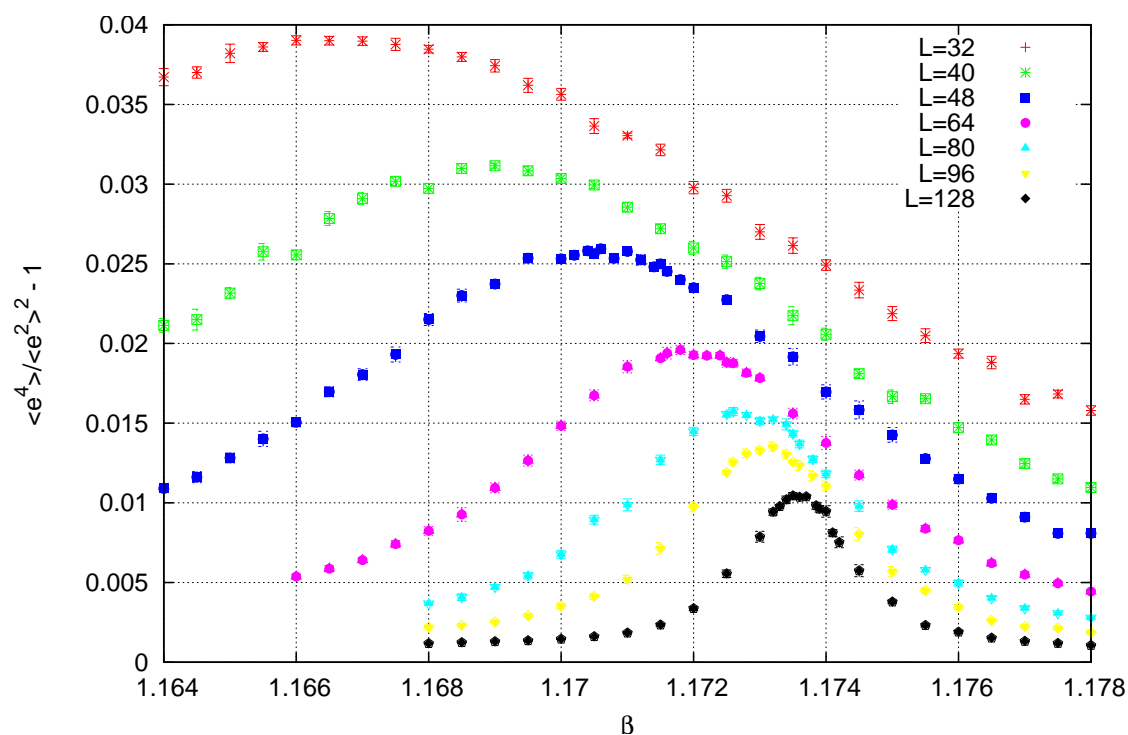
Πίνακας 6.1: Ψευδοκρίσιμα σημεία για $q = 5$



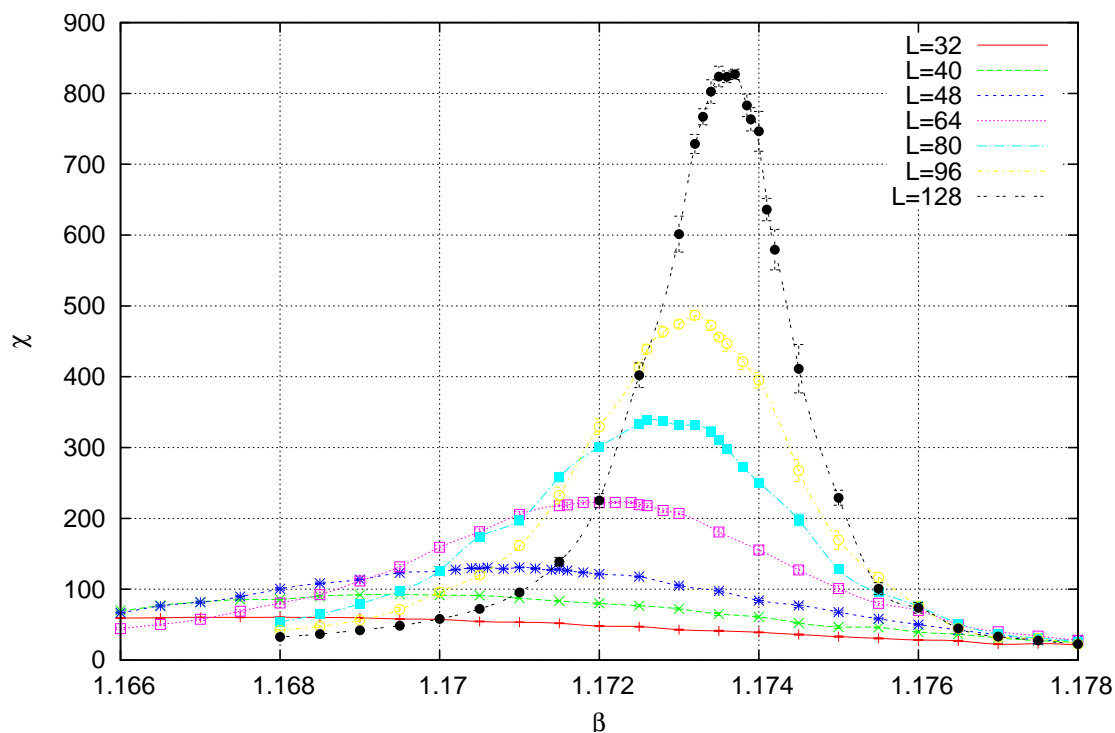
Σχήμα 6.1: Μαγνήτιση για $q = 5$ με S-W, 100×10^4 sweeps



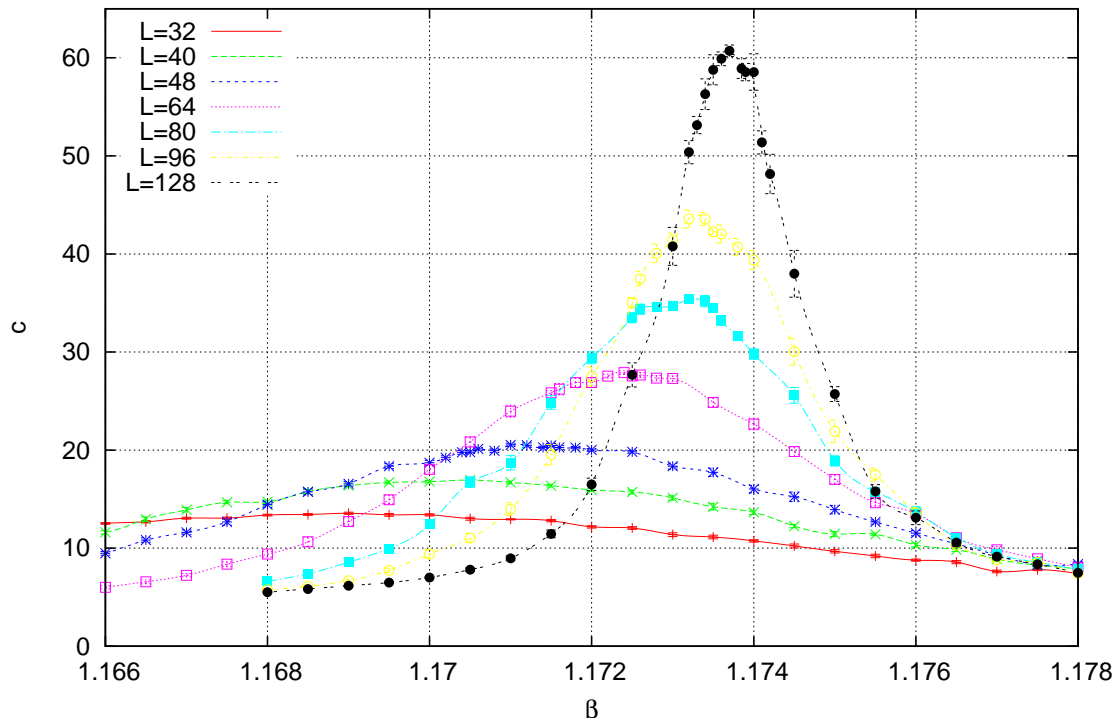
Σχήμα 6.2: Binder Cumulant για $q = 5$ με S-W, 100×10^4 sweeps



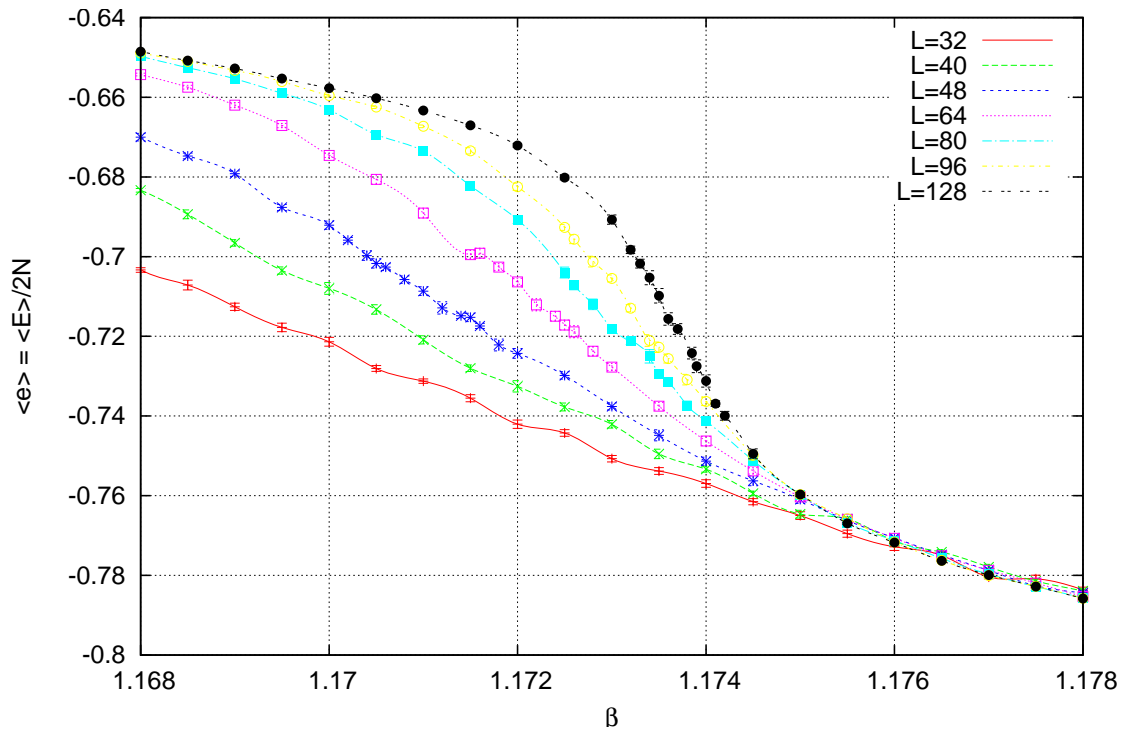
Σχήμα 6.3: Energy Cumulant για $q = 5$ με S-W, 100×10^4 sweeps



Σχήμα 6.4: Μαγνητική επιδεκτικότητα για $q = 5$ με S-W, 100×10^4 sweeps



Σχήμα 6.5: Ειδική θερμότητα για $q = 5$ με S-W, 100×10^4 sweeps



Σχήμα 6.6: Ενέργεια ανά δεσμό για $q = 5$ με S-W, 100×10^4 sweeps

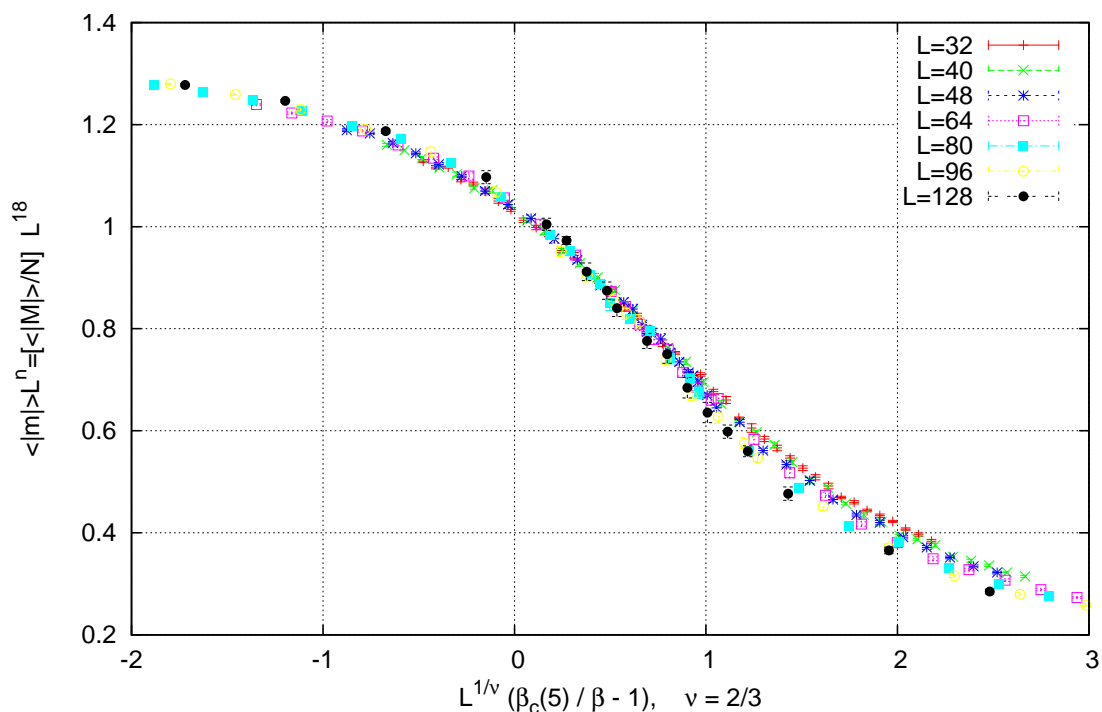
6.2 Γραφήματα βάθμωσης & ψευδο-κρίσιμοι εκθέτες

Το $q = 5$ παρουσιάζει μετάβαση πρώτης τάξης, συνεπώς ο ορισμός κρίσιμων εκθετών είναι αδόκιμος. Παρόλα αυτά αξίζει η απόπειρα προσαρμογής των δεδομένων με τρόπο που προσιδιάζει σε finite size scaling. Η επιλογή των πειραματικών εκθετών (6.2) και για $\nu = 2/3$ οδηγεί σε μια εκτίμηση του κρίσιμου σημείου:

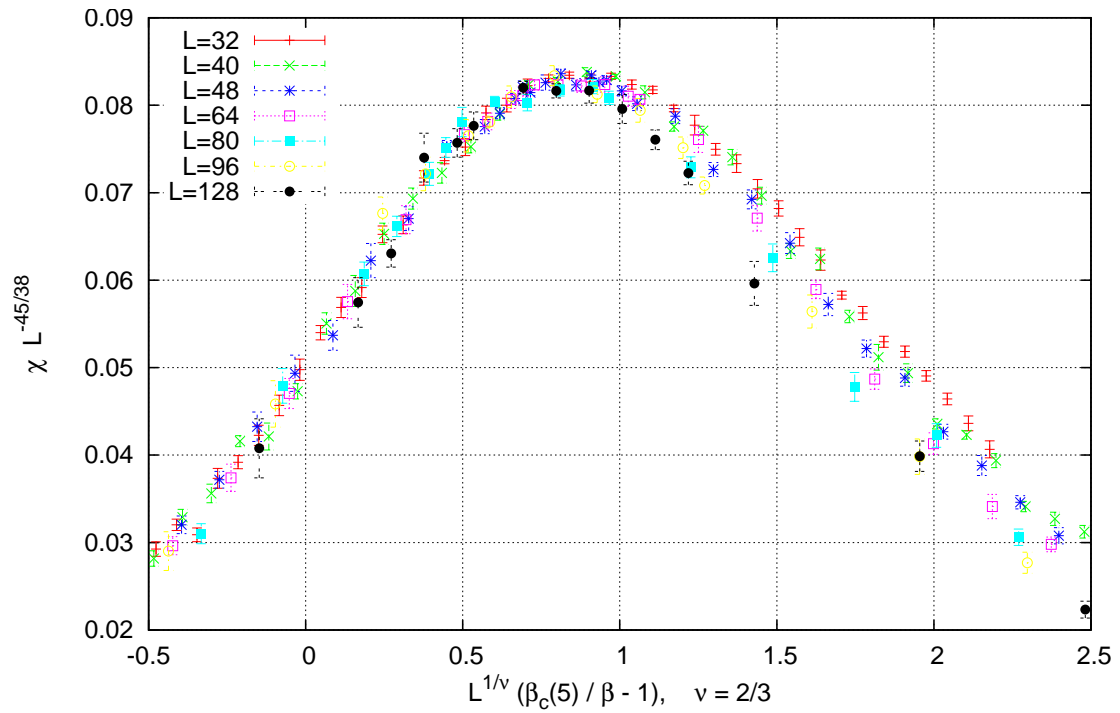
$$\beta_{fss}(5) \approx 1.1744 \quad (6.3)$$

Μέγεθος	Εκθέτης L
Μαγνήτιση	18
Μαγνητική επιδεκτικότητα	-45/38
Ειδική θερμότητα	-27/13
Binder Cumulant	21/2

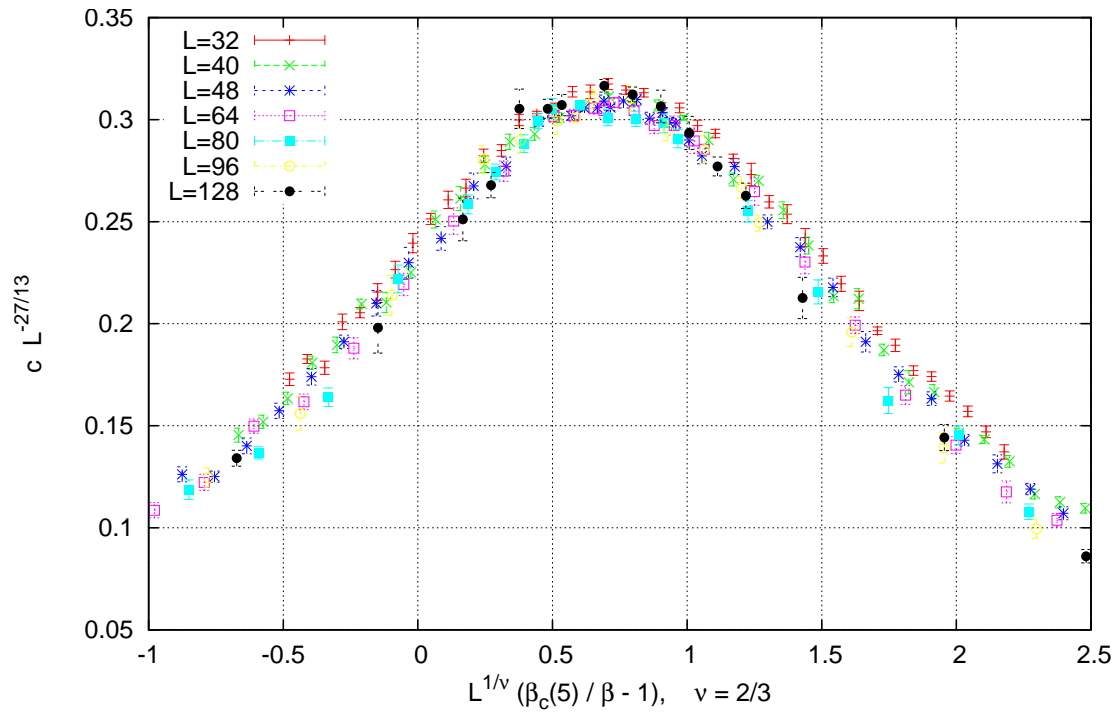
Πίνακας 6.2: Πειραματικοί εκθέτες για $q = 5$



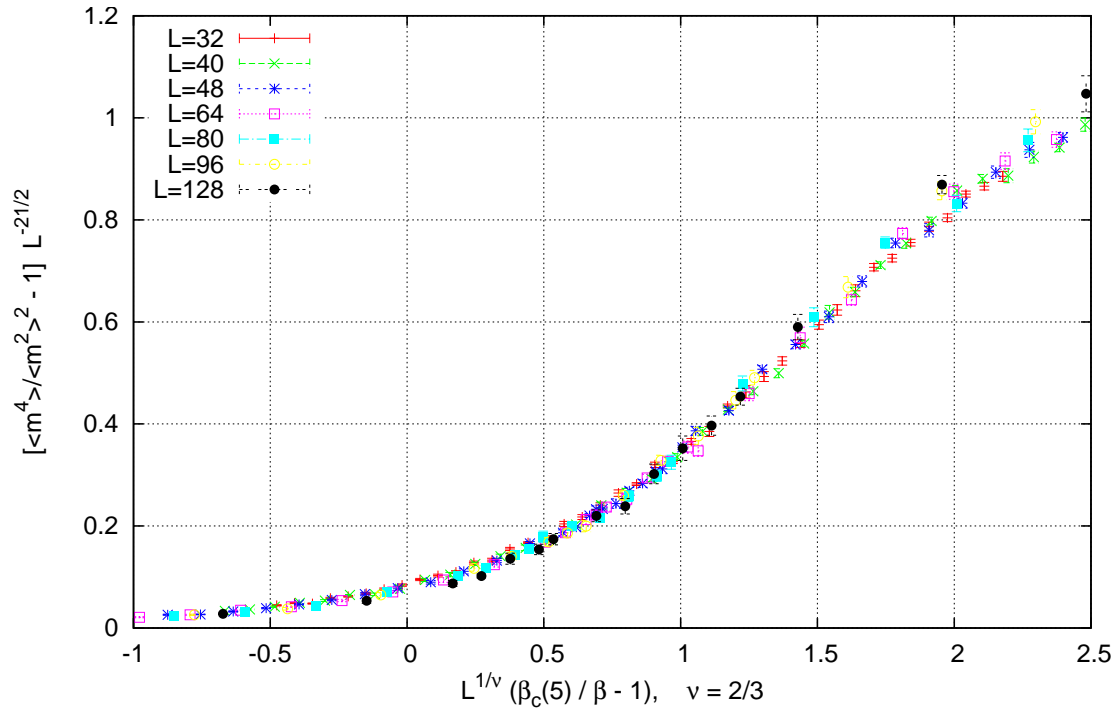
Σχήμα 6.7: Βάθμωση μαγνήτισης για $q = 5$ με S-W, 100×10^4 sweeps



Σχήμα 6.8: Βάθμωση μαγνητικής επιδεικτικότητας για $q = 5$ με S-W, 100×10^4 sweeps



Σχήμα 6.9: Βάθμωση ειδικής θερμότητας για $q = 5$ με S-W, 100×10^4 sweeps



Σχήμα 6.10: Βάθμωση Binder Cumulant για $q = 5$ με S-W, 100×10^4 sweeps

6.3 Επί του κρίσιμου σημείου

L	β_{pc}	τ_{int} (sweeps)	sweeps	Ανεξάρτητες μετρήσεις
32	1.1680	102	100×10^4	4.9×10^3
40	1.1695	124	100×10^4	4.0×10^3
48	1.1710	152	100×10^4	3.3×10^3
64	1.1720	212	100×10^4	2.4×10^3
80	1.1726	330	100×10^4	1.5×10^3
96	1.1732	380	100×10^4	1.3×10^3
128	1.1736	535	100×10^4	0.9×10^3

Πίνακας 6.3: Ανεξάρτητες μετρήσεις στο κρίσιμο σημείο για $q = 5$

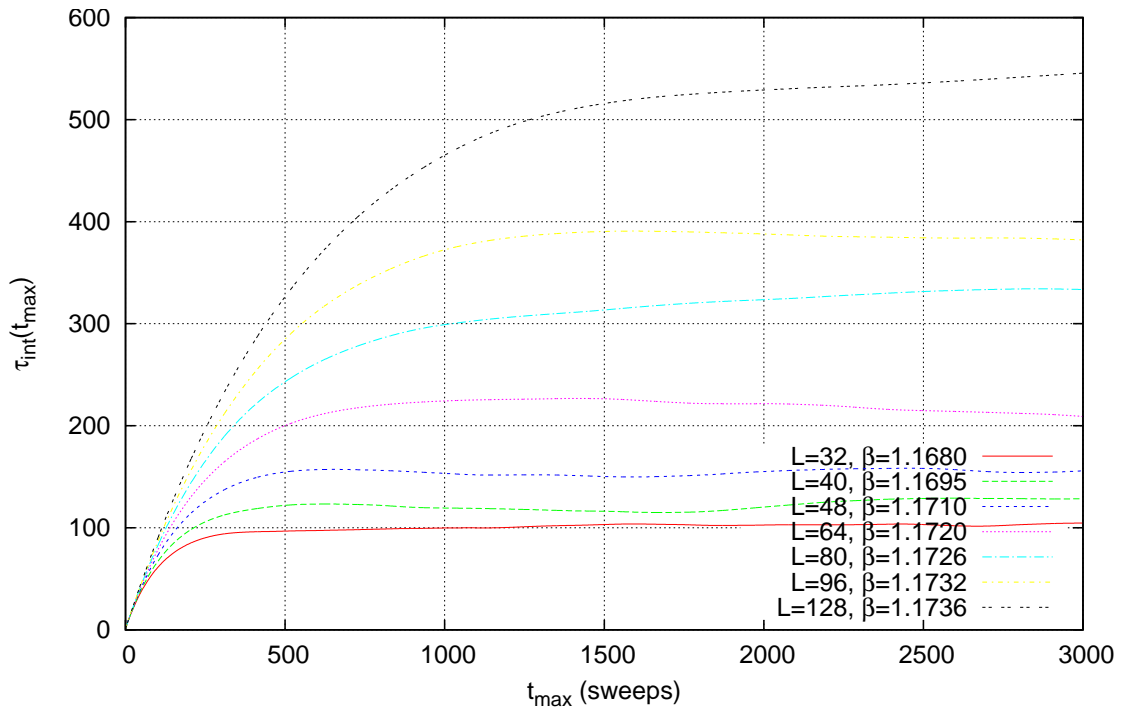
Στην περίπτωση του $q = 5$ δεν νοείται κρίσιμος εκθέτης ν , παρόλα αυτά θα επιχειρηθεί εκτίμηση του $\beta_{num}(5)$ με προσαρμογή των ψευδοκρίσιμων σημείων στην Εξ. (2.15) για $\nu = 2/3$, όπως φαίνεται και στο Σχ. 6.12:

