

# Διπλωματική Εργασία στην Υπολογιστική Φυσική

Μελέτη του Δισδιάστατου Πρότυπου  
Heisenberg με Μεθόδους Monte Carlo

Καλλιστής Νικόλαος

Επιβλέπων καθηγητής: Αναγνωστόπουλος Κωνσταντίνος



# Σκοπός της Διπλωματικής Εργασίας

Σκοπός της διπλωματικής εργασίας είναι η περιγραφή του μοντέλου Heisenberg στις 2 διαστάσεις και η μελέτη των ιδιοτήτων αυτού, με την μέθοδο Monte Carlo.

## Συγκεκριμένα ερευνάμε:

- Την ύπαρξη ή όχι μετάβασης φάσης.
- Την ύπαρξη ή όχι του φαινομένου asymptotic scaling.

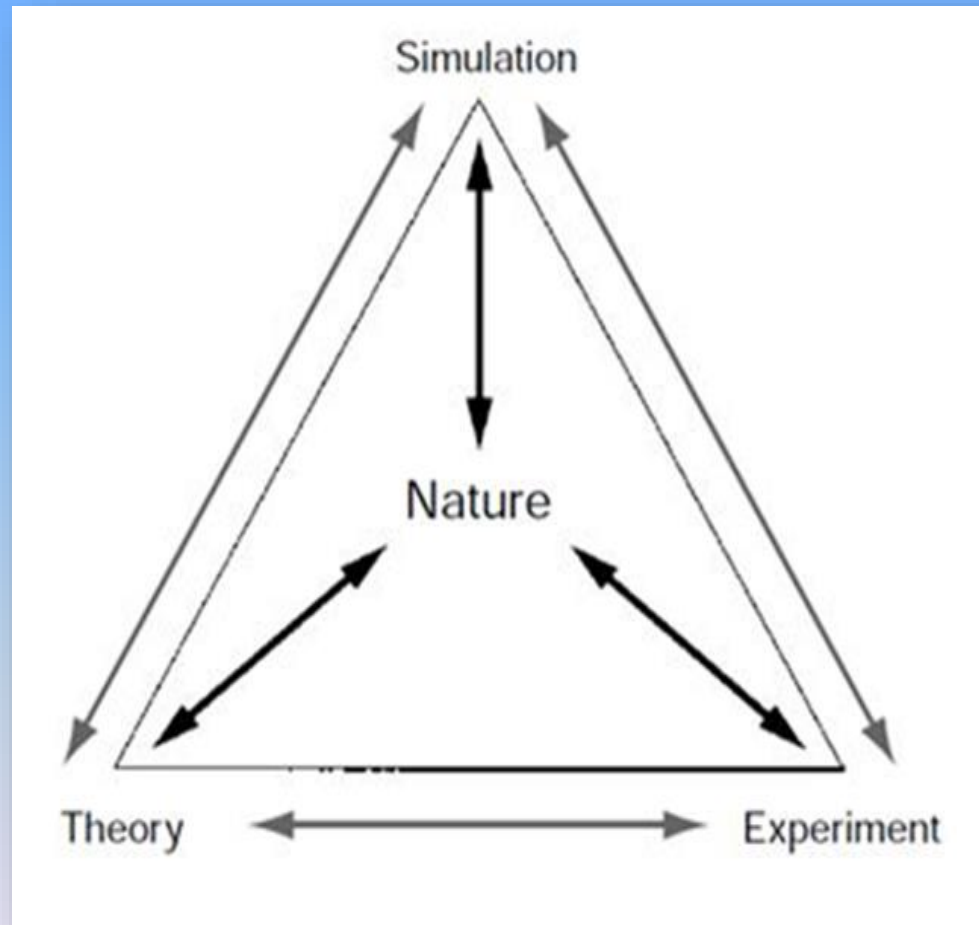
Στο μεγαλύτερο μέρος των προβλημάτων που έχουν επιστημονικό ενδιαφέρον σήμερα, δεν υπάρχουν ακριβείς αναλυτικές λύσεις. Έτσι για να μελετήσουμε αυτά τα προβλήματα χρησιμοποιούμε προσεγγιστικές αριθμητικές μεθόδους, οι οποίες μπορεί να είναι:

- Θεωρίες πεδίου

- Προσεγγίσεις μέσω αριθμητικών σειρών

- ❖ Υπολογιστικές μέθοδοι

# Σχηματική απεικόνιση των σχέσεων μεταξύ Θεωρίας – Πειράματος – Προσομοίωσης.





Οι υπολογιστικές μέθοδοι είναι ευρέως διαδεδομένες σε προβλήματα φυσικής αλλά και όχι μόνο, καθώς μας επιτρέπουν να μελετάμε μέσω προσομοίωσης πολλά συστήματα τα οποία

Είναι αδύνατον να μελετήσουμε μέσω πειράματος.