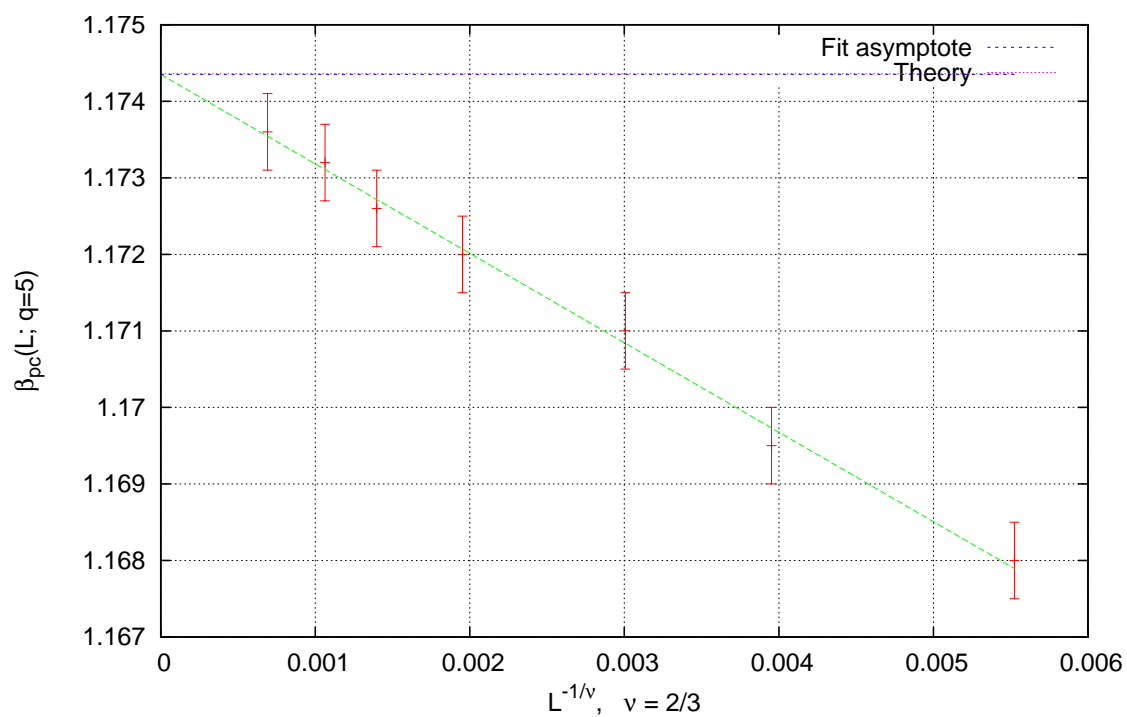
$$\beta_{num}(5) = 1.1744 \pm 0.0001, \quad (0.01\%) \quad (6.4)$$

$$c(5) = -1.2 \pm 0.04, \quad (3.1\%)$$

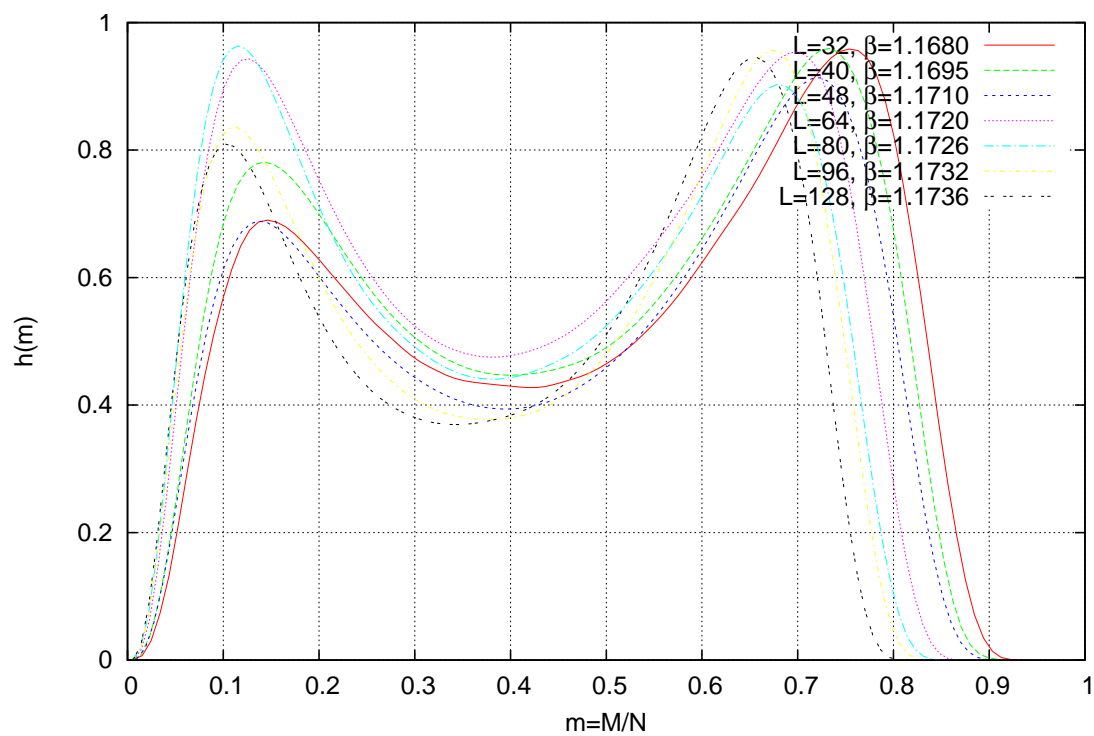
Στα ιστογράμματα ενέργειας και μαγνήτισης φαίνεται και πάλι η συνύπαρξη δυο φάσεων, που είναι ενδεικτική της μετάβασης πρώτης τάξης.

L	M_1	M_2	m
32	0.97	0.71	0.42
40	0.98	0.79	0.44
48	0.97	0.73	0.38
64	0.98	0.98	0.46
80	0.92	0.98	0.44
96	0.98	0.86	0.37
128	0.98	0.83	0.36

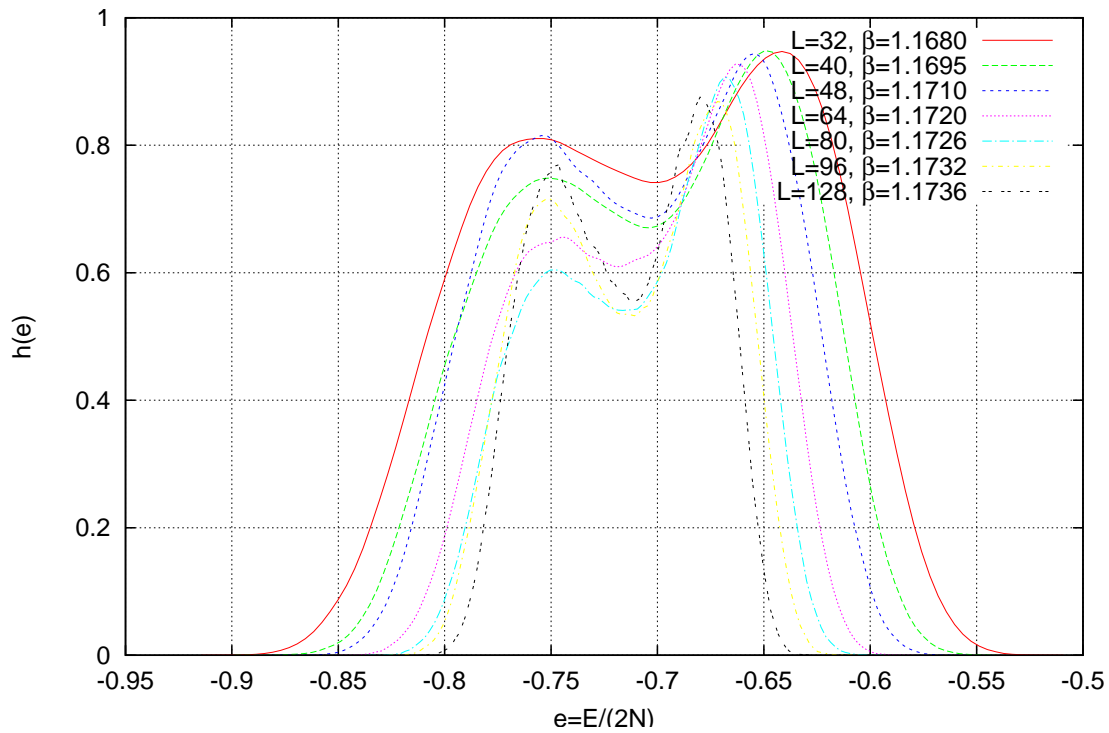
Πίνακας 6.4: Ακρότατα ιστογραμμάτων για $q = 5$ Σχήμα 6.11: τ_{int} για $q = 5$ με S-W στο κρίσιμο σημείο



Σχήμα 6.12: FSS $L^{-3/2}$ για $q = 5$ με S-W στο κρίσιμο σημείο



Σχήμα 6.13: Ιστόγραμμα μαγνήτισης για $q = 5$ με S-W στο κρίσιμο σημείο sweeps



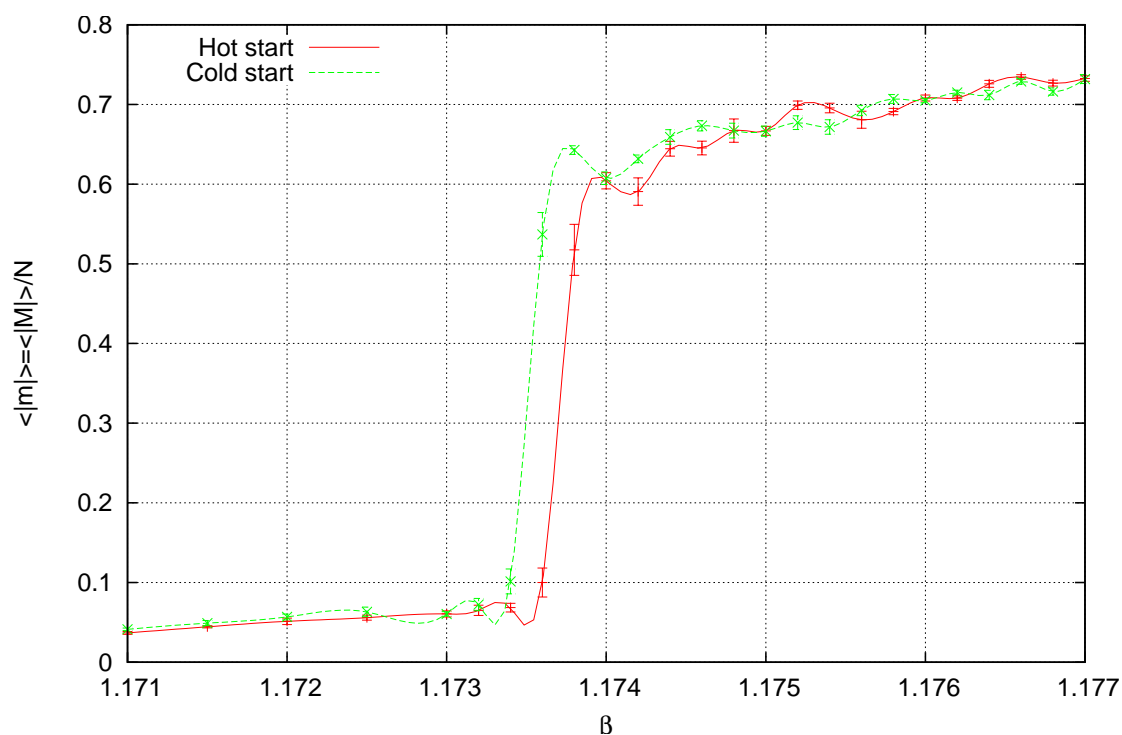
Σχήμα 6.14: Ιστόγραμμα ενέργειας για $q = 5$ με S-W στο κρίσιμο σημείο sweeps

6.4 Καμπύλες υστέρησης

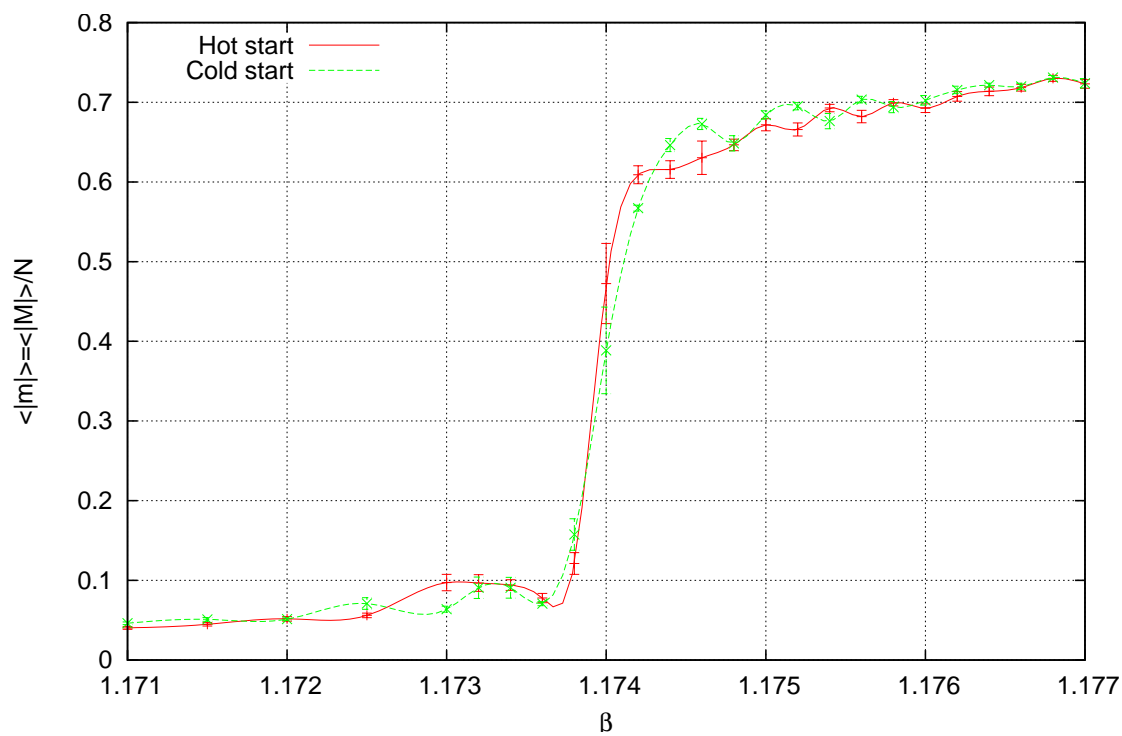
Τα γραφήματα που ακολουθούν αναπαριστούν αυτή τη μαγνητική υστέρηση για μεταβαλλόμενο L και αριθμό sweeps όπως συνοψίζεται στον πίνακα 6.5. Οι συνεχείς γραμμές είναι ενδεικτικές και προστέθηκαν στο γράφημα κυρίως ως οπτικοί οδηγοί. Η μαγνητική υστέρηση, που δεν παρατηρήθηκε στα μικρότερα q , είναι απόδειξη μετάβασης πρώτης τάξης.

L	sweeps	β_1	β_2	$\Delta\beta$
320	1000	1.1736	1.1738	0.0002
320	2000	1.1740	1.1740	0.0000
320	4000	1.1740	1.1740	0.0000
768	1000	1.1740	1.1748	0.0008
768	2000	1.1740	1.1748	0.0008
768	4000	1.1740	1.1746	0.0006
768	8000	1.1742	1.1744	0.0002
1024	1000	1.1742	1.1750	0.0008
1024	2000	1.1744	1.1750	0.0006
1024	4000	1.1742	1.1746	0.0004

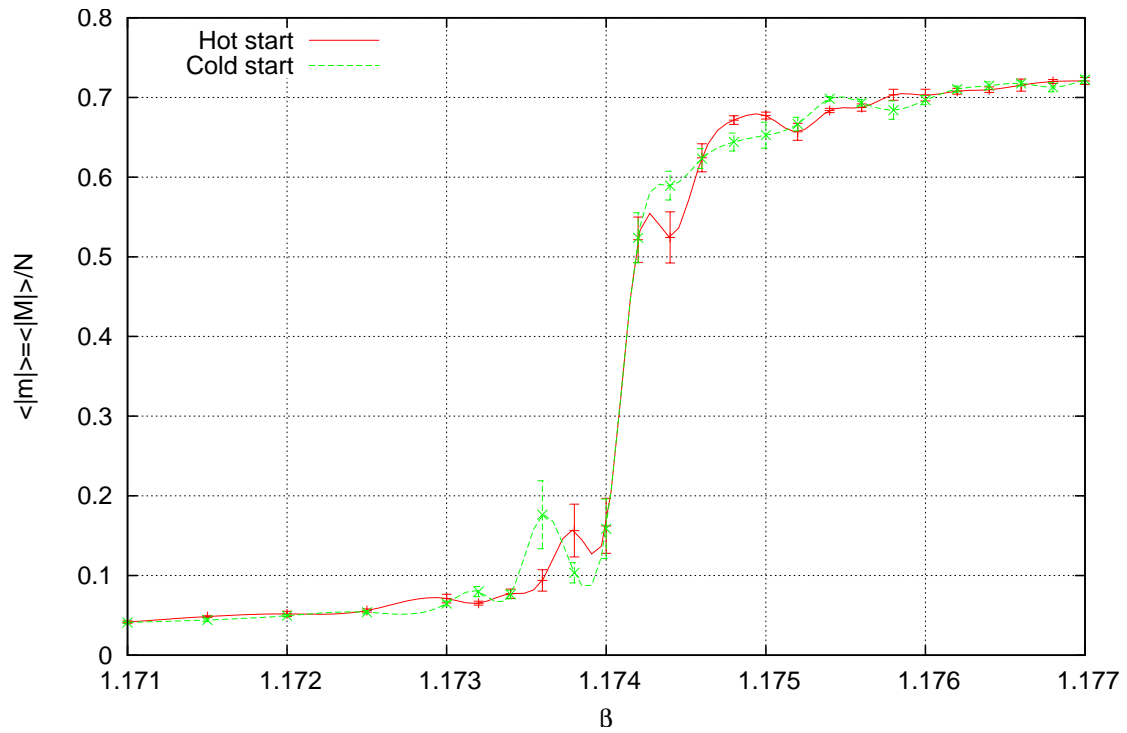
Πίνακας 6.5: Υστέρηση για $q = 5$



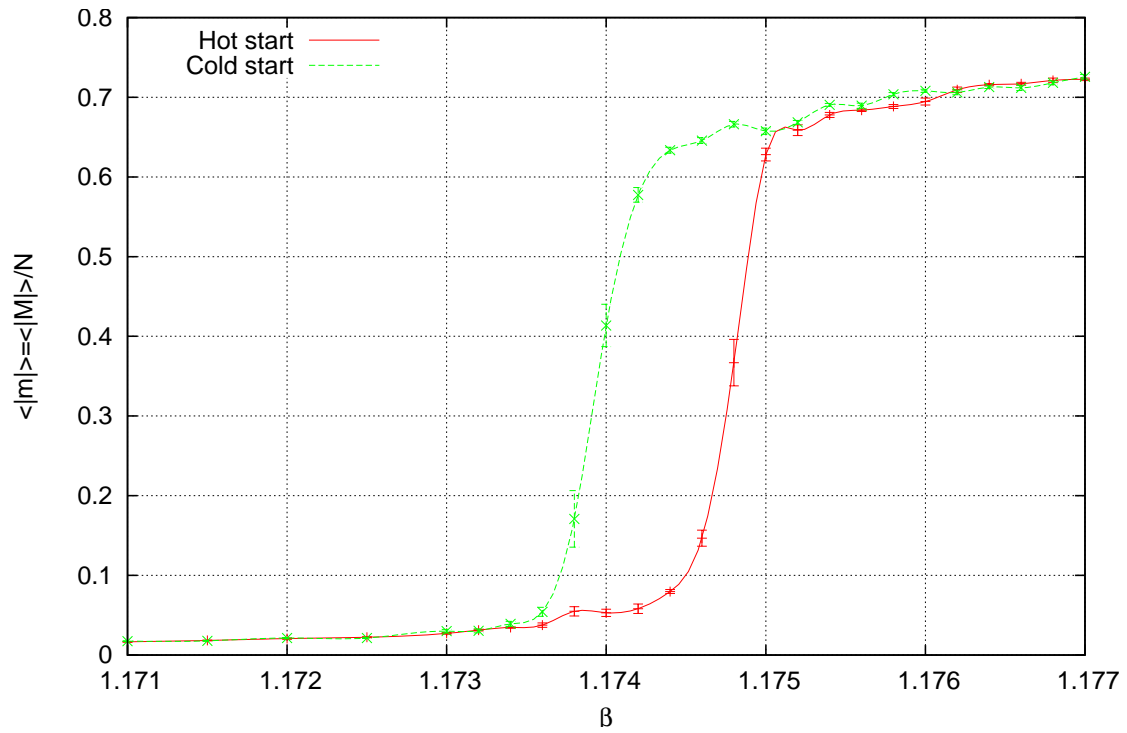
Σχήμα 6.15: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 5$, $L = 320$ με S-W στα 1000 sweeps



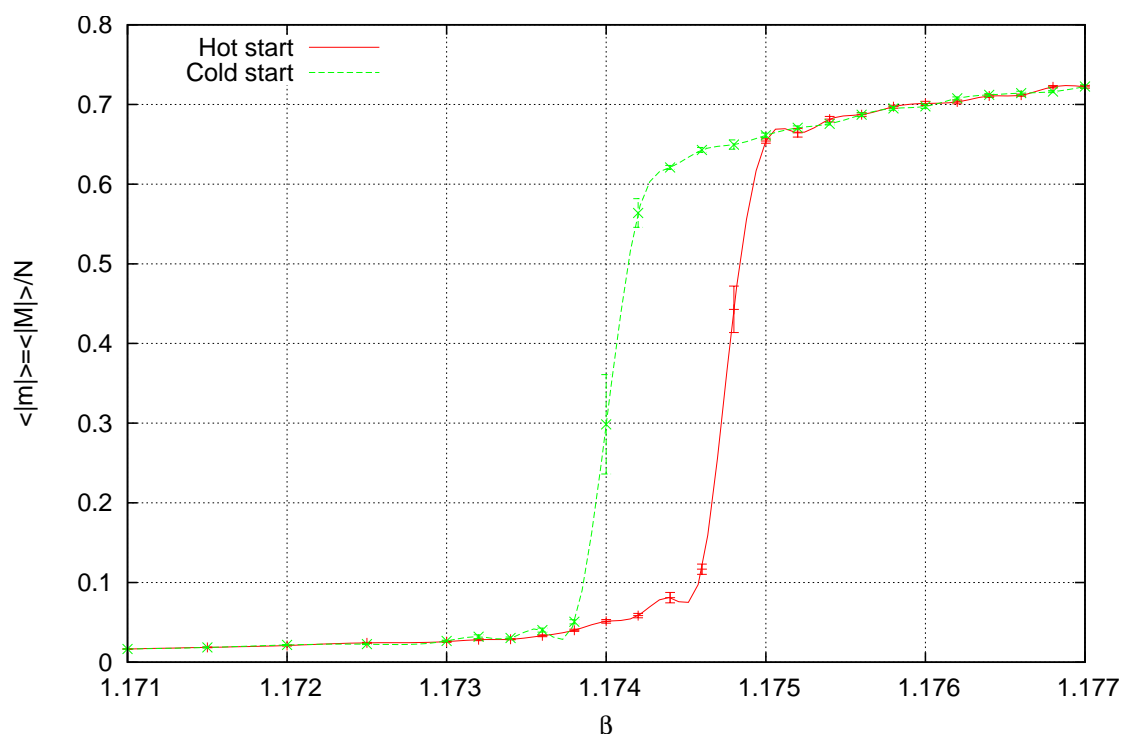
Σχήμα 6.16: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 5$, $L = 320$ με S-W στα 2000 sweeps



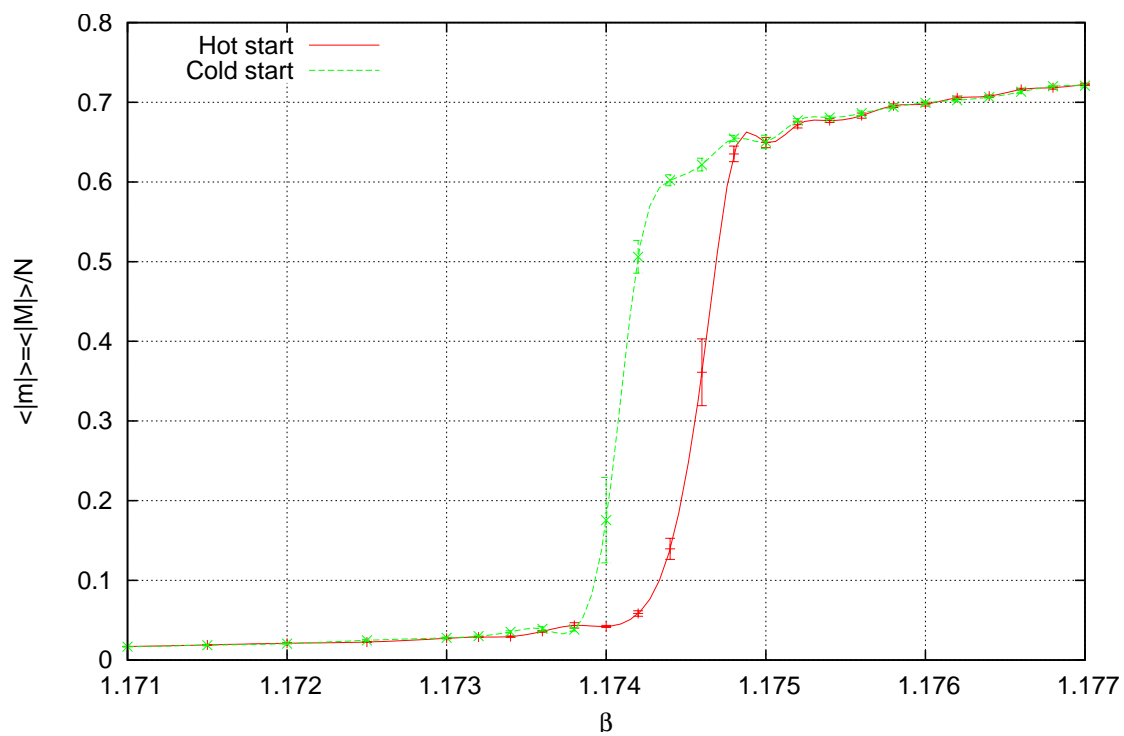
Σχήμα 6.17: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 5$, $L = 320$ με S-W στα 4000 sweeps



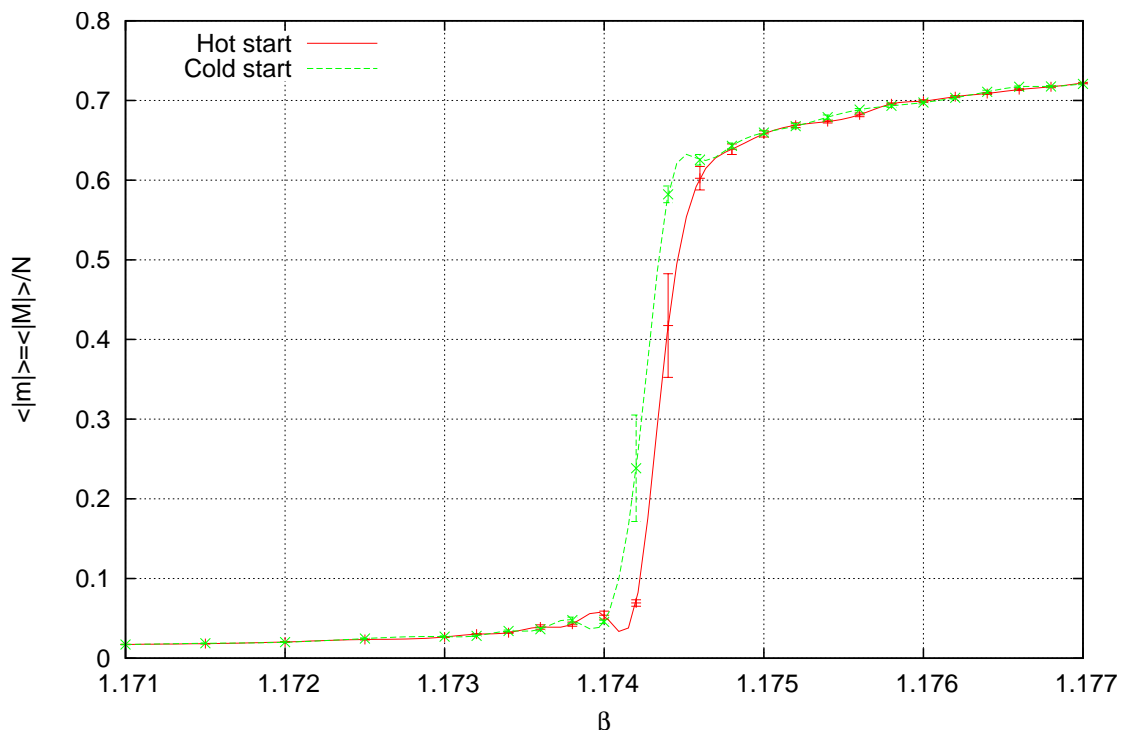
Σχήμα 6.18: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 5$, $L = 768$ με S-W στα 1000 sweeps



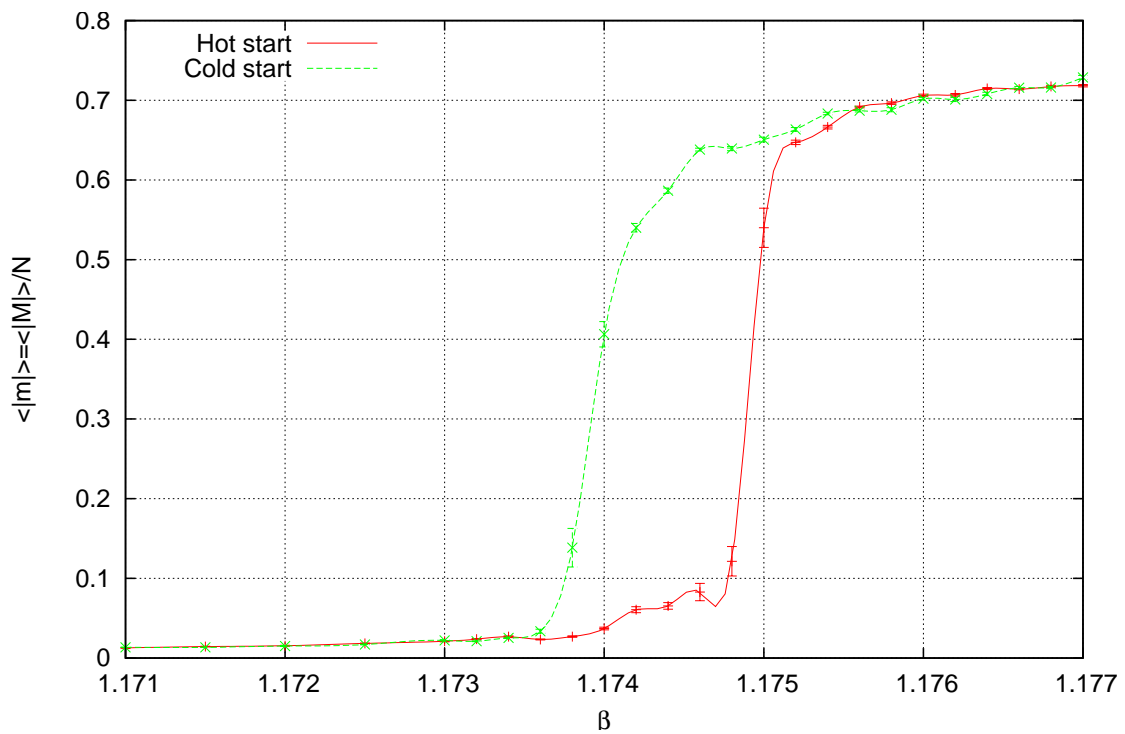
Σχήμα 6.19: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 5$, $L = 768$ με S-W στα 2000 sweeps



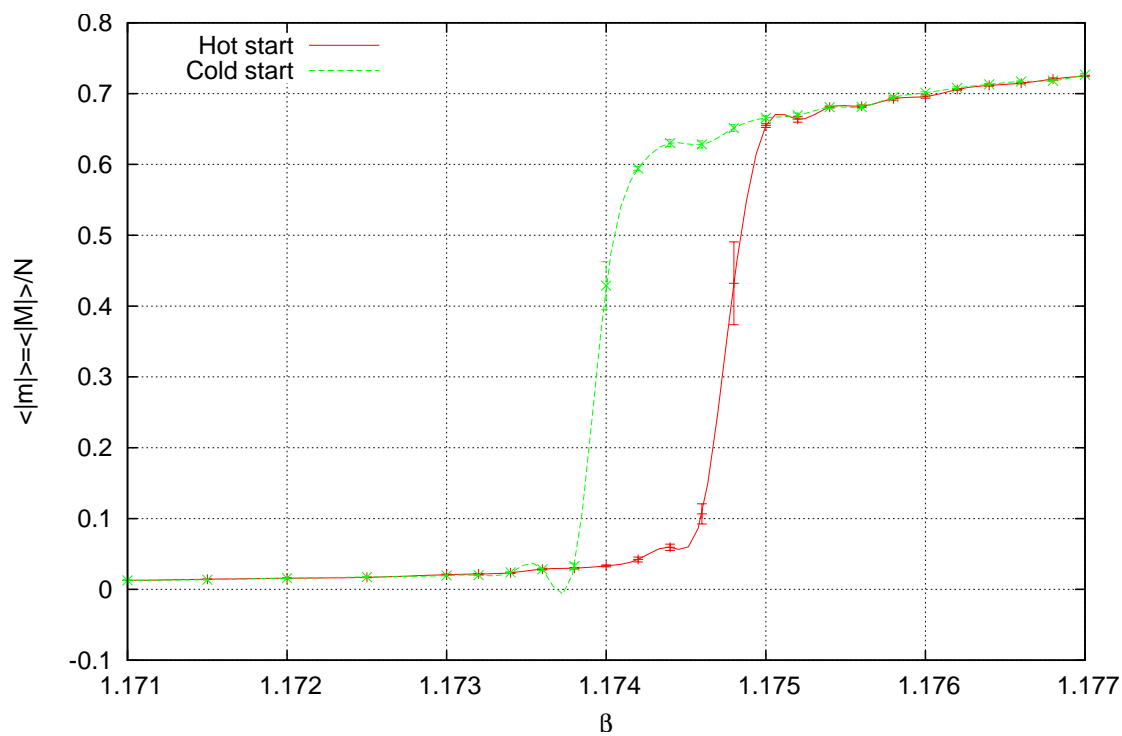
Σχήμα 6.20: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 5$, $L = 768$ με S-W στα 4000 sweeps



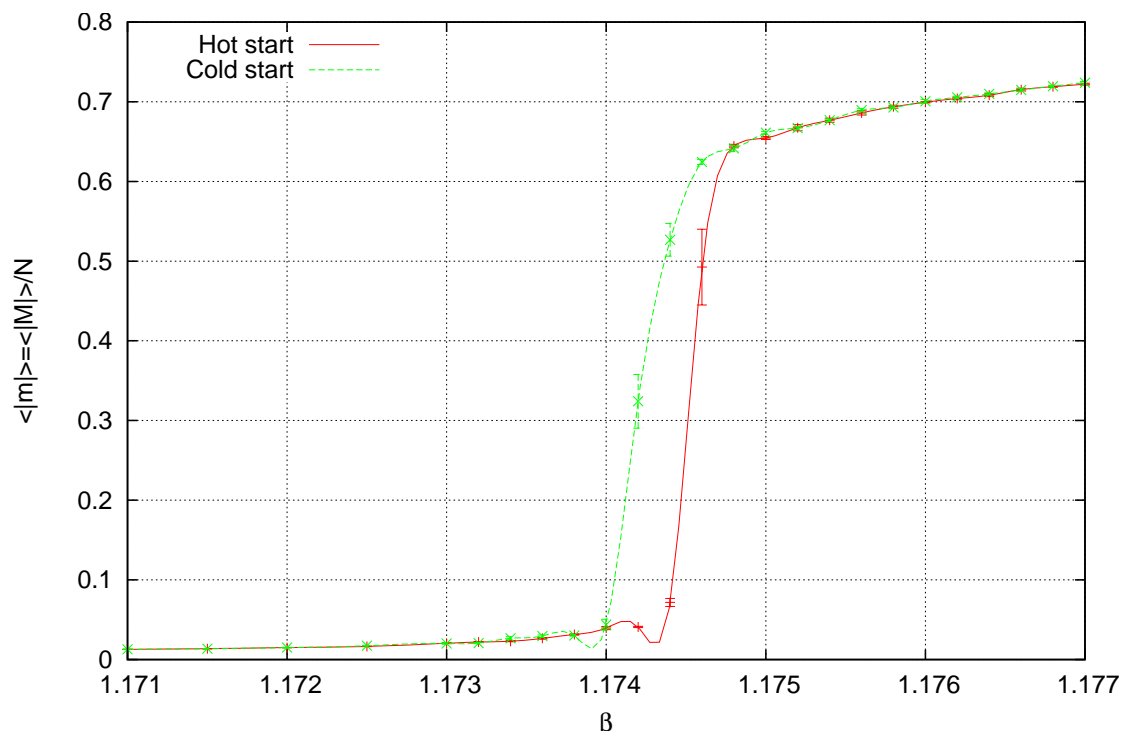
Σχήμα 6.21: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 5$, $L = 768$ με S-W στα 8000 sweeps



Σχήμα 6.22: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 5$, $L = 1024$ με S-W στα 1000 sweeps



Σχήμα 6.23: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 5$, $L = 1024$ με S-W στα 2000 sweeps



Σχήμα 6.24: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 5$, $L = 1024$ με S-W στα 4000 sweeps

Κεφάλαιο 7

Έξι καταστάσεις ($q = 6$)

7.1 Εντοπισμός του κρίσιμου σημείου

Λίγο πριν το τέλος, βρισκόμαστε στις 6 καταστάσεις, όπου η μετάβαση φάσης εμφανίζει πιο καθαρά χαρακτηριστικά πρώτης τάξης στο σημείο

$$\beta_c(6) = \ln(1 + \sqrt{6}) \approx 1.2382 \quad (7.1)$$

Στη σειρά προσομοιώσεων για $q = 6$ χρησιμοποιήθηκαν μικρότερα L μιας και όσο κανείς προχωρά σε μεγαλύτερα q ο χρόνος αυτοσυσχέτισης και ο χρόνος προσομοίωσης αυξάνονται κατακόρυφα. Ο εντοπισμός του κρίσιμου σημείου γίνεται και πάλι σε πρώτη φάση με τον Binder Cumulant (Σχ. 7.2) στο διάστημα

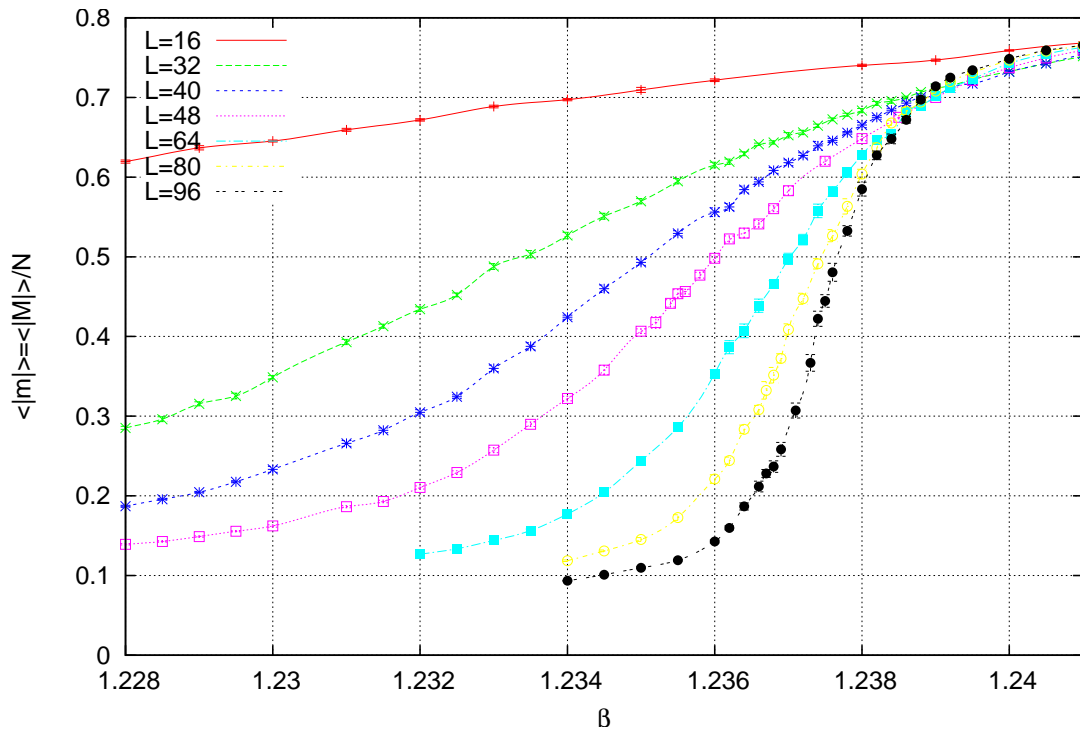
$$\beta_{binder}(6) \in [1.2381, 1.2385] \quad (7.2)$$

που περικλείει το θεωρητικό $\beta_c(6)$. Στον Energy cumulant εμφανίζεται καθαρά λανθάνουσα θερμότητα (Σχ. 7.3), όπως άλλωστε μαρτυρεί και το γράφημα 7.6 της ενέργειας.

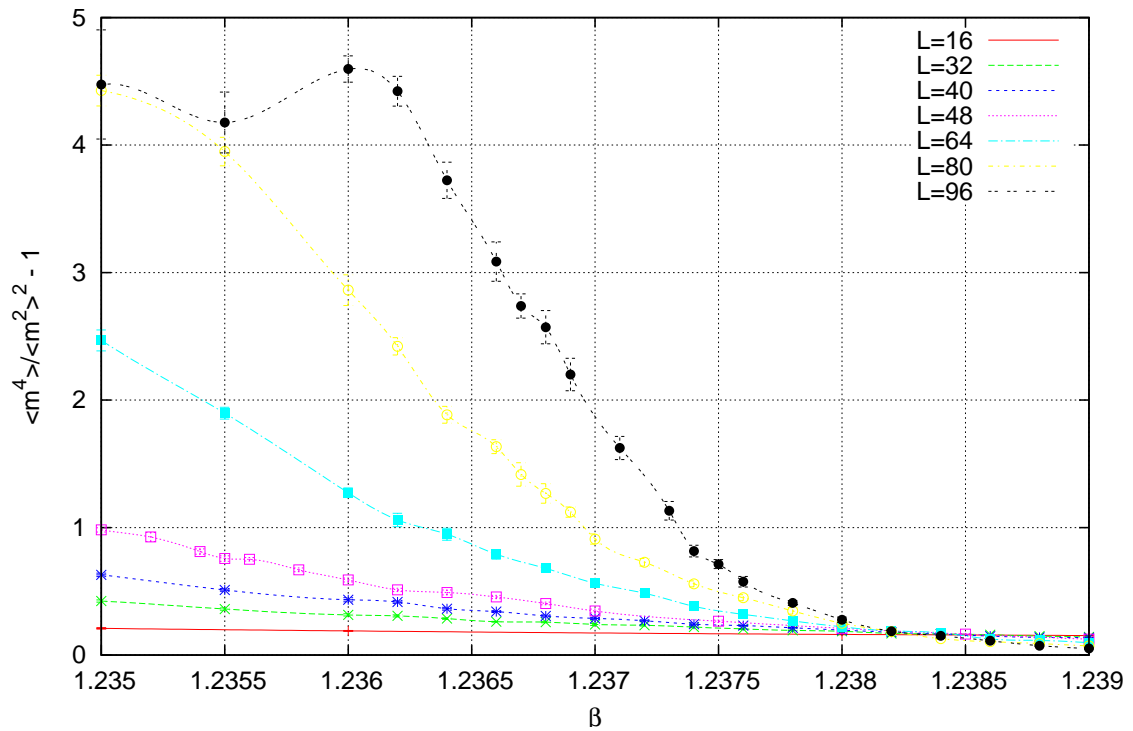
Η σύγκλιση των ψευδοκρίσιμων σημείων είναι ακόμα πιο εμφανής στον πίνακα 7.1 που συντέθηκε από τα μέγιστα των καμπυλών μαγνητικής επιδεκτικότητας (7.4) και ειδικής θερμότητας (7.5), όπως και τα ιστογράμματα μαγνήτισης και ενέργειας.

L	c_{max}	$h(e)$	χ_{max}	$h(m)$
16	1.2240	1.2240	1.2210	1.2200
32	1.2335	1.2335	1.2330	1.2330
40	1.2350	1.2350	1.2345	1.2345
48	1.2358	1.2358	1.2356	1.2356
64	1.2368	1.2368	1.2366	1.2366
80	1.2372	1.2372	1.2370	1.2370
96	1.2375	1.2375	1.2374	1.2374

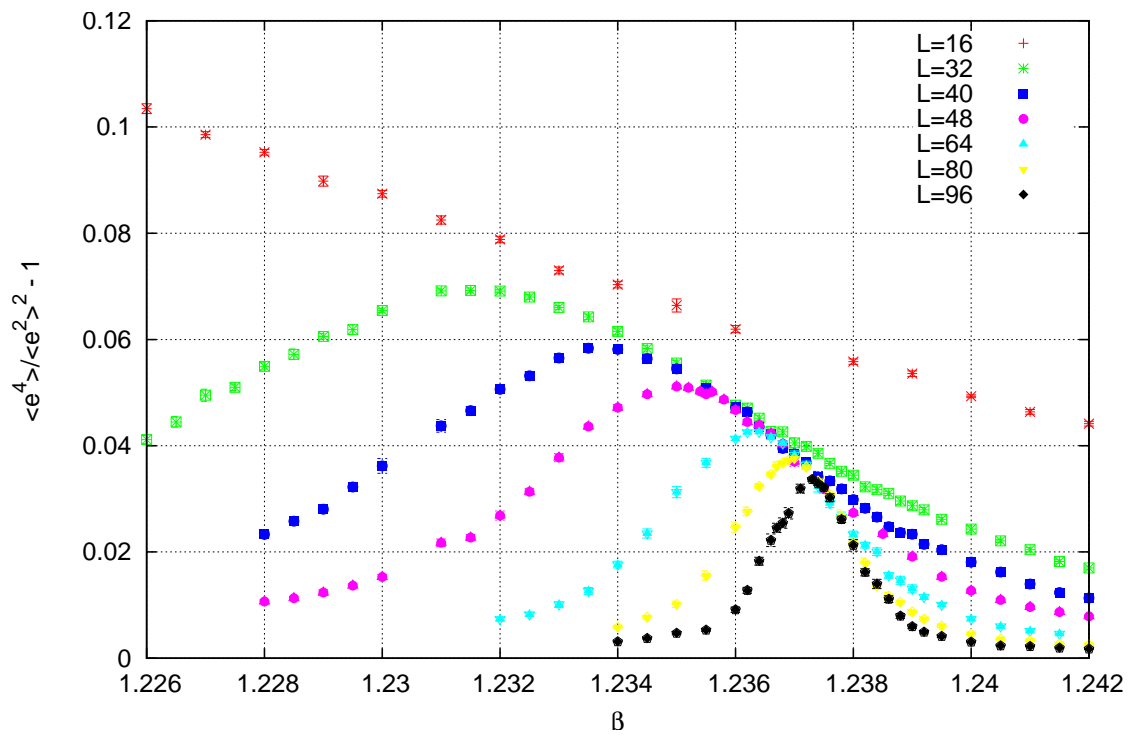
Πίνακας 7.1: Ψευδοκρίσιμα σημεία για $q = 6$