Είναι πολύ χρονοβόρα

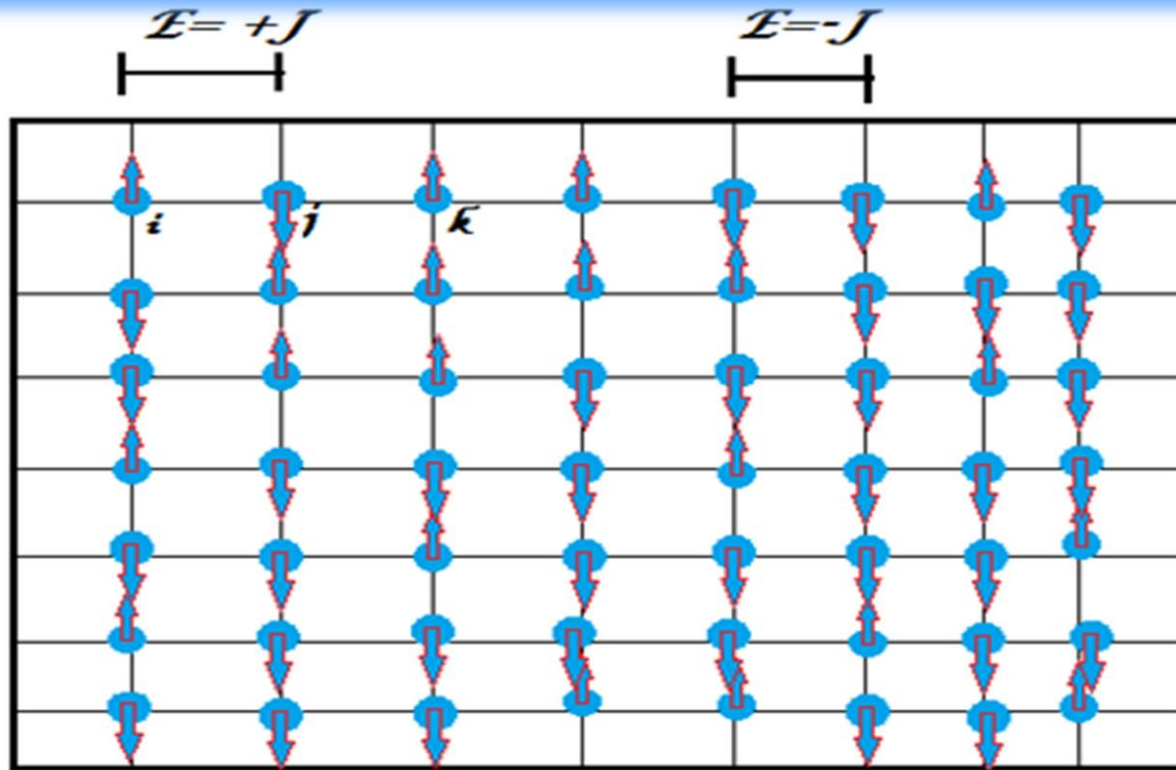
Είναι πολύ περίπλοκα

Επίσης, μέσω των υπολογιστικών μεθόδων μπορούμε να έχουμε τον πλήρη έλεγχο των μεταβλητών που επηρεάζουν το σύστημα μας, δίνοντας μας έτσι απεριόριστες δυνατότητες στην μελέτη και στην εξήγηση φαινομένων.

Το μοντέλο Heisenberg, ουσιαστικά περιγράφει ένα σύστημα στο οποίο υπάρχουν διατεταγμένα στοιχεία, τα οποία παρουσιάζουν, μαγνητικές ιδιότητες, όπως το spin, και μπορούν να αλληλεπιδρούν με τους γείτονες τους, αλλά και με ένα πιθανό εφαρμοζόμενο εξωτερικό πεδίο. Διαφέρει από το μοντέλο Ising, και το μοντέλο XY, στο ότι η διεύθυνση των spins είναι ελεύθερη να κινηθεί και στις 3 διαστάσεις του χώρου.