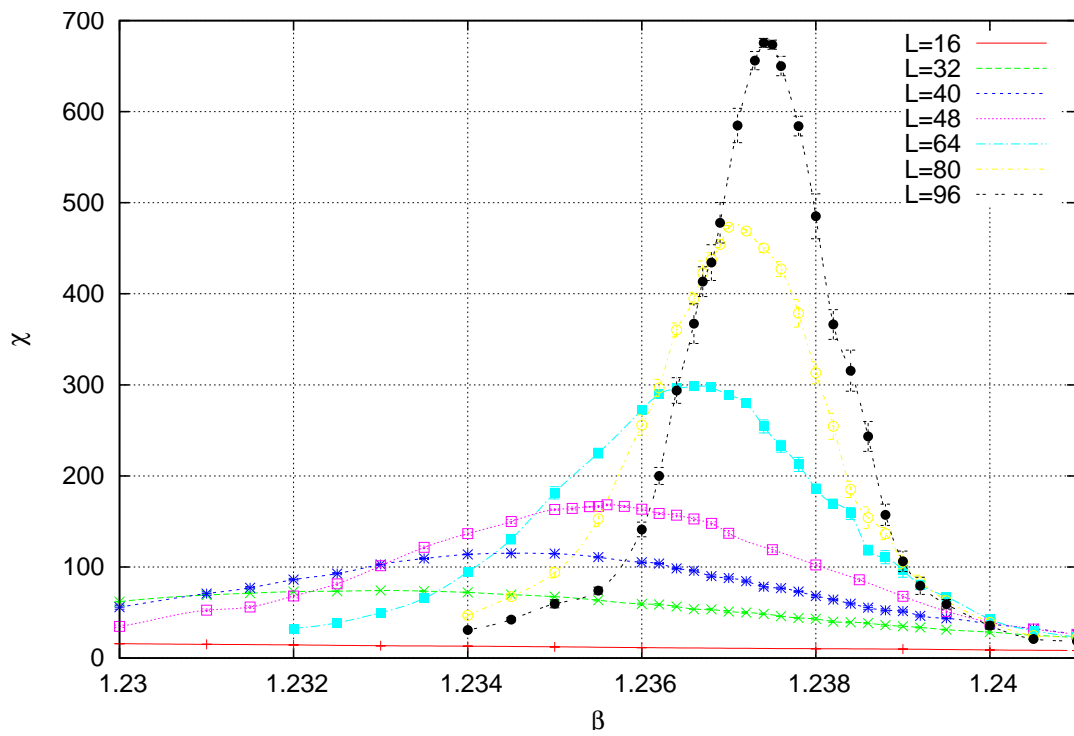
Σχήμα 7.1: Μαγνήτιση για $q = 6$ με S-W, 300×10^4 sweeps



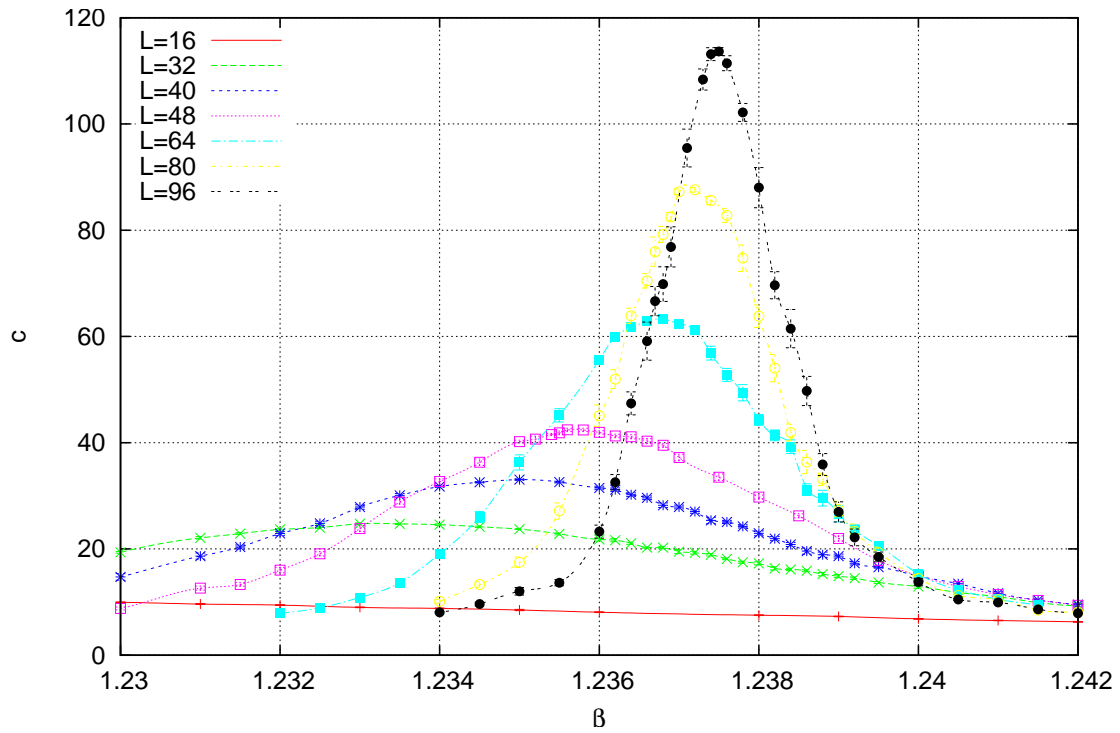
Σχήμα 7.2: Binder Cumulant για $q = 6$ με S-W, 300×10^4 sweeps



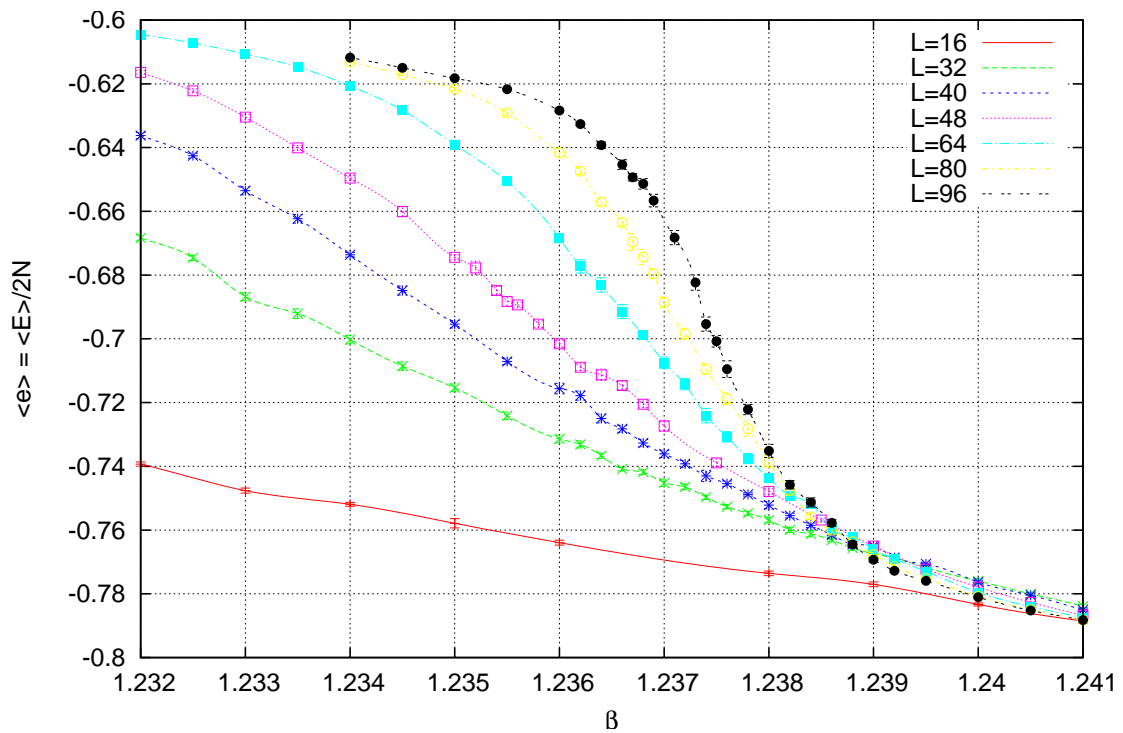
Σχήμα 7.3: Energy Cumulant για $q = 6$ με S-W, 300×10^4 sweeps



Σχήμα 7.4: Μαγνητική επιδεκτικότητα για $q = 6$ με S-W, 300×10^4 sweeps



Σχήμα 7.5: Ειδική θερμότητα για $q = 6$ με S-W, 300×10^4 sweeps



Σχήμα 7.6: Ενέργεια ανά δεσμό για $q = 6$ με S-W, 300×10^4 sweeps

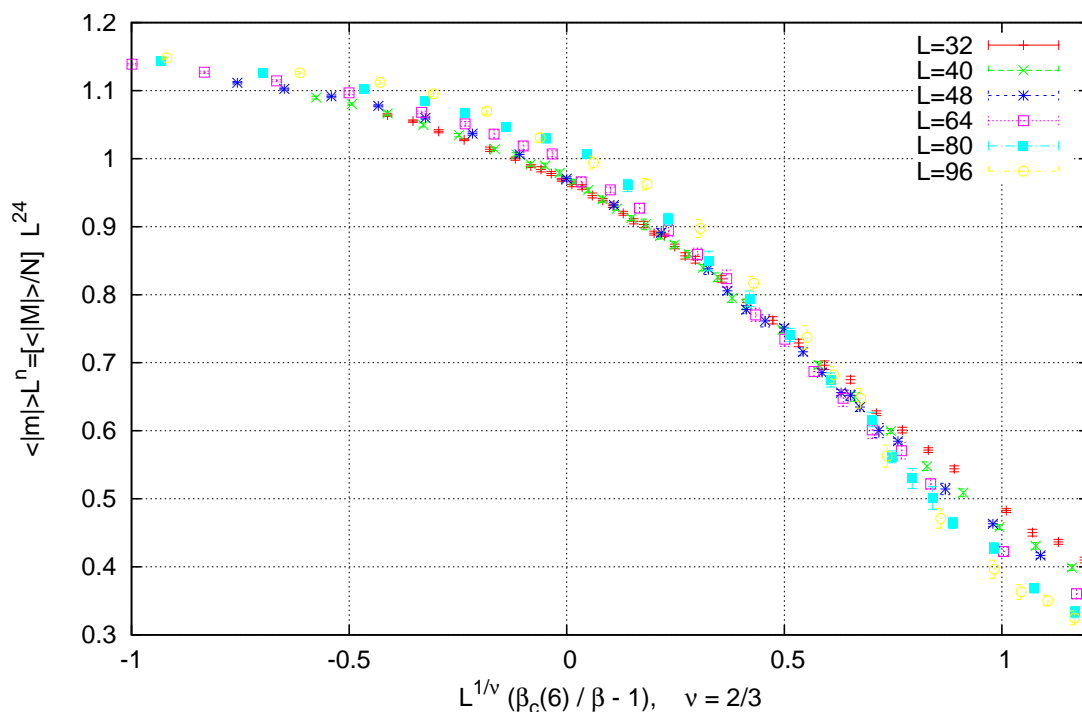
7.2 Γραφήματα βάθμωσης & κρίσιμοι εκθέτες

Οι πειραματικοί κρίσιμοι εκθέτες, σε αντίθεση με την περίπτωση του $q = 5$, δεν φαίνεται να οδηγούν σε εξίσου ενδιαφέροντα συμπεράσματα. Η καλύτερη επιλογή εκθετών δίνει αρκετές αποκλίσεις, ενώ στην σειρά γραφημάτων που ακολουθεί έχουν αφαιρεθεί οι καμπύλες $L = 16$. Στα παρακάτω χρησιμοποιήθηκε η τιμή $\nu = 2/3$ και η πειραματική τιμή

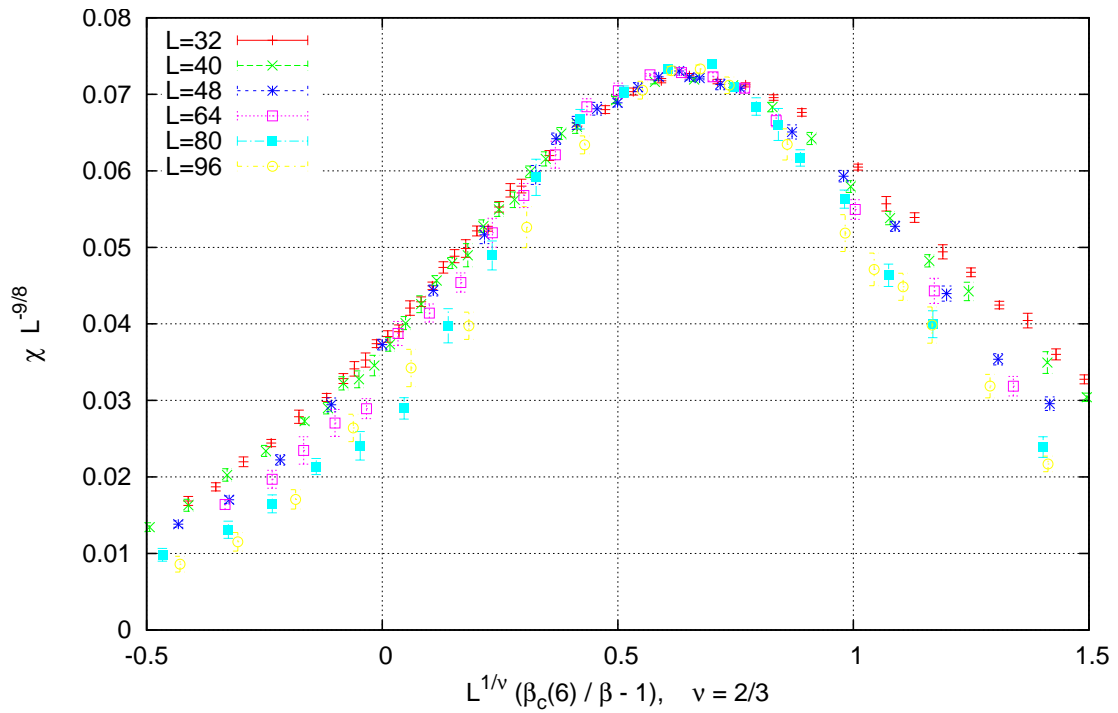
$$\beta_{fss}(6) \approx 1.2385 \quad (7.3)$$

Μέγεθος	Εκθέτης L
Μαγνήτιση	24
Μαγνητική επιδεικτικότητα	-9/8
Ειδική θερμότητα	-45/26
Binder Cumulant	-21/2

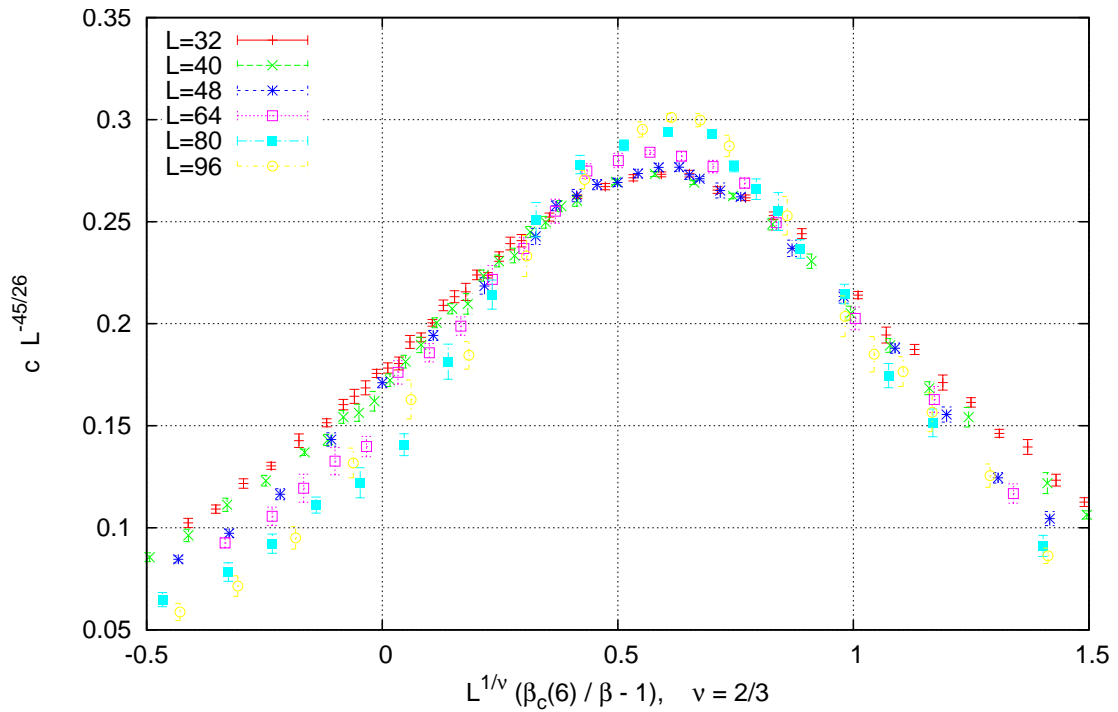
Πίνακας 7.2: Κρίσιμοι εκθέτες για $q = 6$



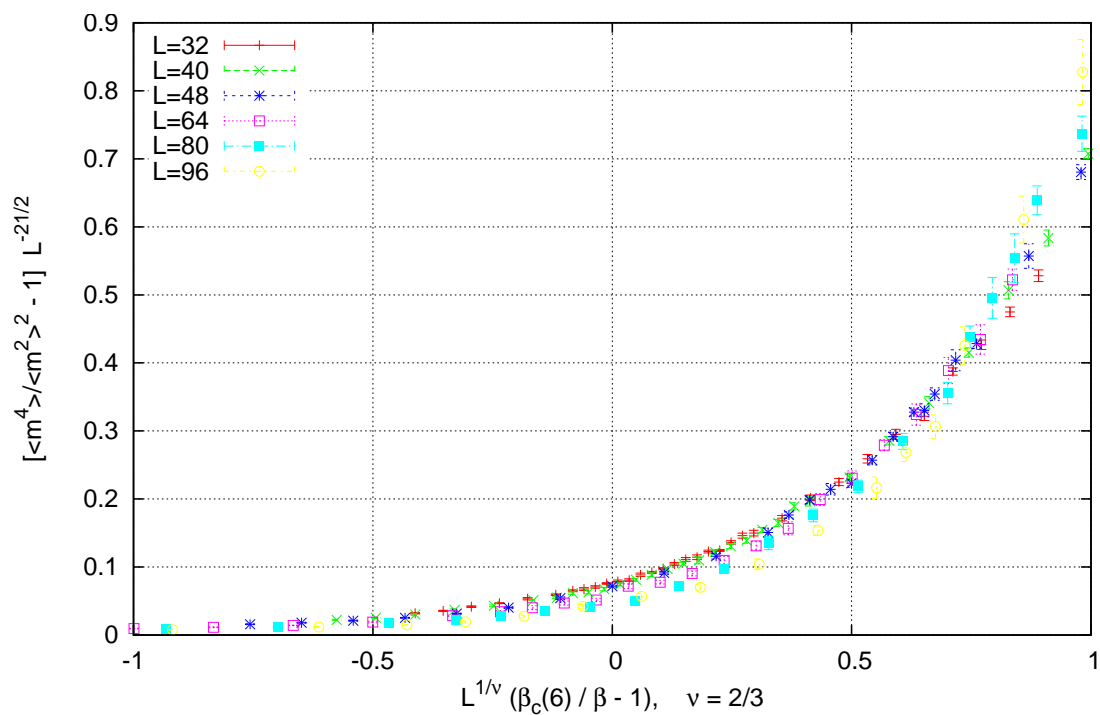
Σχήμα 7.7: Βάθμωση μαγνήτισης για $q = 6$ με S-W, 300×10^4 sweeps



Σχήμα 7.8: Βάθμωση μαγνητικής επιδεικτικότητας για $q = 6$ με S-W, 300×10^4 sweeps



Σχήμα 7.9: Βάθμωση ειδικής θερμότητας για $q = 6$ με S-W, 300×10^4 sweeps



Σχήμα 7.10: Βάθμωση Binder Cumulant για $q = 6$ με S-W, 300×10^4 sweeps

7.3 Επί του κρίσιμου σημείου

Με την ίδια επιφύλαξη που διατυπώθηκε για το $q = 6$ στην προηγούμενη παράγραφο, πειραματιζόμαστε με την προσαρμογή των ψευδοκρίσιμων σημείων του πίνακα 7.3 στην Εξ. (2.15) για $\nu = 2/3$, με τα αποτελέσματα να αποτυπώνονται στο Σχ. 7.13

L	β_{pc}	τ_{int} (sweeps)	sweeps	Ανεξάρτητες μετρήσεις
16	1.2210	77	300×10^4	19.5×10^3
32	1.2330	230	300×10^4	6.5×10^3
40	1.2345	360	300×10^4	4.2×10^3
48	1.2356	508	300×10^4	3.0×10^3
64	1.2366	833	300×10^4	1.8×10^3
80	1.2370	1200	300×10^4	1.3×10^3
96	1.2374	1600	300×10^4	0.9×10^3

Πίνακας 7.3: Ανεξάρτητες μετρήσεις στο κρίσιμο σημείο για $q = 6$

Η εκτίμηση του $\beta_{num}(6)$ γίνεται με προσαρμογή των ψευδοκρίσιμων σημείων στην Εξ. (2.15) με $\nu = 2/3$, όπως φαίνεται και στο Σχ. 7.13:

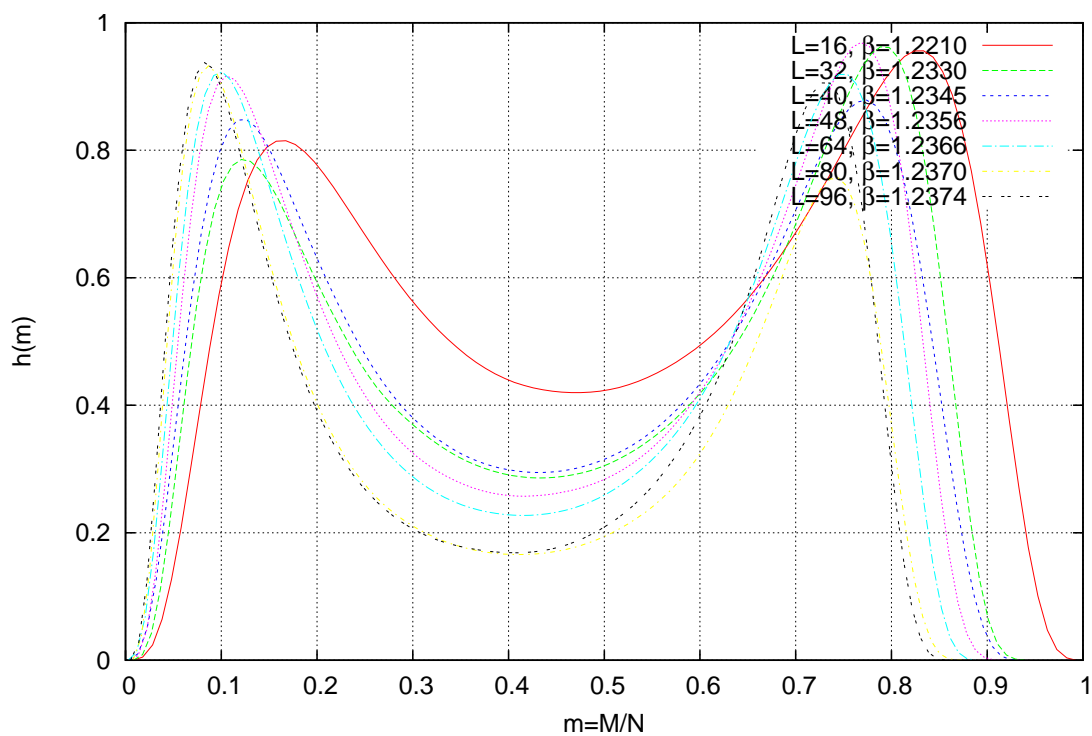
$$\beta_{num}(6) = 1.2388 \pm 0.0001, \quad (0.01\%) \quad (7.4)$$

$$c(6) = -1.13 \pm 0.02, \quad (1.9\%)$$

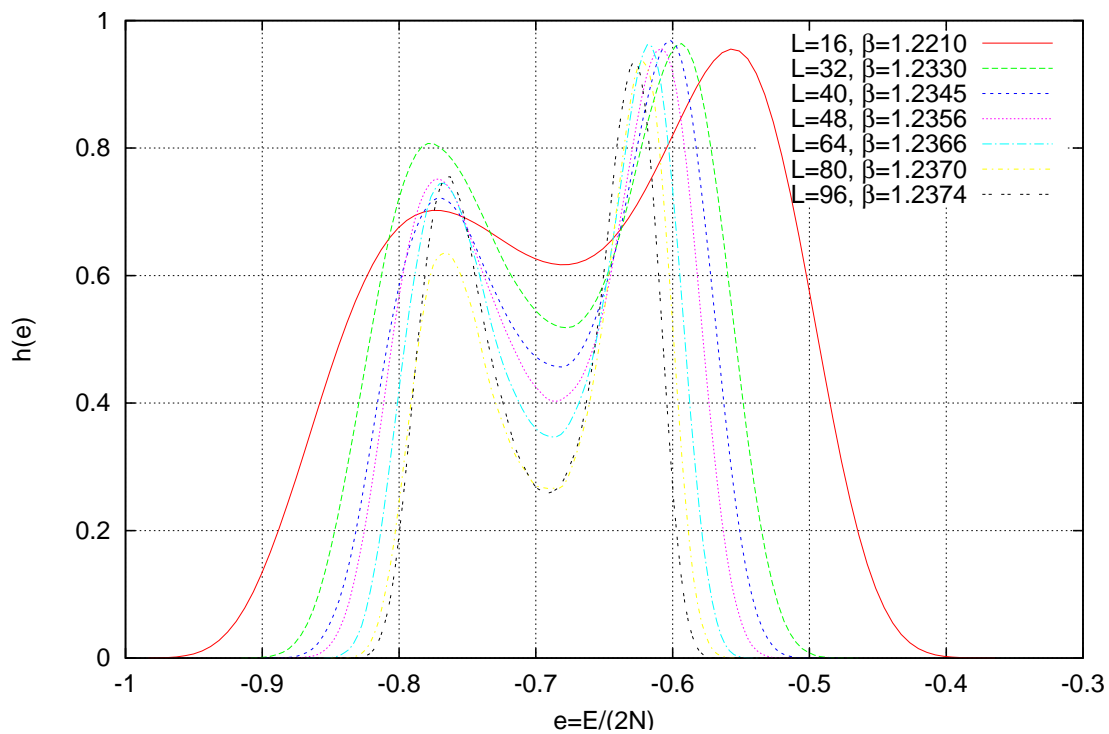
Στα ιστογράμματα της μαγνήτισης και της ενέργειας είναι και πάλι αδύνατη η εξαγωγή ποσοτικών συμπερασμάτων. Αυτό που έχει ενδιαφέρον υπό το πρίσμα της ποιοτικής ανάλυσης είναι η διεύρυνση της απόστασης των δυο κορυφών που αντιστοιχούν στις συνυπάρχουσες φάσης, αναδεικνύοντας την πρώτης τάξης μετάβαση φάσης.

L	M_1	M_2	m
16	0.99	0.85	0.41
32	0.98	0.80	0.28
40	0.95	0.93	0.29
48	0.99	0.94	0.25
64	0.98	0.98	0.24
80	0.98	0.80	0.16
96	0.99	0.95	0.17

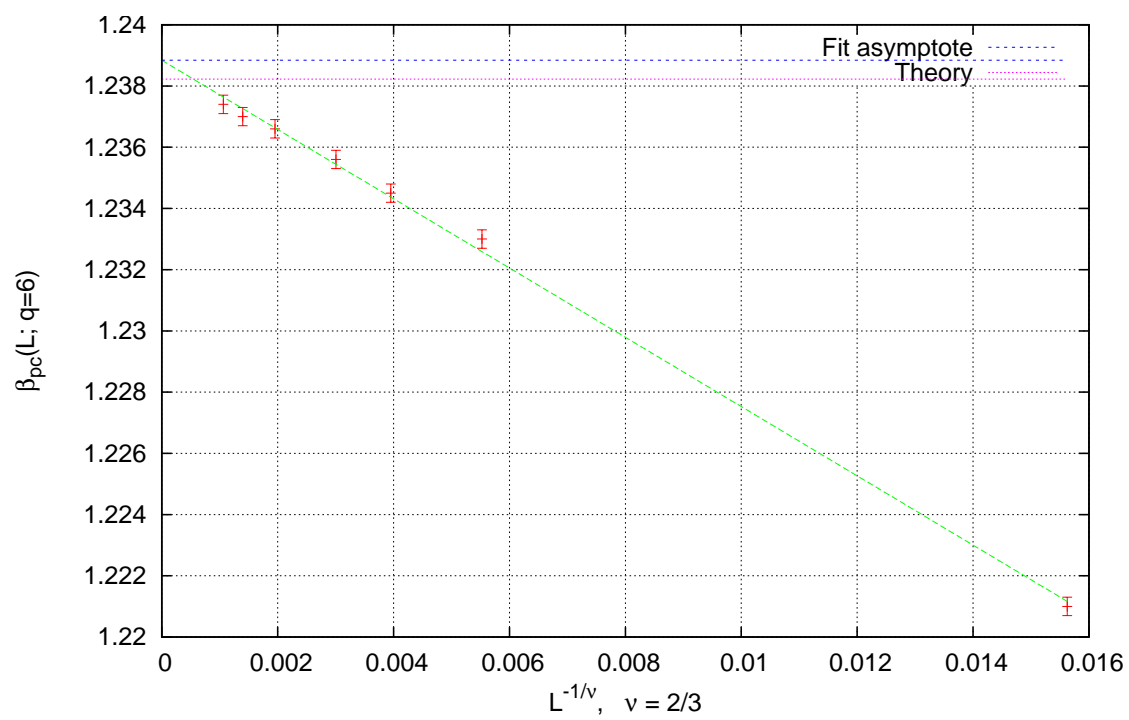
Πίνακας 7.4: Αχρότατα ιστογραμμάτων για $q = 6$



Σχήμα 7.11: Ιστόγραμμα μαγνήτισης για $q = 6$ με S-W στο κρίσιμο σημείο sweeps



Σχήμα 7.12: Ιστόγραμμα ενέργειας για $q = 6$ με S-W στο κρίσιμο σημείο sweeps



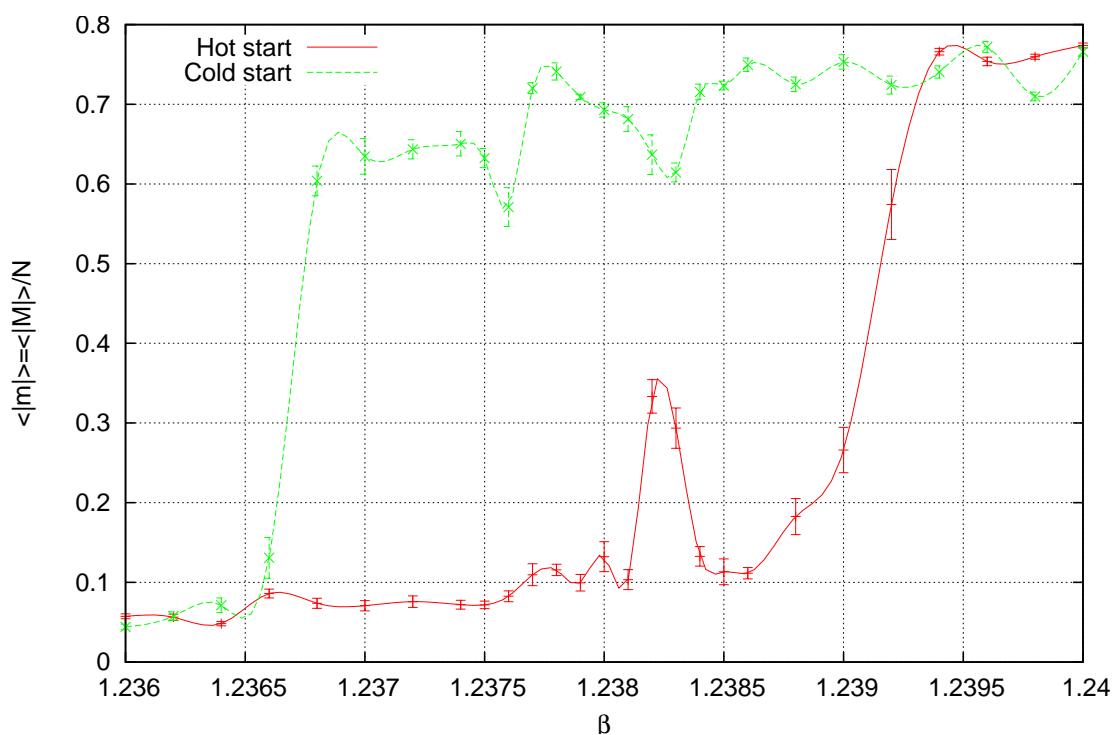
Σχήμα 7.13: FSS $L^{-3/2}$ για $q = 6$ με S-W στο κρίσιμο σημείο

7.4 Καμπύλες υστέρησης

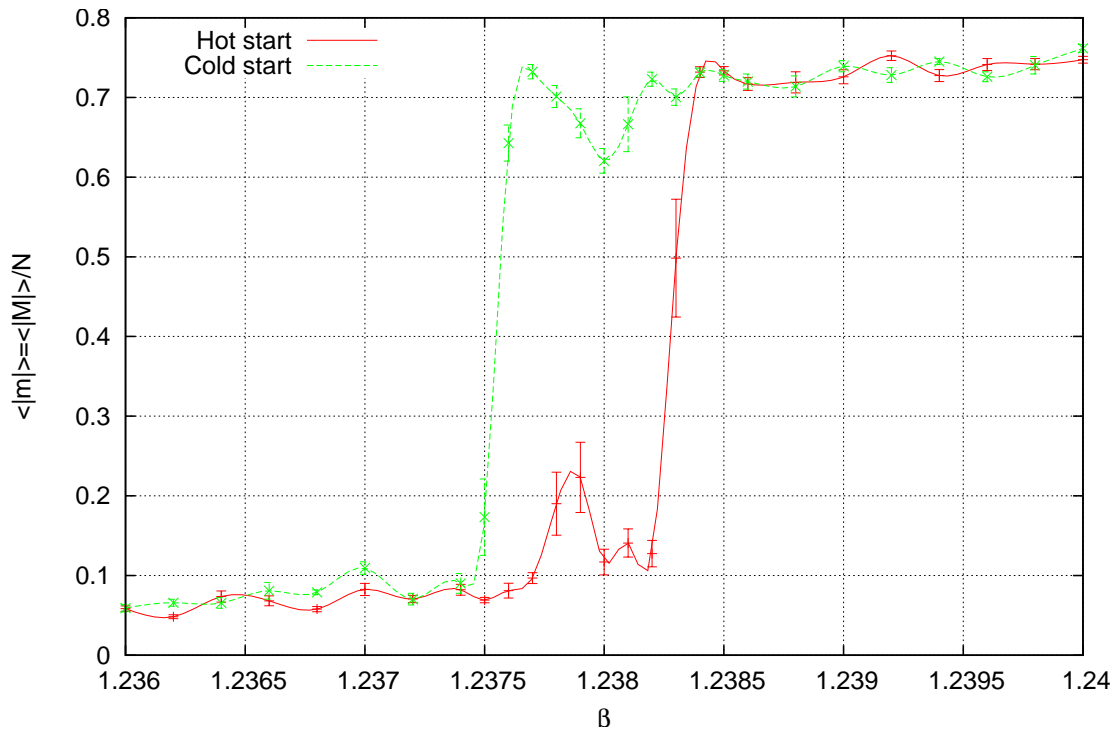
Μιας και το $q = 6$ παρουσιάζει έντονη μετάβαση πρώτης τάξης αξίζει να εξετάσουμε το φαινόμενο της μαγνητικής υστέρησης για τα δεδομένα των γραφημάτων που ακολουθούν και συνοφίζονται στον πίνακα 7.5.

L	sweeps	β_1	β_2	$\Delta\beta$
192	1000	1.2366	1.2390	0.0034
192	2000	1.2375	1.2382	0.0007
192	4000	1.2372	1.2381	0.0009
256	1000	1.2374	1.2377	0.0003
256	2000	1.2370	1.2381	0.0011
256	4000	1.2379	1.2391	0.0012
256	8000	1.2373	1.2381	0.0008
512	1000	1.2372	1.2392	0.0020
512	2000	1.2377	1.2388	0.0011
512	4000	1.2379	1.2389	0.0010
512	8000	1.2380	1.2383	0.0003

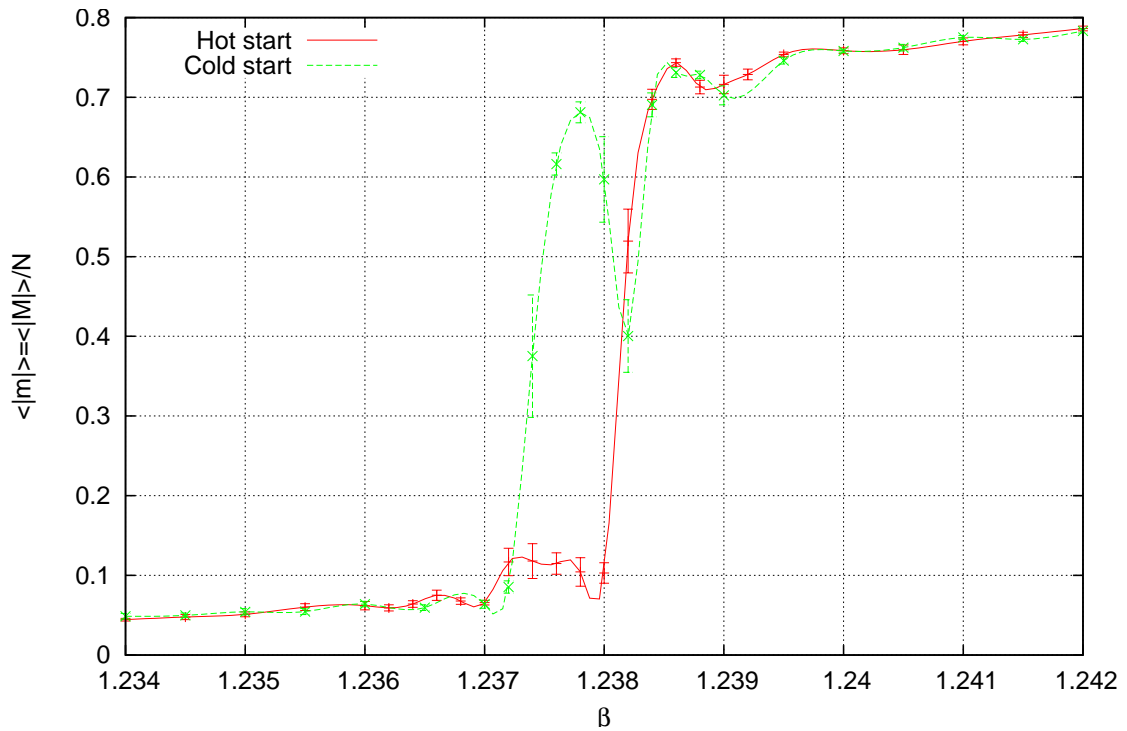
Πίνακας 7.5: Υστέρηση για $q = 6$



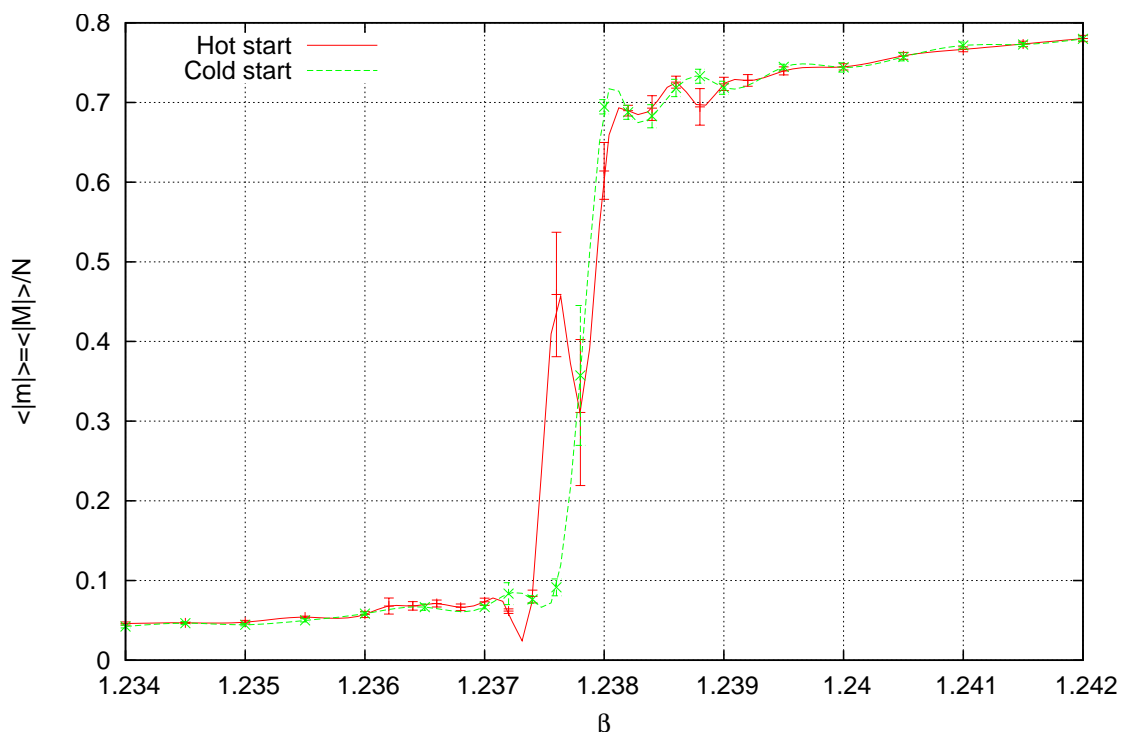
Σχήμα 7.14: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 6$, $L = 192$ με S-W στα 1000 sweeps



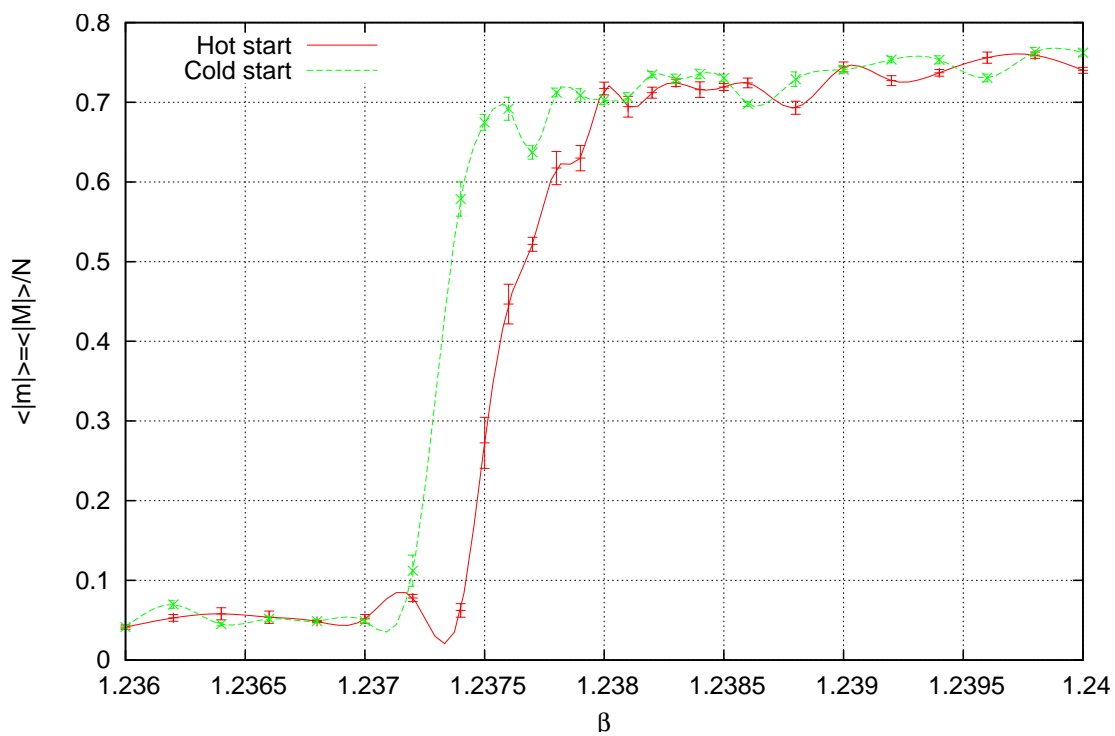
Σχήμα 7.15: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 6$, $L = 192$ με S-W στα 2000 sweeps



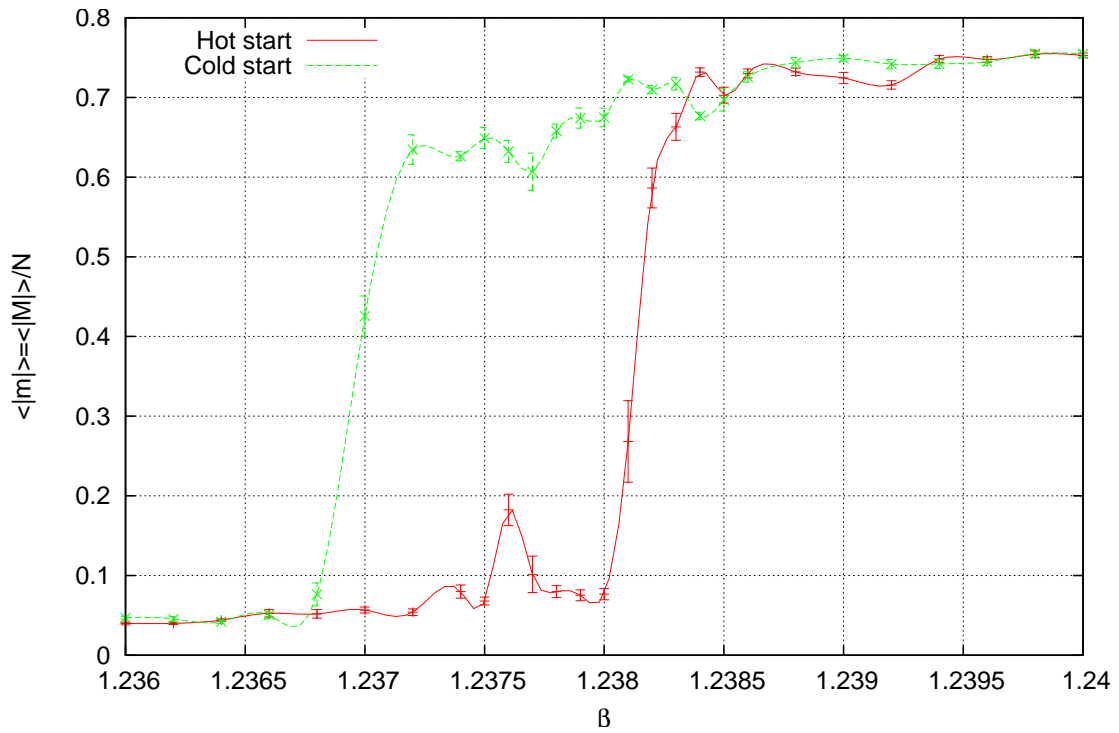
Σχήμα 7.16: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 6$, $L = 192$ με S-W στα 4000 sweeps



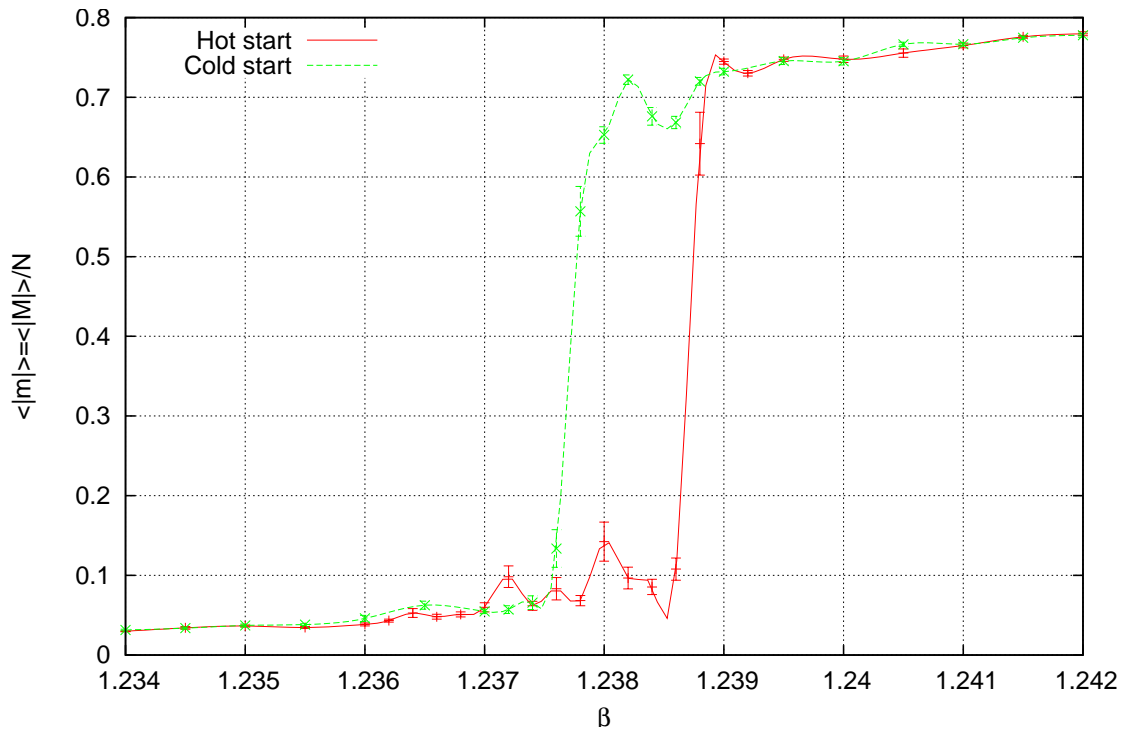
Σχήμα 7.17: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 6$, $L = 192$ με S-W στα 8000 sweeps