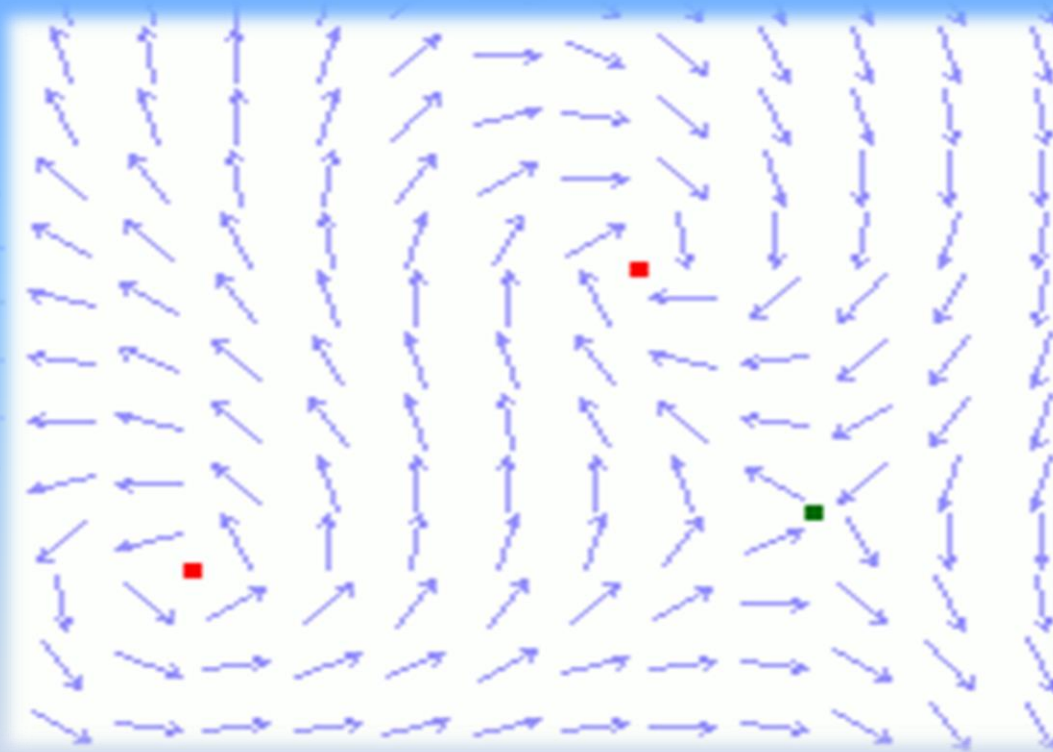
Μελετάται ευρέως, καθώς παρουσιάζει πολλές ομοιότητες με τις θεωρίες βαθμίδας (*gauge theories*) και λειτουργεί σαν ένα απλοποιημένο μοντέλο (*Toy Model*) της Κβαντικής Χρωμοδυναμικής (*QCD*), όπου παρατηρείται το φαινόμενο του Asymptotic Freedom.

# Ising Model



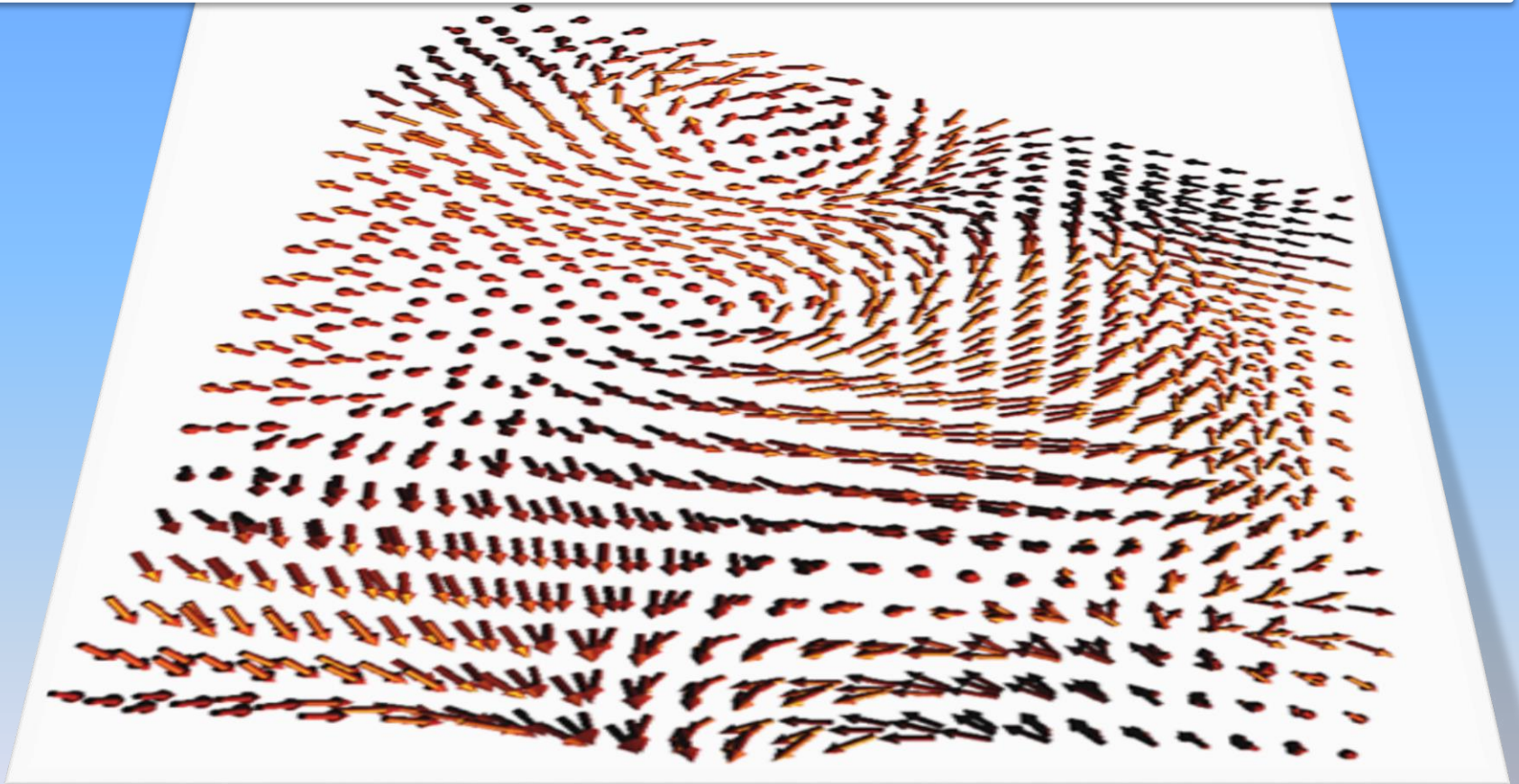
Ising σε 2 διαστάσεις (8x7). Τα spins μπορούν να πάρουν 2 διευθύνσεις με χαμηλότερη ενέργεια αυτή στην οποία θα είναι ομόρροπα με τα γειτονικά τους (σιδηρομαγνητικό μοντέλο).

# XY model



Χάρη στην περιοδικότητα της ενέργειας αλληλεπίδρασης του πρότυπου XY, παρατηρούμε περιοχές με τοπολογίες οι οποίες παρουσιάζουν μια συγκεκριμένη συμπεριφορά. Έτσι έχουμε περιοχές στις οποίες τα spins σχηματίζουν “δίνες” (Vortex) και άλλες στις οποίες σχηματίζουν “άντι-δίνες” (anti-Vortex) [13]

# Heisenberg Model – O(3)



Το μοντέλο Heisenberg, στο οποίο τα spins είναι ελεύθερα να πάρουν οποιαδήποτε κατεύθυνση στον 3D-χώρο [14].

Τα συστήματα αυτά που περιγράψαμε ανήκουν στην κατηγορία της στατιστικής μηχανικής, δηλαδή υπόκεινται σε δυνάμεις που περιγράφονται από την Χαμιλτονιάνη.



# Hamiltonian του μοντέλου Heisenberg

$$H_{Heisenberg} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i \cdot S_j) - H_z \sum_i S_i^z$$