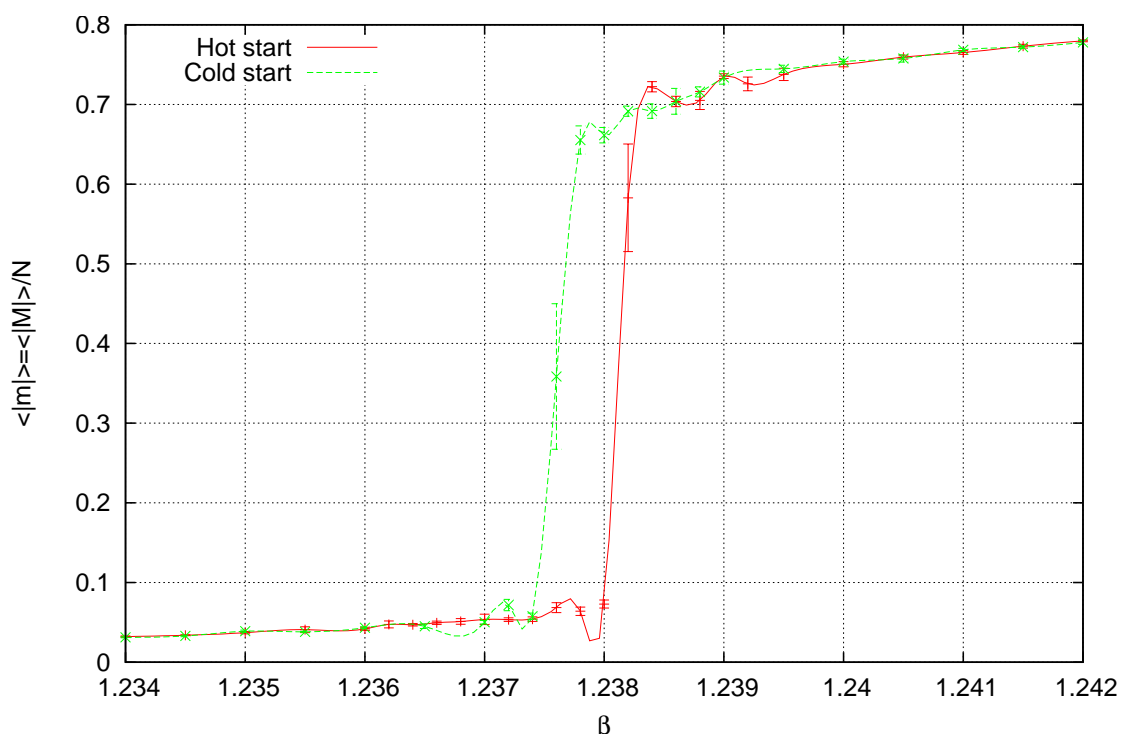
Σχήμα 7.18: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 6$, $L = 256$ με S-W στα 1000 sweeps



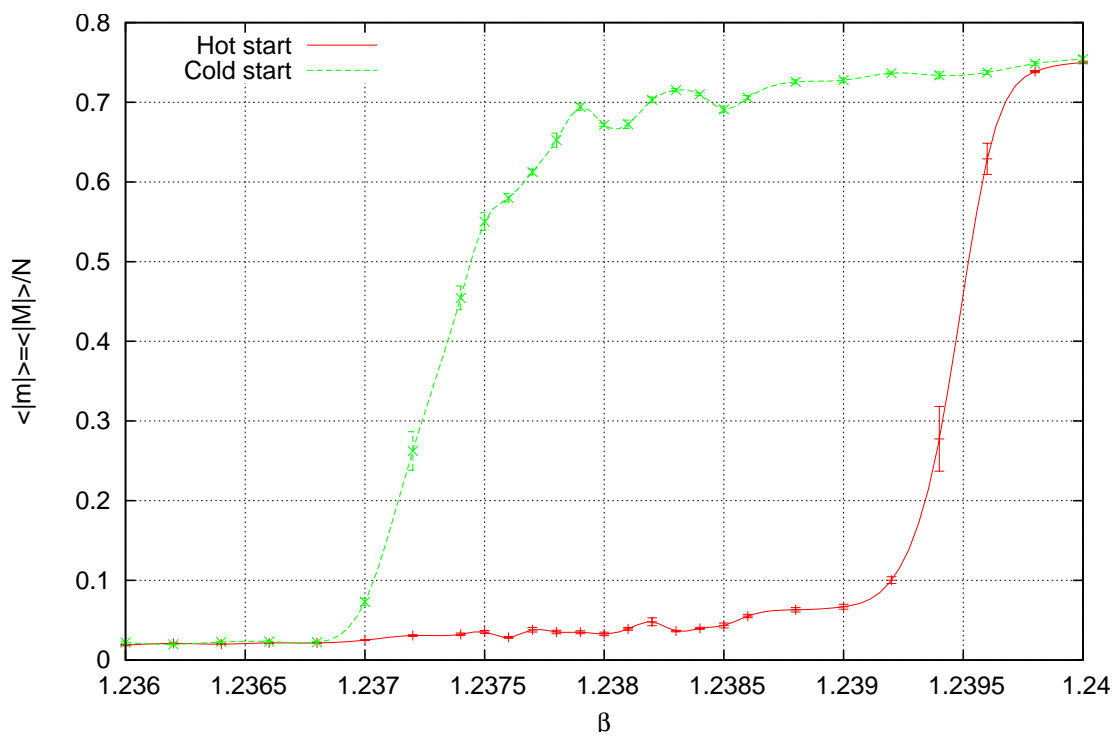
Σχήμα 7.19: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 6$, $L = 256$ με S-W στα 2000 sweeps



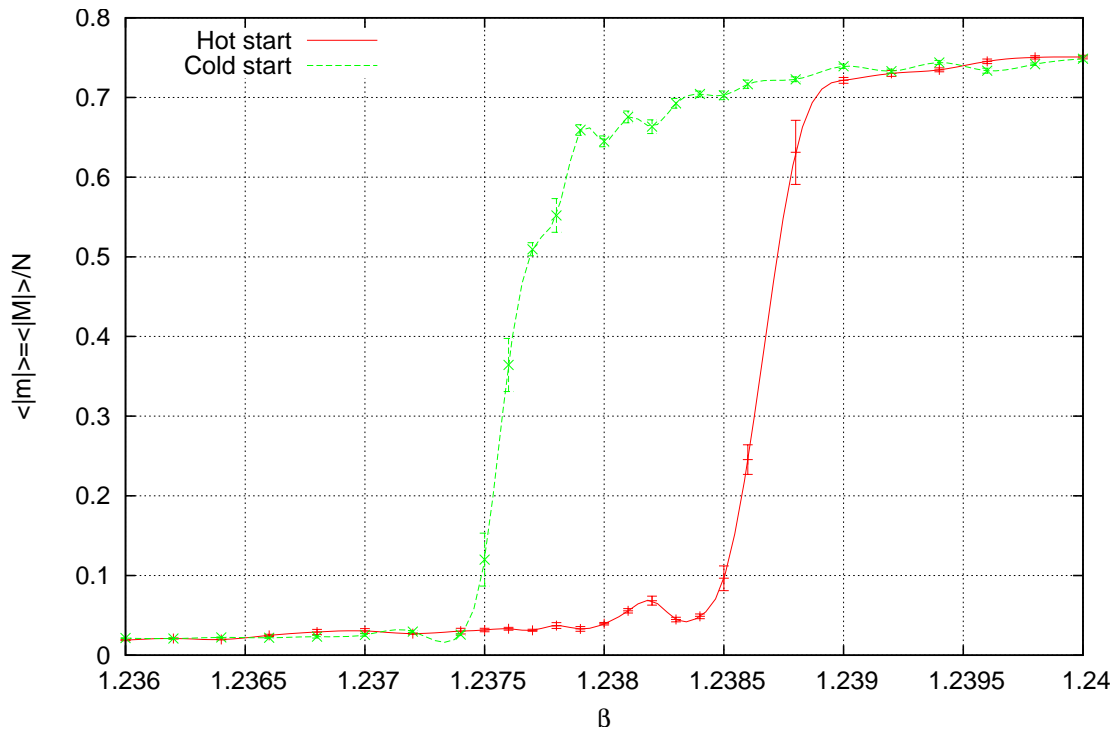
Σχήμα 7.20: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 6$, $L = 256$ με S-W στα 4000 sweeps



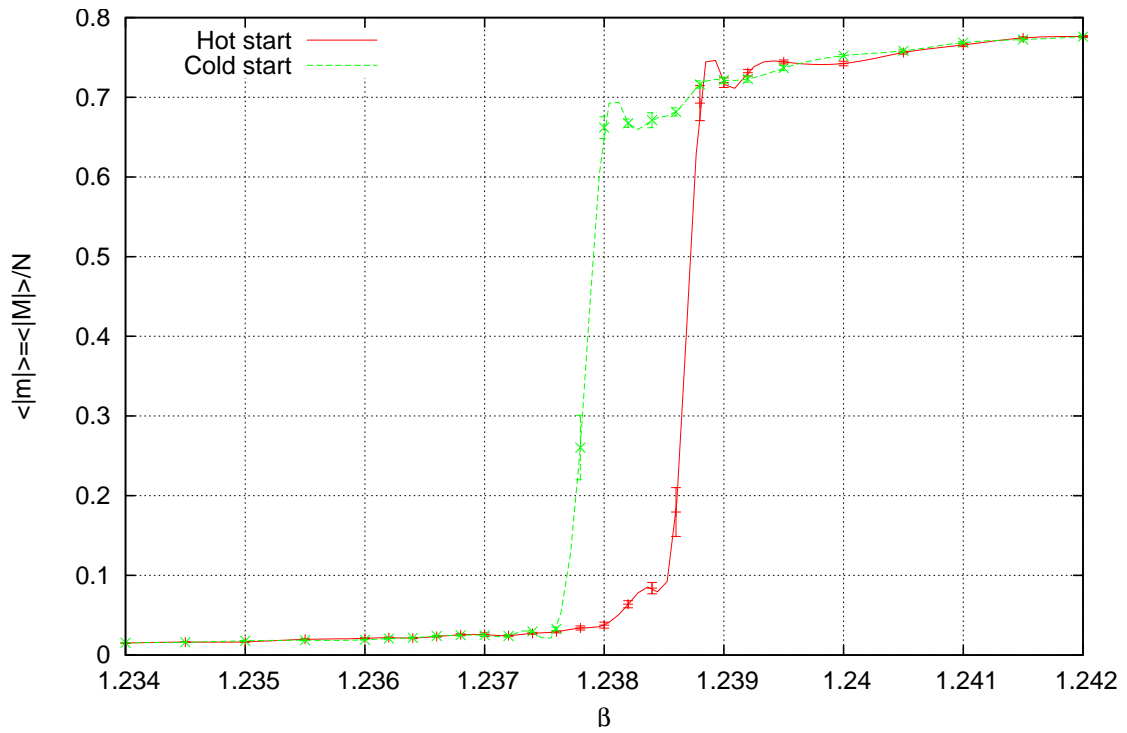
Σχήμα 7.21: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 6$, $L = 256$ με S-W στα 8000 sweeps



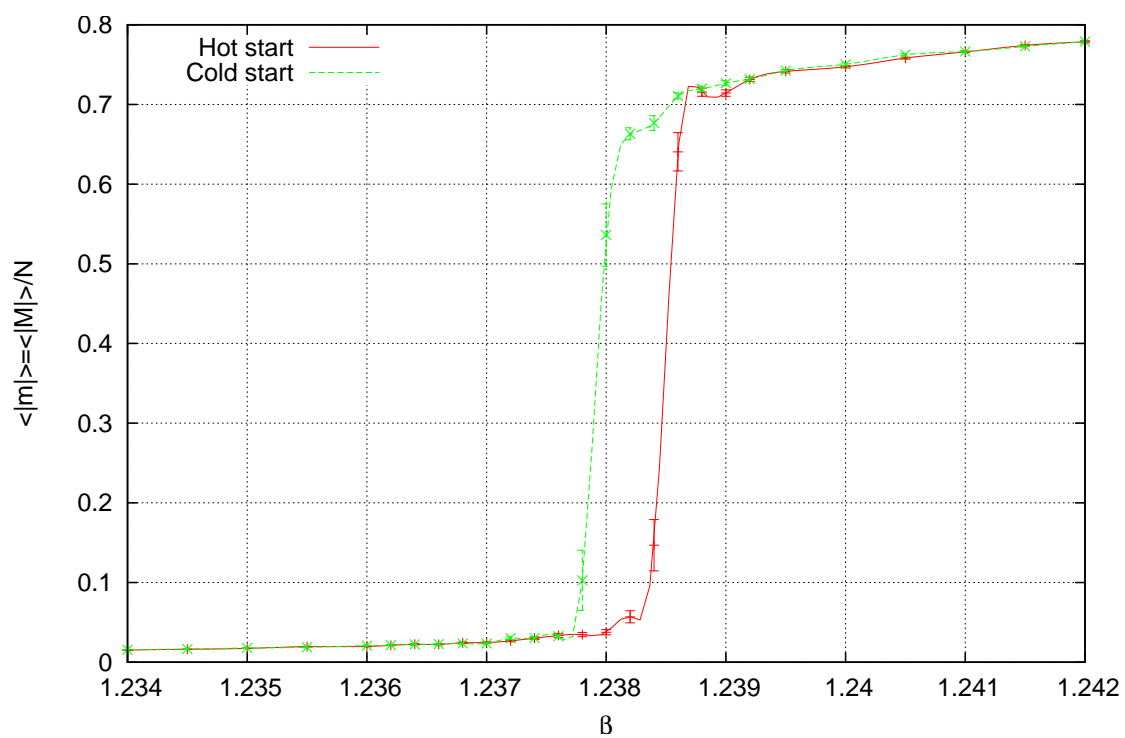
Σχήμα 7.22: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 6$, $L = 512$ με S-W στα 1000 sweeps



Σχήμα 7.23: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 6$, $L = 512$ με S-W στα 2000 sweeps



Σχήμα 7.24: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 6$, $L = 512$ με S-W στα 4000 sweeps



Σχήμα 7.25: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 6$, $L = 512$ με S-W στα 8000 sweeps

Κεφάλαιο 8

Δέκα καταστάσεις ($q = 10$)

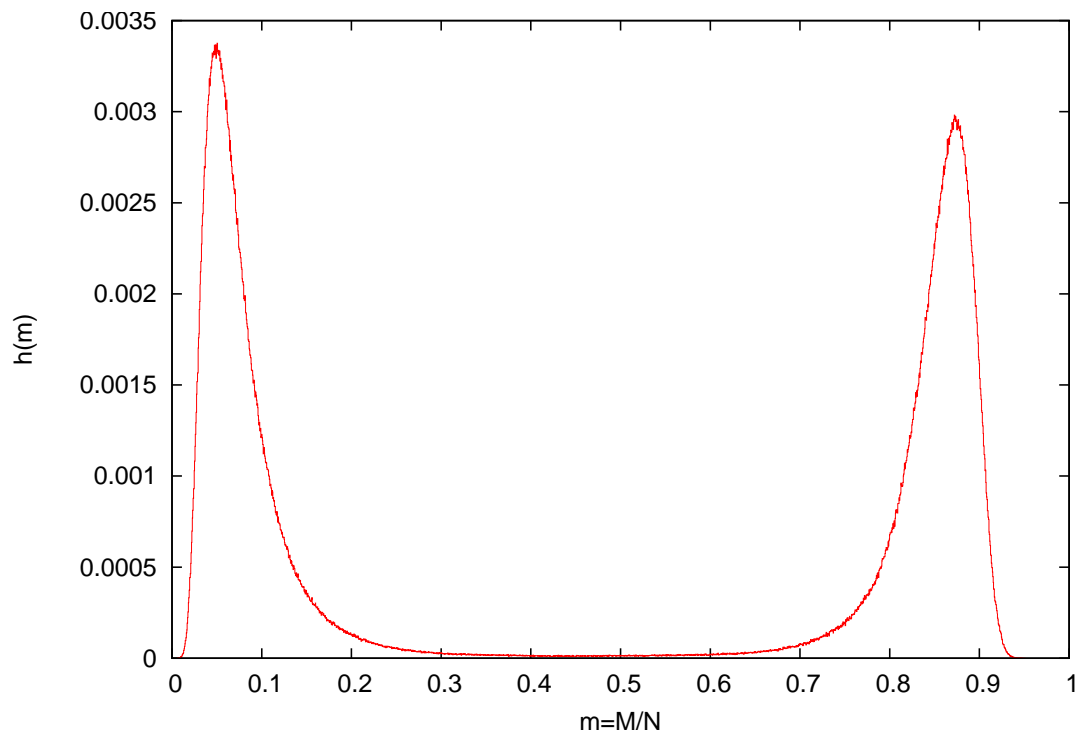
8.1 Ιστόγραμμα μαγνήτισης

Η περίπτωση $q = 10$ έχει μετάβαση φάσης ισχυρά πρώτης τάξης. Μιας και οι απαιτούμενοι χρόνοι προσομοίωσης για ποιοτικές μετρήσεις είναι απαγορευτικοί θα αρκεστούμε στα ιστογράμματα μαγνήτισης και τις καμπύλες μαγνητικής υστέρησης που αναδεικνύουν εντονότερα από όλα τα χαρακτηριστικά q βασικά στοιχεία πρώτης τάξης.

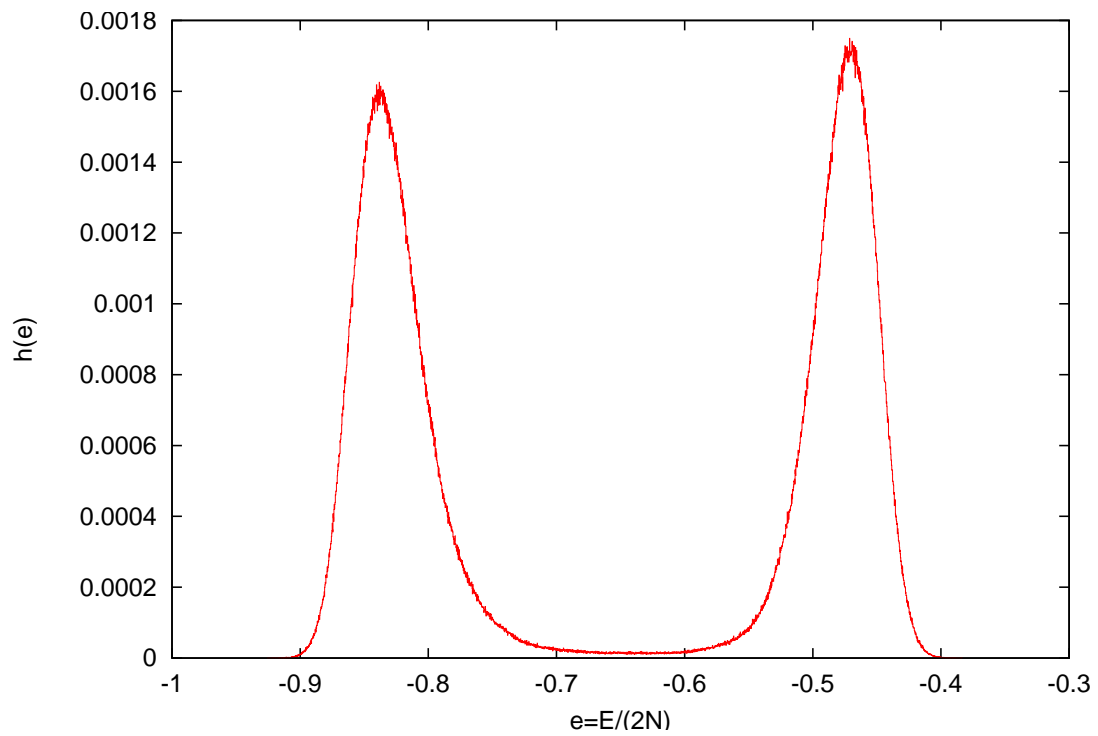
Σύμφωνα με τον γενικό τύπο το αναλυτικά αναμενόμενο κρίσιμο σημείο είναι

$$\beta_c(10) = \ln(1 + \sqrt{10}) \approx 1.4261 \quad (8.1)$$

Προσομοιώνοντας για ένα συγκριτικά μικρό πλέγμα ($L = 48$) με 15×10^6 sweeps, βρήκαμε έντονο διαχωρισμό συνυπαρχουσών φάσεων που φαίνεται στα ακόλουθα ιστογράμματα μαγνήτισης και ενέργειας.



Σχήμα 8.1: Ιστόγραμμα μαγνήτισης, $q = 10$ με S-W, $\beta = 1.4246$, $L = 64$, 15×10^6 sweeps



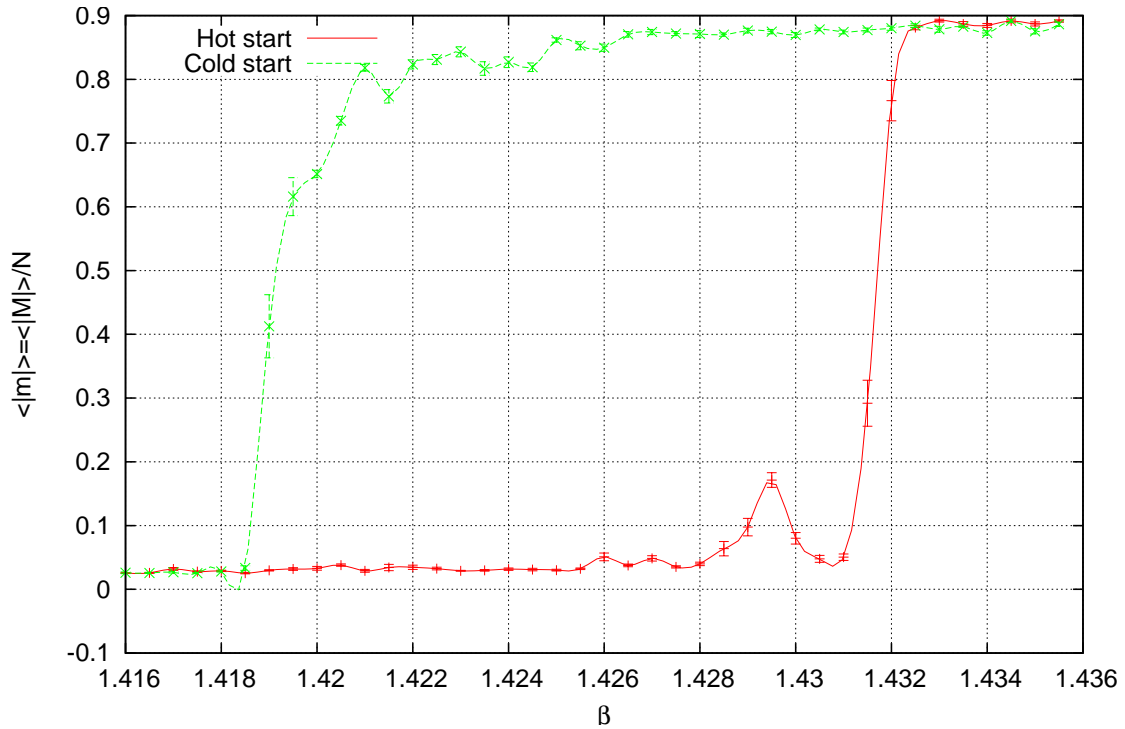
Σχήμα 8.2: Ιστόγραμμα ενέργειας, $q = 10$ με S-W, $\beta = 1.4246$, $L = 64$, 15×10^6 sweeps

8.2 Καμπύλες υστέρησης

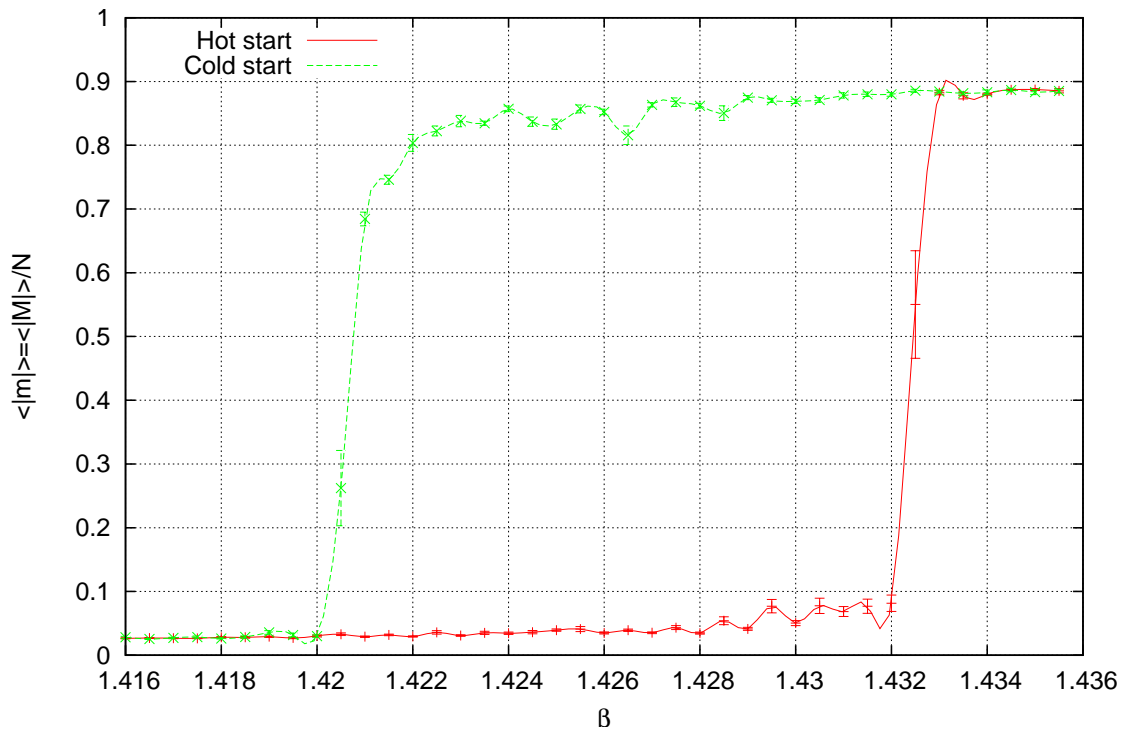
Το φαινόμενο της υστέρησης μαγνήτισης για το $q = 10$ είναι πιο έντονο από τις προηγούμενες περιπτώσεις ενώ είναι εμφανές ήδη από όλο και μικρότερα L . Στον πίνακα που ακολουθούμε παρατηρείται φθίνουσα εξάρτηση του πλάτους της υστέρησης καθώς αυξάνεται το μέγεθος του πλέγματος L .