$$(S_i^x)^2 + (S_i^y)^2 + (S_i^z)^2 = 1$$

όπου το spin  $S_i$ , μπορεί να πάρει οποιαδήποτε διεύθυνση στον χώρο, το  $J$  χαρακτηρίζει την αλληλεπίδραση των spins και το  $H$  είναι το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο που εφαρμόζεται στο σύστημα. Το  $J$  μπορεί να πάρει είτε θετικές τιμές ( $J > 0$ ) είτε αρνητικές ( $J < 0$ ) ανάλογα με αν το σύστημα μας είναι σιδηρομαγνητικό (ferromagnetic) ή αντισιδηρομαγνητικό (anti-ferromagnetic). Η αλληλεπίδραση των spins, περιορίζεται στα γειτονικά ζεύγη spins  $\langle i, j \rangle$ . Παρατηρούμε ότι στο σιδηρομαγνητικό μοντέλο, κάθε δεσμός που ενώνει ομόρροπα spin έχει ενέργεια  $-J$  που είναι κατά  $2J$  μικρότερη από ένα δεσμό με αντίρροπα spin. Το σιδηρομαγνητικό μοντέλο, ενεργειακά προτιμά καταστάσεις με δεσμούς ομόρροπους, δηλαδή τα spin να είναι όλα προσανατολισμένα προς την ίδια κατεύθυνση. Η ελάχιστη ενέργεια αντιστοιχεί στην μοναδική κατάσταση με όλα τα spin προσανατολισμένα προς την ίδια κατεύθυνση με αυτήν του  $H$ .

Αποδεικνύεται (Gibbs 1902) ότι οι πιθανότητες  $p_\mu$  για σύστημα σε θερμική ισορροπία με δεξαμενή θερμοκρασίας  $\beta=1/kT$ , ακολουθούν την κατανομή Boltzman

$$p_\mu = \frac{1}{Z} e^{-E_\mu/kT} = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_\mu}$$

όπου  $E_\mu$  είναι η ενέργεια του συστήματος στην κατάσταση  $\mu$  και το  $k$  είναι η σταθερά Boltzmann ( $1.38 \times 10^{-23} J K^{-1}$ ). Η παράμετρος  $\beta$  θα αναφέρεται απλά ως η θερμοκρασία του συστήματος και βλέπουμε ότι μέσω του εκθετικού στην εξίσωση, καθορίζει μια χαρακτηριστική ενέργεια για το σύστημα.



# Συνάρτηση επιμερισμού Z

Η σταθερά Z είναι η συνάρτηση επιμερισμού του συστήματος και είναι η σταθερά κανονικοποίησης (*normalization constant*) της κατανομής  $p_\mu$ . Η σχέση  $\sum_\mu p_\mu = 1$  μας δίνει

$$Z(\beta) = \sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}$$

Η συνάρτηση επιμερισμού μας δίνει πολλές περισσότερες πληροφορίες από ότι μια απλή σταθερά κανονικοποίησης. Όπως θα δούμε και στη συνέχεια της εργασίας, η γνώση της συνάρτησης επιμερισμού σε σχέση με την θερμοκρασία και τους άλλους παράγοντες που επηρεάζουν το σύστημα, μπορεί να μας δώσει σχεδόν όλη τη συμπεριφορά του μακροσκοπικού συστήματος.

# Μέση τιμή

Η μέση τιμή μιας ποσότητας του συστήματος (ενέργεια, εντροπία, ειδική θερμοχωρητικότητα, κ.α.) μπορεί να υπολογιστεί με την χρήση των βαρών από τη σχέση:

$$\langle Q \rangle = \sum_{\mu} Q_{\mu} w_{\mu}(t) = \sum_{\mu} Q_{\mu} p_{\mu} = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} Q_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}$$

Όπου  $Q_{\mu}$  είναι η τιμή που παίρνει η ποσότητα που εξετάζουμε στην κατάσταση  $\mu$ .

# Διακύμανση

$$(\Delta Q)^2 \equiv \langle (Q - \langle Q \rangle)^2 \rangle = \langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2$$

Κάθε παρατηρησιμή ποσότητα  $Q$  έχει στοχαστική συμπεριφορά με μια κατανομή πιθανότητας  $p(Q)$  που προκύπτει από την κατανομή Boltzmann. Μια τέτοια κατανομή χαρακτηρίζεται πλήρως από τη μέση τιμή  $\langle Q \rangle$  και τις ροπές ανώτερης τάξης, δηλαδή τις μέσες τιμές  $\langle (Q - \langle Q \rangle)^n \rangle$ ,  $n=1,2,3\dots$ . Η πιο χρήσιμη ποσότητα από αυτές δίνεται από τη διακύμανση γύρω από τη μέση τιμή για  $n=2$

# Υπολογισμός των ποσοτήτων

Από τις προηγούμενες σχέσεις, γράφουμε για τα μεγέθη που μας ενδιαφέρουν:

## ➤ Ενέργεια (εσωτερική):

$$U \equiv \langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} E_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} = -\frac{1}{Z} \sum_{\mu} \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\beta E_{\mu}} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} \Leftrightarrow$$
$$\Leftrightarrow U = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

$$(\Delta E)^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} - \left( -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)^2 = \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2}$$

# Υπολογισμός των ποσοτήτων

## ➤ Μαγνήτιση:

$$\langle M \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} E_{\mu} e^{-\beta M_{\mu} + \beta B M_{\mu}} = \frac{1}{\beta Z} \frac{\partial Z}{\partial B}$$

$$(\Delta M)^2 = \frac{1}{\beta^2} \left\{ \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial B^2} - \frac{1}{Z^2} \left( \frac{\partial Z}{\partial B} \right)^2 \right\} = \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial B^2} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial B}$$

# Υπολογισμός των ποσοτήτων

Ειδική θερμότητα:

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\partial \beta}{\partial T} \frac{\partial U}{\partial \beta} = (-k\beta^2) \left( -\frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} \right) = k\beta^2 \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} \Rightarrow$$
$$\Rightarrow C = k\beta^2 \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} = k\beta^2 (\Delta E)^2$$

Καταλήγουμε στο ενδιαφέρον συμπέρασμα ότι η ειδική θερμότητα ενός συστήματος (θερμοδυναμική ποσότητα) συνδέεται άμεσα με τις μικροσκοπικές στατιστικές διακυμάνσεις της ενέργειας του συστήματος. Αυτό είναι γνωστό σαν το **θεώρημα γραμμικής απόκρισης (*linear response theorem*)** και ισχύει γενικά για οποιαδήποτε ποσότητα έχει γραμμική σύζευξη με το σύστημα.

# Υπολογισμός των ποσοτήτων

**Μαγνητική Επιδεκτικότητα:**

$$\chi = \frac{1}{N} \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial B} = \frac{\beta}{N} (\langle (M - \langle M \rangle)^2 \rangle) = \frac{\beta}{N} (\Delta M)^2$$

η οποία σχετίζεται άμεσα με τις διακυμάνσεις της μαγνήτισης.

# Συνάρτηση Συσχετισμού

Προχωρώντας ένα βήμα παραπέρα, ενδιαφερόμαστε να βρούμε τι σχέση υπάρχει ανάμεσα στα στοιχεία του συστήματος τα οποία βρίσκονται σε διαφορετικές θέσεις. Δηλαδή ψάχνουμε να βρούμε τι αποτέλεσμα θα έχει μια μεταβολή σε ένα σημείο του συστήματος μας, σε μια άλλη θέση του συστήματος και το πόσο αλληλένδετα είναι τα στοιχεία αυτών των θέσεων.



# Συνάρτηση Συσχετισμού

$$x_{ij} = \beta G_c^{(2)}(i, j)$$

Η ποσότητα  $G_c^{(2)}(i, j)$  ονομάζεται συνάρτηση συσχετισμού 2 σημείων του  $x$  μεταξύ των σημείων  $i$  και  $j$ . Όπως φανερώνει και το όνομα της, είναι μια σχέση η οποία μετράει την συσχέτιση της μεταβλητής  $x$  στα δύο σημεία, και συγκεκριμένα παίρνει θετική τιμή αν η τιμές της ποσότητας  $x$  στα δύο σημεία διακυμαίνονται με τον ίδιο τρόπο, και αρνητική αν διακυμαίνονται αντίθετα.

# Συνάρτηση συσχετισμού

Η συνάρτηση συσχετισμού  $G_c^{(2)}(i, j)$  παίρνει τη μέγιστη τιμή της για  $i=j$  και στη συνέχεια πέφτει κατά απόλυτη τιμή.

$$G_c^{(2)}(i, j) \sim e^{-\frac{|x_{ij}|}{\xi}}$$

,όπου  $|x_{ij}|$  η απόσταση των σημείων  $i, j$ . Ενώ  $\xi$  είναι ένα χαρακτηριστικό μήκος για το σύστημα που δίνει ένα μέτρο σε πόση απόσταση υπάρχει ουσιαστικός συσχετισμός μεταξύ των τιμών της ποσότητας σε δύο πλεγματικές θέσεις και εξαρτάται από τις παραμέτρους που ορίζουν το σύστημα  $\xi = \xi(\beta, B, N, \dots)$ .