L	sweeps	β_1	β_2	$\Delta\beta$
96	1000	1.4190	1.4310	0.0120
96	2000	1.4200	1.4310	0.0110
96	4000	1.4210	1.4275	0.0065
96	8000	1.4210	1.4275	0.0065
128	1000	1.4200	1.4300	0.0100
128	2000	1.4220	1.4305	0.0085
128	4000	1.4205	1.4290	0.0085
128	8000	1.4220	1.4295	0.0075
512	1000	1.4200	1.4315	0.0115
512	2000	1.4205	1.4300	0.0095
512	4000	1.4220	1.4305	0.0085

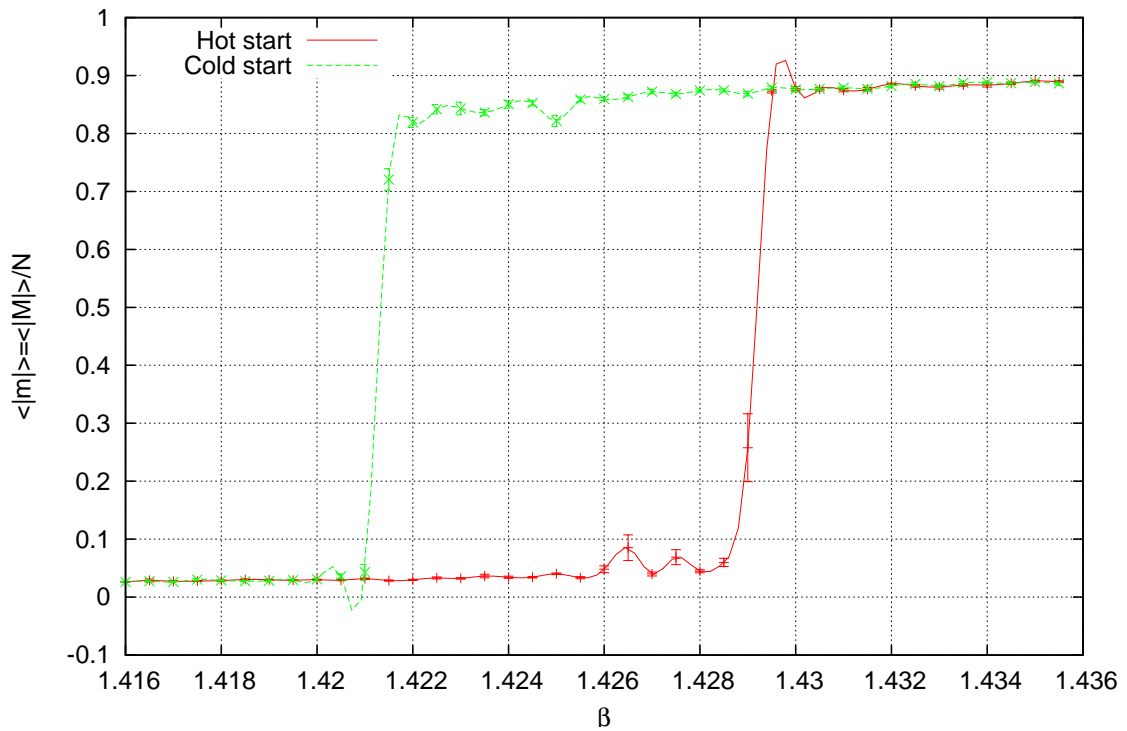
Πίνακας 8.1: Υστέρηση για $q = 10$



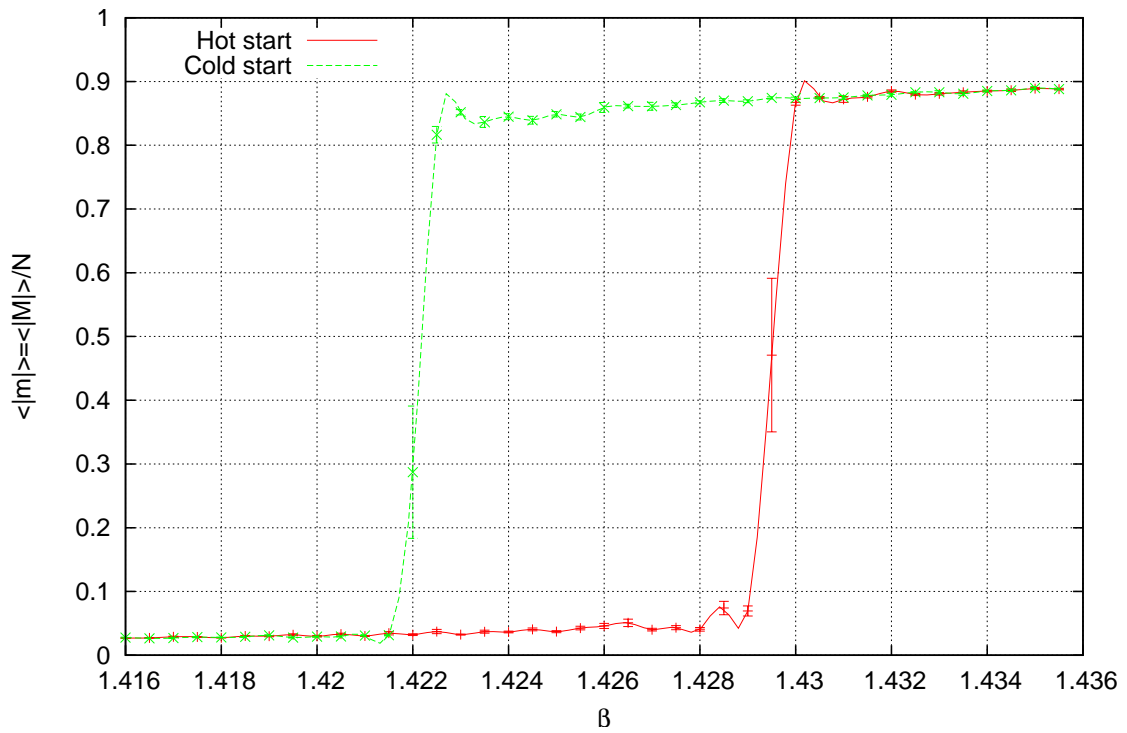
Σχήμα 8.3: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 10$, $L = 96$ με S-W στα 1000 sweeps



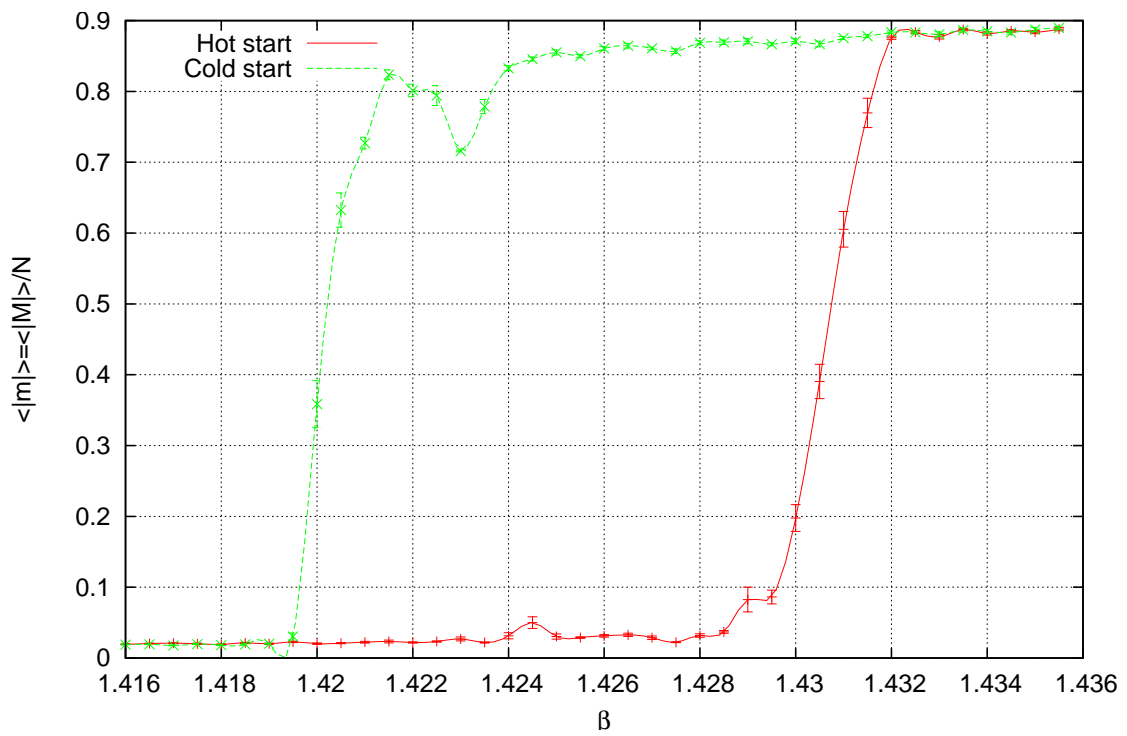
Σχήμα 8.4: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 10$, $L = 96$ με S-W στα 2000 sweeps



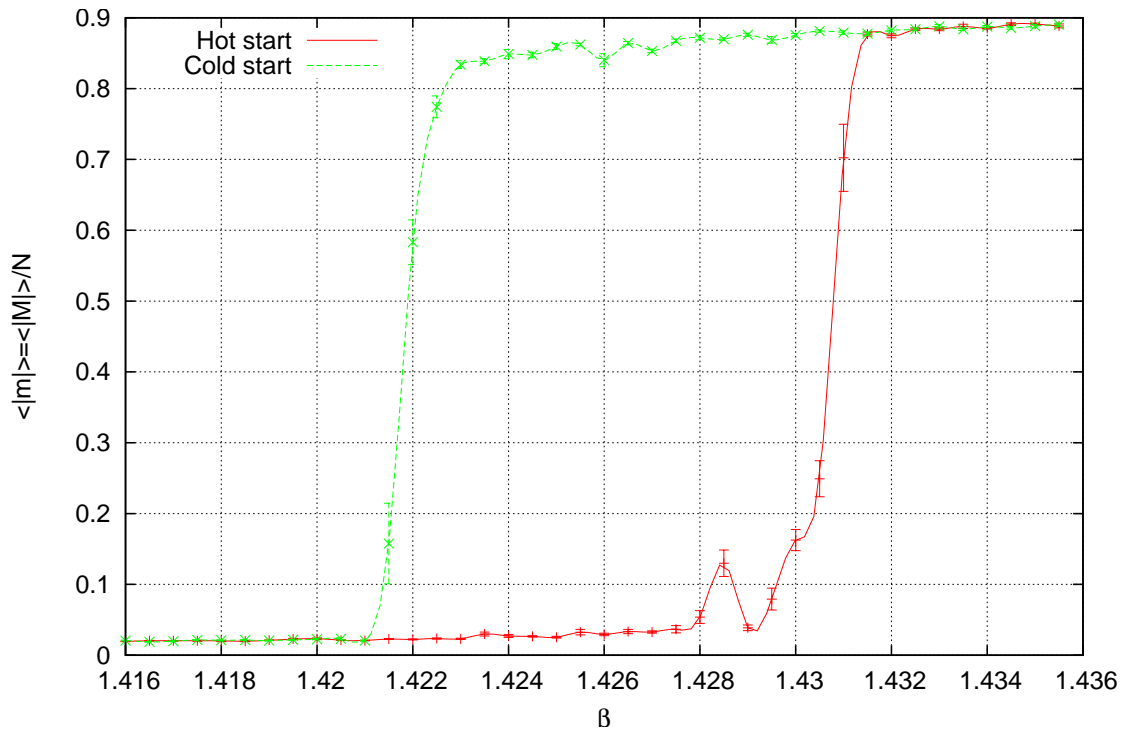
Σχήμα 8.5: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 10$, $L = 96$ με S-W στα 4000 sweeps



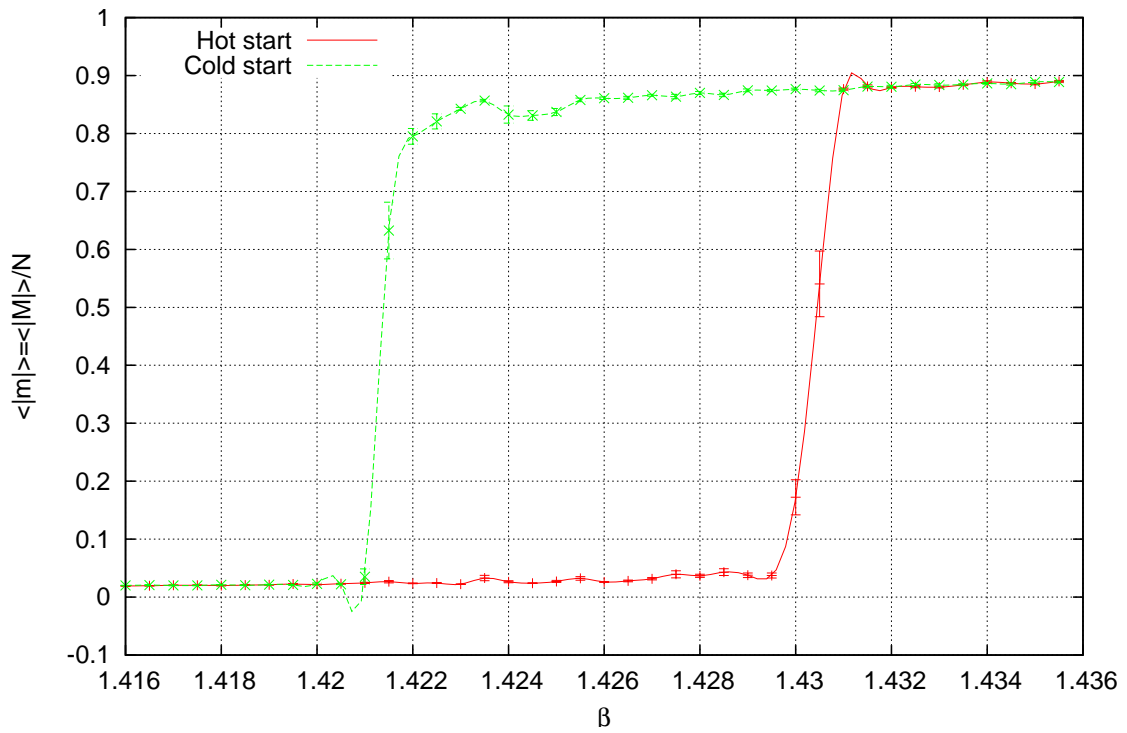
Σχήμα 8.6: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 10$, $L = 96$ με S-W στα 8000 sweeps



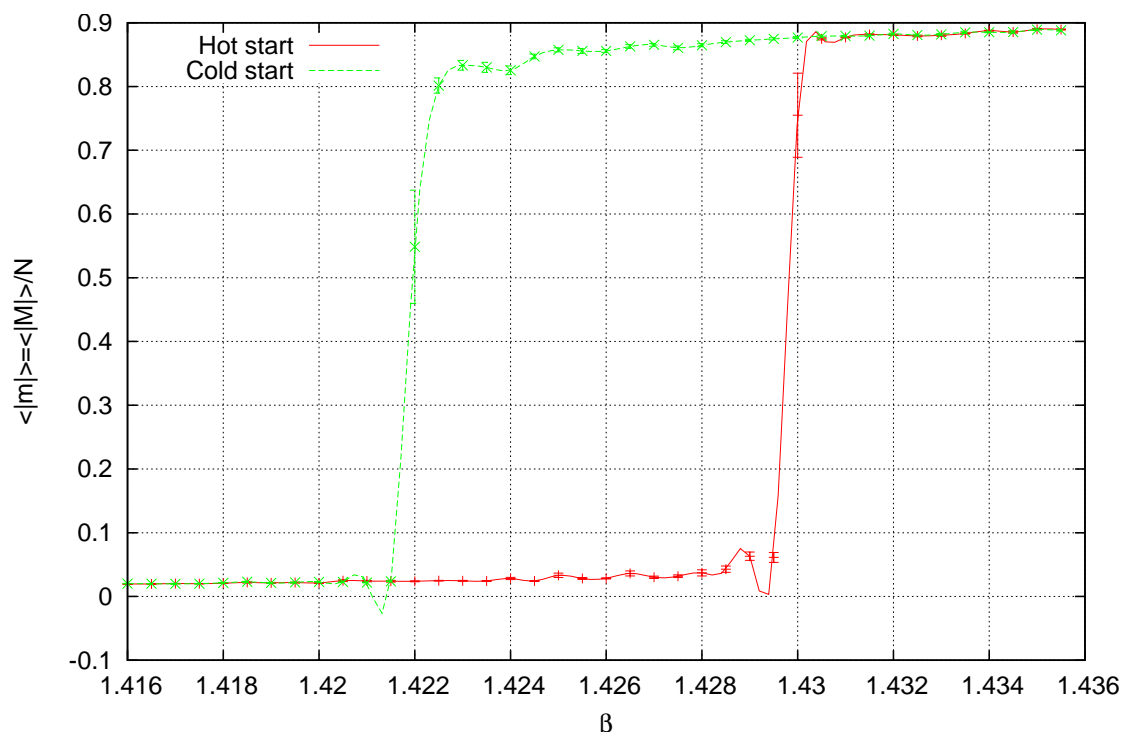
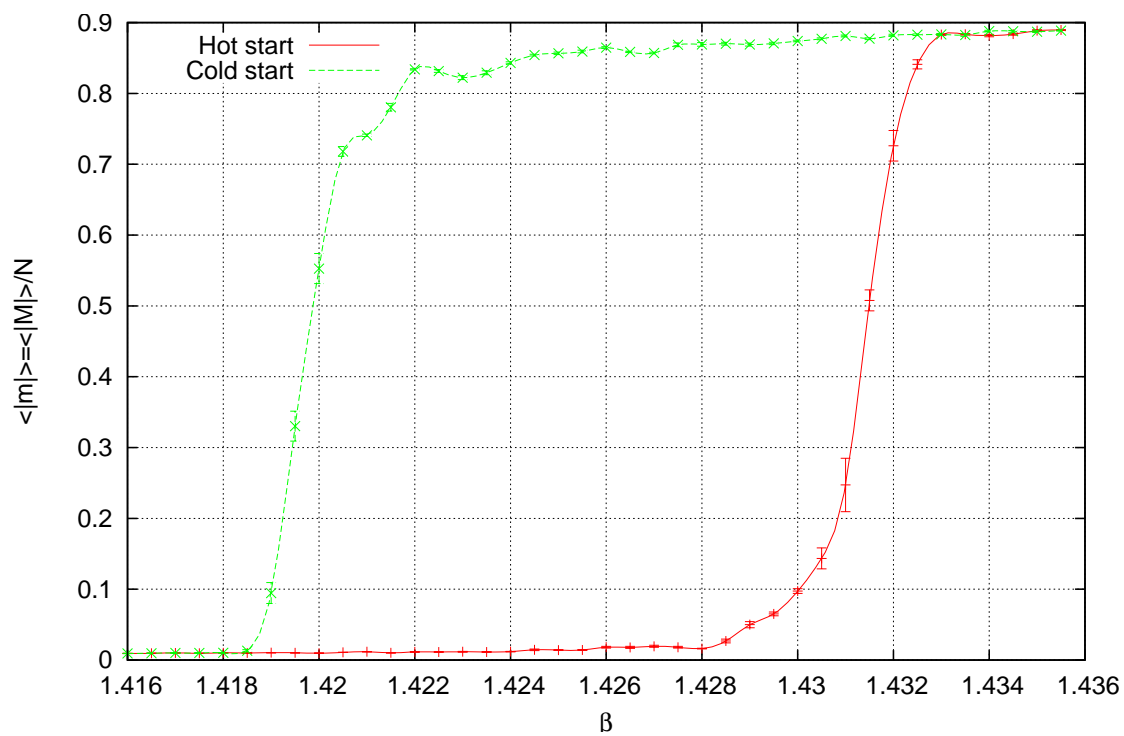
Σχήμα 8.7: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 10$, $L = 128$ με S-W στα 1000 sweeps

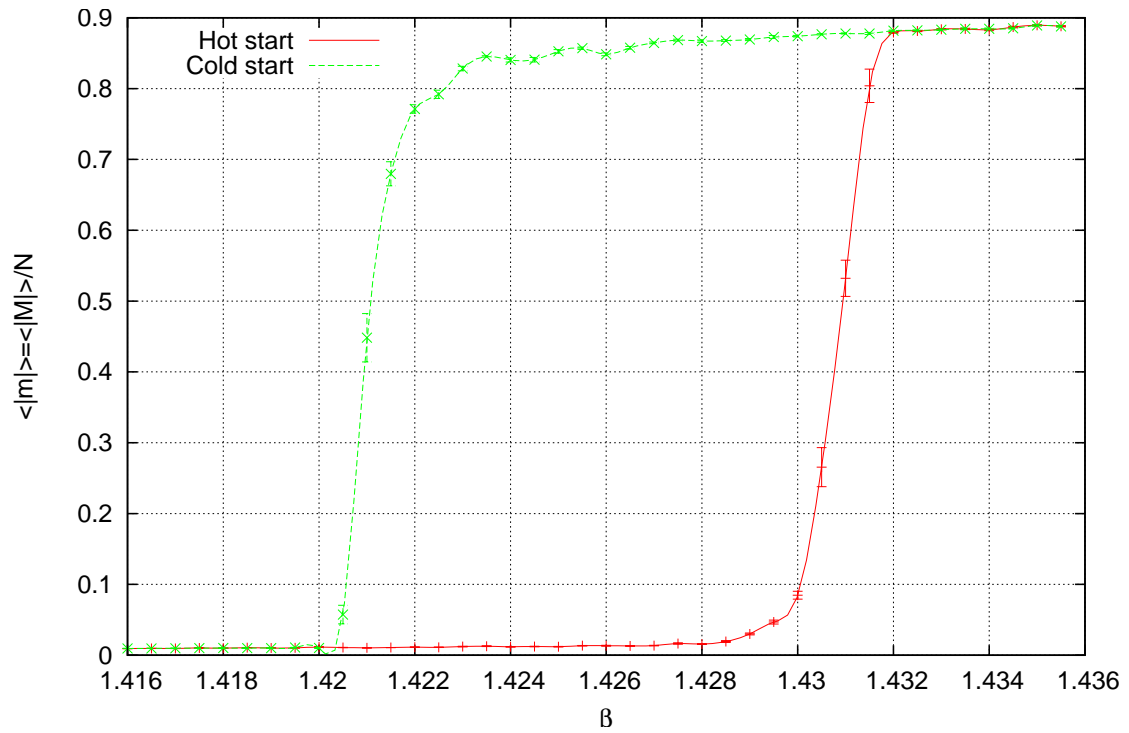


Σχήμα 8.8: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 10$, $L = 128$ με S-W στα 2000 sweeps

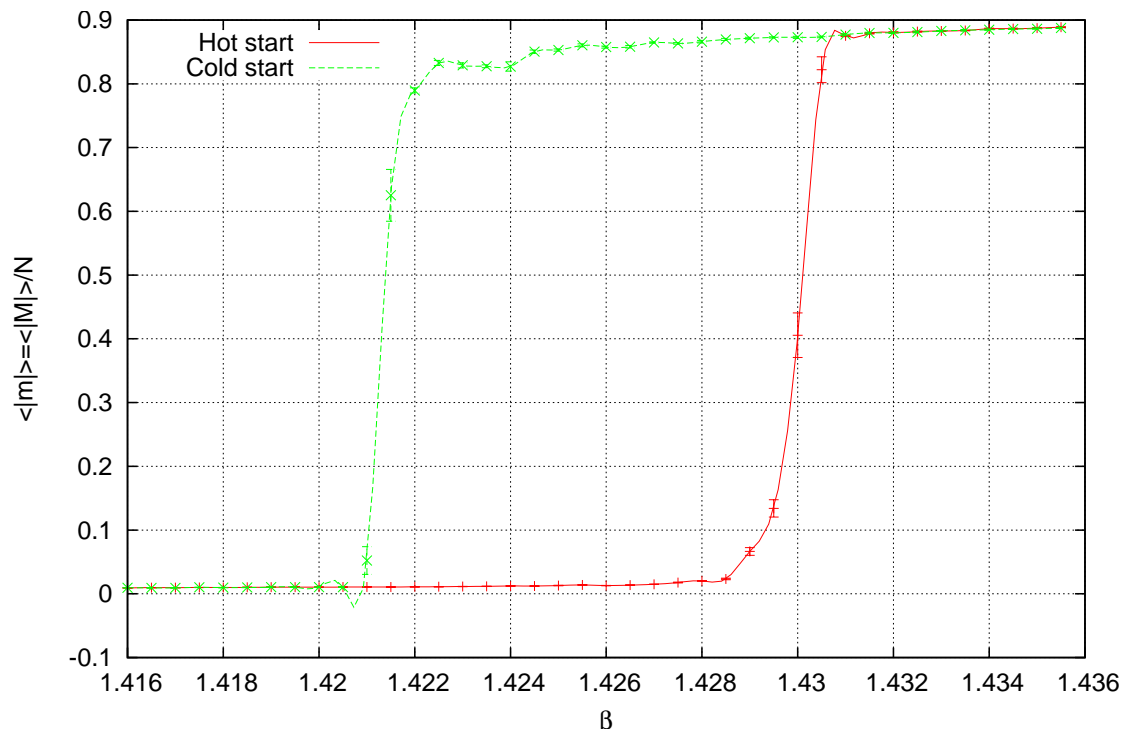


Σχήμα 8.9: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 10$, $L = 128$ με S-W στα 4000 sweeps