# Μήκος Συσχετισμού

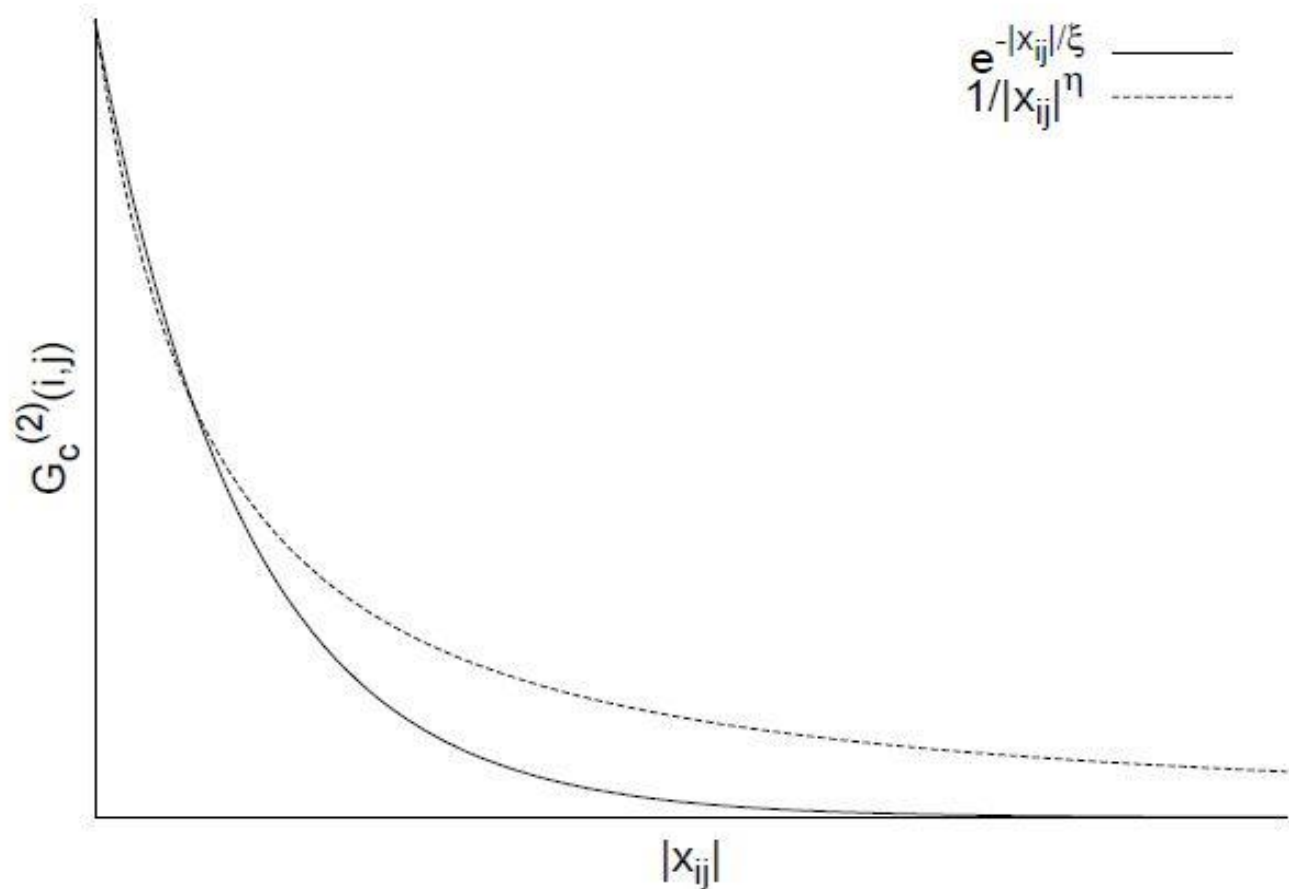
Το μήκος συσχετισμού ορίζει μια κλίμακα μήκους που προκύπτει δυναμικά και όχι από τον ορισμό του συστήματος όπως λ.χ. το μέγεθος  $L$  του συστήματος ή η απόσταση  $a$  μεταξύ δύο πλεγματικών σημείων (πλεγματική σταθερά). Συνήθως το  $\xi$  είναι της τάξης μεγέθους της πλεγματικής σταθεράς  $a$  και το σύστημα δεν παρουσιάζει συσχετισμούς σε μακροσκοπικές κλίμακες (δηλ. τη τάξης του  $L$ ).