Σχήμα 8.10: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 10$, $L = 128$ με S-W στα 8000 sweepsΣχήμα 8.11: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 10$, $L = 256$ με S-W στα 1000 sweeps



Σχήμα 8.12: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 10$, $L = 256$ με S-W στα 2000 sweeps



Σχήμα 8.13: Υστέρηση μαγνήτισης για $q = 10$, $L = 256$ με S-W στα 4000 sweeps

Παράρτημα Α'

Πηγαίος Κώδικας

Listing A.1: common.h: Definitions declarations and variables

```
2  /**
   * Common definitions and declarations
   */
4  #define _GNU_SOURCE

6  #include <stdio.h>
   #include <stdlib.h>
8  #include <unistd.h>
   #include <math.h>
10 #include <libgen.h>
   #include <string.h>
12
13 #define ALGORITHM_METROPOLIS 0
14 #define ALGORITHM_SW 1
   #define ALGORITHM_HEATBATH 2
16
17 #define START_COLD 0
18 #define START_HOT 1
   #define START_CONF 2
20
21 #ifdef BOUNDARY_PERIODIC
22 //
   // Periodic boundary conditions
24 //
   #define BOUNDARY_VARIABLES int dimension, k_base, k_far, k_near
26
   #define BOUNDARY_START k_base = k, k_near = 1, k_far = 1 - L, dimension = 0;
28 #define BOUNDARY_NEXT k_base /= L, k_far *= L, k_near *= L, dimension++
   #define BOUNDARY_HOLDS dimension < D
30
   #define BOUNDARY_FORWARD(_k_) \
32     (((k_base + 1) % L == 0) ? _k_ + k_far : _k_ + k_near)
   #define BOUNDARY_BACKWARD(_k_) \
34     ((k_base % L == 0) ? _k_ - k_far : _k_ - k_near)
36 #else
37 //
   // Helical boundary conditions
38
```

```

40 //
41 #define BOUNDARY_VARIABLES int dimension, k_near
42 #define BOUNDARY_START k_near = 1, dimension = 0
43 #define BOUNDARY_NEXT k_near += L, dimension++
44 #define BOUNDARY_HOLDS dimension < D
45
46 #define BOUNDARY_FORWARD(_k_) (_k_ + k_near) % N
47 #define BOUNDARY_BACKWARD(_k_) (_k_ - k_near + N) % N
48
49 #endif
50
51 // Model parameters
52 int L; // Lattice linear dimension
53 int D; // Lattice dimensions
54 int N; // Lattice size (N = L ^ D)
55 int Q; // Number of Potts states
56 int NN; // Nearest neighbours
57
58 // Initialization parameters
59 long seed; // Random Number Generator seed
60 double beta; // Inverse temperature
61
62 // Dynamic quantities
63 int *s; // lattice of spins with BOUNDARY boundary conditions
64 int *magnets; // potts counts of magnets in state 'q'
65 int magnetization; // Total magnetization
66 int energy; // Total energy
67
68 // Swendsen-Wang
69 double padd; // "add-to-cluster" probability
70 int *cluster; // cluster stack
71
72 // Heatbath
73 int *state_freq; // 'q' state frequencies of spin's neighbours
74
75 // Heatbath & metropolis
76 double *weight_exp; // 'neighbours' pre-calculated exponentials
77
78 // Measurement function
79 void measure();
80
81 // Randomization
82 double drandom();
83
84 // Algorithms
85 void sweep_metropolis();
86 void sweep_sw();
87 void sweep_heatbath();
88
89 // Configuration I/O
90 void conf_read();
91 void conf_write();
92
93 // Output functions
94 void locerr(char*);
95 void usage(char**);

```

```
96 | void comments(int, long, int, int);
```

Listing A.2: maic.c: Entry point initialization and measurement function

```

2  /**
3   * Checkups, initialization, and simulation
4   */
5  #include "common.h"
6
7  // Option letters are defined with this string
8  #define OPTARGS "?hv1234567890.L:b:s:S:n:a:q:d:"
9
10 int main(int argc, char **argv)
11 {
12     void (*sweep)();
13     int verbose = 0;
14     int algorithm = -1, start = -1;
15     int J, i, j, dimension, isweep, nsweep = -1;
16
17     long iseed; // initial seed (used by comments())
18
19     // Initialize parameters
20     D = 2;
21     L = -1;
22     Q = -1;
23     beta = -1.;
24     seed = -1;
25
26     // Read command-line options
27     while ( (i = getopt(argc, argv, OPTARGS)) != -1) {
28         switch (i) {
29             //
30             // Global variables
31             //
32             case 'v':
33                 verbose = 1;
34                 break;
35
36             case 'd':
37                 D = atoi(optarg);
38                 break;
39
40             case 'q':
41                 Q = atoi(optarg);
42                 break;
43
44             case 'L':
45                 L = atoi(optarg);
46                 break;
47
48             case 'b':
49                 beta = atof(optarg);
50                 break;
51
52             case 'S':
53                 seed = atol(optarg);
54                 break;
55
56             //

```

```

56     // Local variables
57     //
58     case 'a':
59         algorithm = atoi(optarg);
60         break;
61
62     case 'n':
63         nsweep = atoi(optarg);
64         break;
65
66     case 's':
67         start = atoi(optarg);
68         break;
69
70     default:
71         usage(argv);
72     }
73 }
74
75 if (Q < 2) {
76     locerr("Potts requires q >= 2");
77 }
78
79 if (nsweep < 0) {
80     locerr("nsweep has not been set");
81 }
82
83 if (D < 2) {
84     locerr("Potts requires D >= 2");
85 }
86
87 if (beta < 0) {
88     locerr("beta has not been set.");
89 }
90
91 if (L < 0) {
92     locerr("L has not been set.");
93 }
94
95 // Calculate size of lattice
96 for (dimension = 0, N = 1; dimension < D; dimension++) {
97     N *= L;      // N = L^D
98 }
99
100 // 2 nearest neighbours per dimension (forward + backward)
101 NN = D * 2;
102
103 // Allocate memory for lattice
104 if (! (s = (int *) malloc((size_t) (N * sizeof(int)))) ) {
105     locerr("Allocation failure for lattice");
106 }
107
108 // Cold / hot start
109 if (start == START_COLD || start == START_HOT) {
110     if (seed < 0) {
111         locerr("seed has not been set.");
112     }

```

```

114     // Calculate derived parameters
       iseed = seed;
116
       // Start
118     if (start == START_COLD) {           // cold start
           for (i = 0; i < N; i++) {
120         s[i] = 1;
           }
122     } else {                             // hot start
           for (i = 0; i < N; i++) {
124         s[i] = (int)(Q * drandom()) % Q;
           }
126     }

128     // start from old configuration
       } else if (start == START_CONF) {
130         conf_read();
           iseed = seed;
132
       // No acceptable start given
134     } else {
           printf("start=%d not valid or not set. Exiting...\n", start);
136         exit(1);
       }
138
       // Pre-calculated exponentials for nearest neighbours
140     // A state might not be occupied (0) or occupied by all neighbours (NN)
       // If cluster is selected, this memory goes wasted, but who cares? :)
142     weight_exp = (double *)malloc((size_t)((NN + 1) * sizeof(double)));

144     if (!weight_exp) {
           locerr("Allocation failure for weight exponentials in Heatbath");
146     }

148     // Perform per algorithm initialization
       switch (algorithm) {
150     case ALGORITHM_METROPOLIS:           // Metropolis
           sweep = &sweep_metropolis;

152
           // exp(-beta * DE), DE = energy difference
154         for (i = 0; i <= NN; i++) {
               weight_exp[i] = exp(-beta * (double)i);
156         }

158         break;

160     case ALGORITHM_SW:                   // Swendsen-Wang

162         // Swendsen-Wang works for Potts
           sweep = &sweep_sw;
164
           // addition to cluster probability
166         padd = 1.0 - exp(-beta);

168         cluster = (int *)malloc((size_t)(N * sizeof(int)));
           if (!cluster) {

```

```

170         locerr("Allocation failure for stack in SW");
171     }
172     break;
173
174     case ALGORITHMHEATBATH:           // Heat-bath
175         sweep = &sweep_heatbath;
176
177         // State frequencies
178         state_freq = (int *)malloc((size_t)(Q * sizeof(int)));
179
180         if (!state_freq) {
181             locerr("Allocation failure for state frequencies in Heatbath");
182         }
183
184         // exp(beta * sigma), sigma = number of states
185         for (i = 0; i <= NN; i++) {
186             weight_exp[i] = exp(beta * (double)i);
187         }
188
189         break;
190
191     default:                           // Nothing appropriate
192         locerr("Bad algorithm specified");
193     }
194
195     // Allocate memory space for magnet counters
196     magnets = (int *)malloc((size_t)(Q * sizeof(int)));
197     if (!magnets) {
198         locerr("Allocation failure for magnet counters");
199     }
200
201     // Measure everything from scratch
202     measure ();
203
204     // Inform user about simulation parameters
205     if (verbose) {
206         comments(algorithm, iseed, nsweep, start);
207     }
208
209     // Run the simulation
210     for (isweep = 0; isweep < nsweep; isweep++) {
211         // Perform the sweep
212         sweep ();
213
214         // Find J, the maximum state
215         for (i = 0, J = 0; i < Q; i++) {
216             if (J < magnets[i]) {
217                 J = magnets[i];
218             }
219         }
220
221         // Output measurement
222         printf("%d %d\n", energy, J - (N-J)/(Q - 1));
223     }
224
225     // Output results to conf file anyway

```

```
228     conf_write ();
230 }
232 /**
233  * Measure energy and magnetization from scratch
234  */
235 void measure ()
236 {
237     int k;
238     BOUNDARY_VARIABLES;
239
240     // Make everything zero
241     energy = 0;
242
243     for (k = 0; k < Q; k++) {
244         magnets[k] = 0;
245     }
246
247     // Initialize magnets and energy
248     for (k = 0; k < N; k++) {
249
250         // Only forward neighbours are necessary in the energy sum
251         for (BOUNDARY_START; BOUNDARY_HOLDS; BOUNDARY_NEXT) {
252             energy -= (s [BOUNDARY_FORWARD(k)] == s [k]);
253         }
254         magnets[s[k]]++;
255     }
256 }
```


Listing A.3: output.c: Output functions

```

1  /**
2   * Checkups, initialization, and simulation
3   */
4
5  #include "common.h"
6  #include <time.h>
7
8  void usage(char **argv)
9  {
10     //
11     // Careful: New lines ned with \n : No space after last backslacsh
12     // indicates line is broken....
13     //
14     fprintf(stderr, "\
15 Usage: %s [options]                                \n\
16         -L: Lattice length (N=L*L)                  \n\
17         -b: beta   (options beta overrides the one in config) \n\
18         -s: start (0 cold, 1 hot, 2 old config)        \n\
19         -S: seed   (options seed overrides the one in config) \n\
20         -n: number of swweeps and measurements of E and M   \n\
21         -a: algorithm (0 metropolis, 1 wolff, 2 heatbath)    \n\
22 Monte Carlo simulation of 2d Ising Model. Metropolis is used by \n\
23 default, cluster algorithms can be chosen with options. Using the \n\
24 options, the parameters of the simulations must be set for a new run \n\
25 (start=0,1). If start=2, a configuration is read from the file conf.\n",
26     basename(argv[0]));
27
28     exit(1);
29 }
30
31 void comments(int algorithm, long iseed, int nsweep, int start)
32 {
33     time_t t;
34     const char *algorithms[] = {
35         "Metropolis", "Swendsen-Wang", "Heat-bath"
36     };
37
38     const char *starts[] = {
39         "cold", "hot", "old conf"
40     };
41
42     time(&t);
43
44     printf("\
45 #####\n\
46 # Potts Model with %s algorithm on square lattice \n\
47 # Created on %s# \n\
48 # L = %d (Lattice linear dimension, N=L*L=%d) \n\
49 # seed = %ld (for random number generator) \n\
50 # nsweeps = %d (No. of sweeps => %d MC steps) \n\
51 # beta = %f (kT = %.2f J) \n\
52 # start = %d (%s)\n",
53     algorithms[algorithm], ctime(&t), L, N, iseed,
54     nsweep, nsweep * N, beta, 1/beta, start, starts[start]);
55 }

```

```
57 void locerr(char *errmes)
58 {
59     fprintf(stderr, "sweep: %s Exiting...\n", errmes);
60     exit(1);
61 }
```

Listing A.4: conf.c: Lattice configuration I/O

```

1  /**
2   * 'conf' file read/write functions
3   */
4
5  #include "common.h"
6
7  void conf_read()
8  {
9      int i;
10     size_t len = 1024;
11     char buf[1024];
12
13     long oseed = -1;
14     int OL = -1, OD = -1;
15     FILE *file;
16
17     if (!(file = fopen("conf", "r"))) {
18         locerr("Configuration file conf not found");
19     }
20
21     // Read and ignore first line of conf file
22     // getline((char *)&buf, &len, file);
23
24     // The %*s modifier reads a string and ignores it
25     fscanf(file, "%*s %d %*s %d %*s %ld", &OD, &OL, &oseed);
26
27     if (L != OL) {
28         locerr("Given L different from the one read from conf");
29     }
30
31     if (D != OD) {
32         locerr("Given D different from the one read from conf");
33     }
34
35     // Initialize lattice
36     for (i = 0; i < N; i++) {
37         if (fscanf(file, "%d", &s[i]) != 1) {
38             locerr("conf ended before reading s[N]");
39         }
40     }
41
42     fclose(file);
43 }
44
45 void conf_write()
46 {
47     FILE *file;
48     int i;
49
50     rename("conf", "conf.old");
51     if (!(file = fopen("conf", "w"))) {
52         locerr("Could not write to configuration file 'conf'");
53     }
54
55     // fprintf(file, "# Configuration of D-dimensional Q-state Potts model\n");

```

```
57     fprintf(file , "D= %d L= %d seed= %ld\n" , D, L, seed);  
59     for (i = 0; i < N; i++) {  
61         fprintf(file , "%d\n" , s[i]);  
63     }  
    fclose(file);  
}
```

Listing A.5: metropolis.c: Metropolis algorithm

```

1  /**
2   * Metropolis algorithm for Potts model
3   */
4
5  #include "common.h"
6
7  void sweep_metropolis()
8  {
9      int k, step, spin_new, spin_neighbour;
10     int delta;
11     BOUNDARY_VARIABLES;
12
13     for (step = 0; step < N; step++) {
14         // Choose a random site
15         k = N * drandom();
16
17         // Get a new spin, other than the current
18         spin_new = (int)((Q - 1) * drandom()) % (Q - 1);
19
20         // Make sure don't choose the same spin
21         if (s[k] == spin_new) {
22             spin_new = Q - 1;
23         }
24
25         // Sum of the neighbouring spins
26         for (delta = 0, BOUNDARY_START; BOUNDARY_HOLDS; BOUNDARY_NEXT) {
27             spin_neighbour = s[BOUNDARY_FORWARD(k)];
28             delta += (spin_neighbour == s[k]) - (spin_neighbour == spin_new);
29
30             spin_neighbour = s[BOUNDARY_BACKWARD(k)];
31             delta += (spin_neighbour == s[k]) - (spin_neighbour == spin_new);
32         }
33
34         // Decide whether to flip spin
35         if ((delta <= 0) || (drandom() < weight_exp[delta])) {
36             // Update magnetization and energy
37             magnets[spin_new]++;
38             magnets[s[k]]--;
39
40             energy += delta;
41
42             // Flip it
43             s[k] = spin_new;
44         }
45     }
46 }

```

Listing A.6: heatbath.c: Heatbath algorithm

```

2  /**
3   * Heatbath algorithm
4   */
5
6  #include "common.h"
7
8  void sweep_heatbath()
9  {
10     int i, k, step, oldspin;
11     double weight_sum, weight_random;
12     BOUNDARY_VARIABLES;
13
14     for (step = 0; step < N; step++) {
15
16         // Choose a spin at random and save it
17         k = N * drandom();
18
19         // Clean-up frequencies
20         for (i = 0; i < Q; i++) {
21             state_freq[i] = 0;
22         }
23
24         // Fill neighbour frequencies
25         // Both forward and backward neighbours are taken into account
26         for (BOUNDARY_START; BOUNDARY_HOLDS; BOUNDARY_NEXT) {
27             state_freq[s[BOUNDARY_FORWARD(k)]]++;
28             state_freq[s[BOUNDARY_BACKWARD(k)]]++;
29         }
30
31         // Calculate total weight
32         weight_sum = 0.0;
33         for (i = 0; i < Q; i++) {
34             weight_sum += weight_exp[state_freq[i]];
35         }
36
37         // Choose the new state for the spin (heat-bath algorithm)
38         weight_random = weight_sum * drandom();
39
40         // Find the new state our random weight corresponds to
41         // The i < Q restriction should be automatically met
42         // if weights are correctly computed
43         // After the loop, i will be holding the new state
44         for (i = 0; weight_random > 0; i++) {
45             weight_random -= weight_exp[state_freq[i]];
46         }
47         i--;
48
49         // Update energy and magnetization
50         if (s[k] != i) {
51             magnets[i]++;
52             magnets[s[k]]--;
53
54             energy -= state_freq[i];
55             energy += state_freq[s[k]];

```

```
56     // Update spin
57     s[k] = i;
58 }
59 }
60 }
```

Listing A.7: sw.c: Swendsen-Wang algorithm

```

2  /**
3  * Swendsen-Wang algorithm, perform one Swendsen-Wang step
4  * http://staff.science.nus.edu.sg/~phywjs/Bworkshop/sw-oner-gg.c
5  */
6  #include "common.h"
7
8  void sweep_sw ()
9  {
10     int k, j, cluster_count, a, b;
11     BOUNDARY_VARIABLES;
12
13     // Initially each site is a cluster by itself
14     // later, site i has the same cluster as site cluster[i] (recursively)
15     for (k = 0; k < N; k++) {
16         cluster[k] = k;
17     }
18
19     // set the bond with prob P
20     for (k = 0; k < N; k++) {
21
22         for (BOUNDARY_START; BOUNDARY_HOLDS; BOUNDARY_NEXT) {
23             // Forward neighbour
24             j = BOUNDARY_FORWARD(k);
25
26             // Hoshen-Kopelman
27             if ((s[k] == s[j]) && (drandom() < padd)) {
28
29                 // Locate k's cluster
30                 for (a = cluster[k]; a > cluster[a]; a = cluster[a]);
31
32                 // Locate j's cluster
33                 for (b = cluster[j]; b > cluster[b]; b = cluster[b]);
34
35                 // Lower cluster wins
36                 if (a > b) {
37                     cluster[a] = cluster[k] = b;
38                 } else {
39                     cluster[b] = cluster[k] = a;
40                 }
41             }
42         }
43     }
44
45     // Count and re-label clusters
46     cluster_count = 0;
47     for (k = 0; k < N; k++) {
48
49         // New cluster found. Over-write spin value with new cluster id
50         if (k == cluster[k]) {
51             s[k] = cluster_count;
52             cluster_count++;
53
54             // k belongs to another cluster. Find parent and replace with id
55         } else {

```



```
56         for (j = cluster[k]; j > cluster[j]; j = cluster[j]);
57             s[k] = s[j];
58     }
59 }
60
61 // Calculate new random spin for each cluster
62 for (j = 0; j < cluster_count; j++) {
63     cluster[j] = (int)(Q * drandom()) % Q;
64 }
65
66 // Flip spins with their cluster's new value
67 for (k = 0; k < N; k++) {
68     s[k] = cluster[s[k]];
69 }
70
71 measure ();
72 }
```


Ευρετήριο

Αντίστροφη θερμοκρασία (β), 2
Αντισιδηρομαγνητικό μοντέλο, 6
Διάσταση πλέγματος, 6
Διαδικασία Markov, 9
Ειδική θερμότητα, 2
Ειδική θερμότητα ανά δεσμό, 14
Ενέργεια ανά δεσμό, 14
Ενέργεια Helmholtz, 3
Εντροπία, 3
Εσωτερική ενέργεια, 2
Κλιμάκωση πεπερασμένου μεγέθους, 5
Κρίσιμο σημείο, 3
Κρίσιμος εκθέτης, 4
Λανθάνουσα θερμότητα, 4
Μήκος αυτοσυσχέτισης, 4
Μαγνήτιση, 3
Μαγνήτιση ανά πλεγματοεικό σημείο, 14
Μαγνητική επιδεκτικότητα, 14
Μαγνητική υστέρηση, 15
Μετάβαση φάσης, 3
Μετάβαση πρώτης τάξης, 4
Παγκοσμιότητα, 4
Παραμαγνητική φάση, 3
Πλεγματοεική θέση, 2
Σιδηρομαγνητική φάση, 3
Σιδηρομαγνητικό μοντέλο, 6
Σταθερά αλληλεπίδρασης, 2
Συνάρτηση επιμερισμού, 2
Συνεχής μετάβαση, 4
Συνθήκη Εργοδικότητας, 10
Συνθήκη Λεπτομερούς Ισοζύγισης, 10
Τάξη μετάβασης, 3
Τετραγωνικό πλέγμα, 7
Binder Cumulant, 14
Clock model, 2
Energy Cumulant, 14
Monte Carlo, 9
Standard Potts model, 2
Vector Potts model, 2
XY Model, 2

Βιβλιογραφία

- [1] Jian-Sheng Wang, <http://staff.science.nus.edu.sg/phywjs/>.
- [2] M. E. Newman & G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. OXFORD University Press, Oxford 2002.
- [3] F. Y. Wu, *Rev. Mod. Phys.*, Vol. 54, 235–268 1982.
- [4] K. Binder, *Finite Size Scaling Analysis of Ising Model Block Distribution Functions*. Z. Phys. B - Condensed Matter 43, 119-140 1981.
- [5] B. A. Berg, *Markov Chain Monte Carlo Simulations and their statistical analysis*. World Scientific Publishing, Singapore 2004.
- [6] K. Binder & D. W. Heermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics: An introduction*. Springer-Verlag, Germany 2002.
- [7] C. Borgs & W. Janke, *New Method to Determine First-Order Transition Points from Finite-Size Data*. Phys. Rev. Letters, Vol. 68, 11 1992.
- [8] H. Gould & J. Tobochnik & W. Christian, *An Introduction to Computer Simulation Methods*. Addison Wesley, San Francisco 2007.
- [9] M. Hellmann & Y. Deng & M. Weiss & D. W. Heermann, *Phase transition of a two-dimensional, multiplicatively coupled XY-Potts model*. J. Phys. A: Math. Theor. 42 2009.
- [10] F. Y. Wu, *Exactly Solved Models: A journey in statistical mechanics*. World Scientific Publishing, Singapore 2009.
- [11] P.M.C. de Oliveira & S.M. Moss de Oliveira & C.E. Cordeiro & D. Stauffer, *Finite size scaling for first order transitions: Potts Model*. arXiv.org, cond-mat, arXiv:cond-mat/9503102 1995.
- [12] A. M. Ferrenberg & R. H. Swendsen, *New Monte Carlo technique for studying phase transitions*. Phys. Rev. Lett., Vol. 61, 2635–2638 1988.
- [13] C. Borgs & R. Kotecký & S. Miracle-Solé, *Finite-size scaling for Potts models*. Journal of Statistical Physics, Vol. 62, Numbers 3-4, 529-551 1990.
- [14] M. Baig & R. Villanova, *Scaling laws for the two-dimensional eight-state Potts model with fixed boundary conditions*. Phys. Rev. B 65, 094428 2002.
- [15] W. Janke, *Accurate first-order transition points from finite-size data without power-law corrections*. Phys. Rev. B 47, 14757–14770 1993.
- [16] K. Vollmayr & J. D. Reger & M. Scheucher & K. Binder, *Finite size effects at thermally-driven first order phase transitions: A phenomenological theory of the order parameter distribution*. Z. Phys. B Condensed Matter, Vol. 91, Number 1, 113-125 1992.