# Μήκος Συσχετισμού

Πολύ ενδιαφέρουσα φυσική προκύπτει όταν ρυθμίσουμε με λεπτότητα τις παραμέτρους από τις οποίες εξαρτάται το  $\xi$  έτσι ώστε  $\xi \rightarrow \infty$  (στη πράξη  $\xi \approx L$ ). Αυτό γίνεται στην περιοχή μιας συνεχούς (όχι πρώτης τάξης) μετάβασης φάσης. Στην περίπτωση αυτή η εκθετική συμπεριφορά χάνεται και έχουμε πολύ βραδύτερη πτώση της  $G_c^{(2)}(i, j)$ , συνήθως

$$G_c^{(2)}(i, j) \sim \frac{1}{|x_{ij}|^\eta}$$

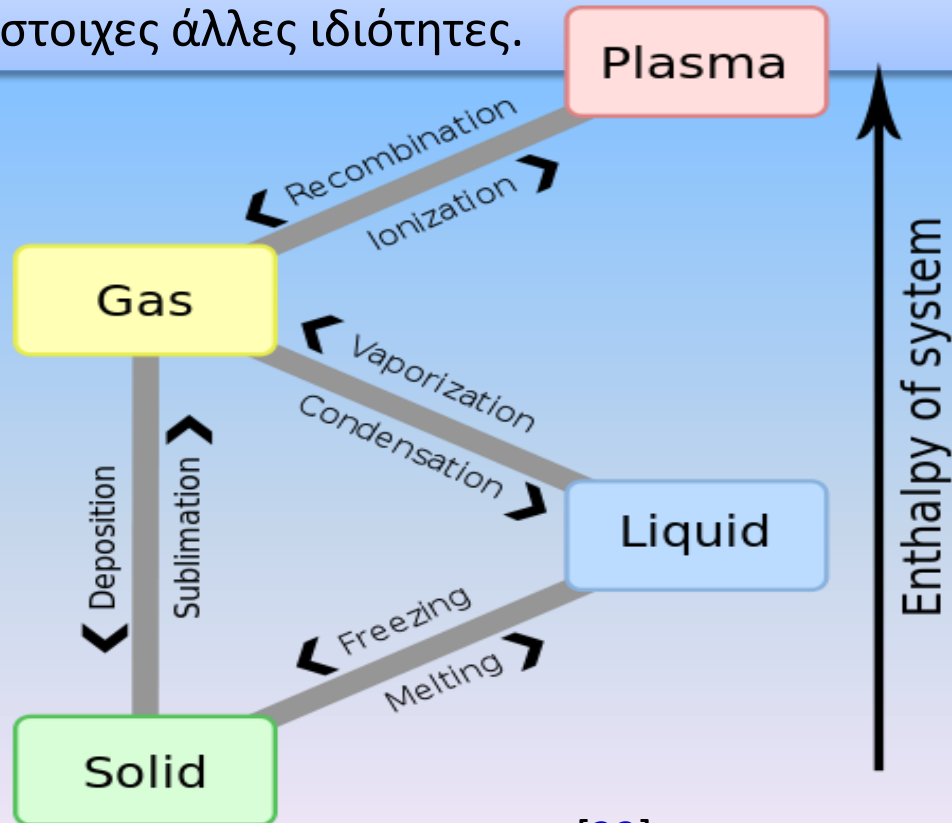
# Συνάρτηση Συσχετισμού



Η συνάρτηση συσχετισμού  $G_c^{(2)}(i,j)$  για  $\xi < \infty$  και  $\xi \rightarrow \infty$  [1].

# Μεταβάσεις Φάσης

Μετάβαση φάσης για ένα φυσικό σύστημα εννοούμε την αλλαγή του συστήματος από μία κατάσταση με συγκεκριμένες ιδιότητες σε μία άλλη με αντίστοιχες άλλες ιδιότητες.



[22]

# Μεταβάσεις Φάσης

Στο σύστημα που μελετάμε, μια μετάβαση φάσης θα πραγματοποιούνταν αν από ένα σιδηρομαγνητικό σύστημα με όλα τα spin ομόρροπα, πηγαίναμε σε ένα παραμαγνητικό σύστημα με τυχαίο προσανατολισμό των spin ή το αντίστροφο.

Έτσι ορίζουμε την παράμετρο τάξης/αταξίας την μαγνήτιση ανά spin.

Σιδηρομαγνητική Φάση



Μαγνήτιση/spin = 1

Παραμαγνητική Φάση



Μαγνήτιση/spin = 0

# Μεταβάσεις Φάσης

Η κύρια μεταβλητή που επηρεάζει τη συμπεριφορά του μοντέλου μας, είναι η θερμοκρασία.

Προσδίδοντας θερμότητα



Αύξηση της θερμοκρασίας



Δίνουμε αρκετή ενέργεια ώστε τα spins να μπορούν να μεταπηδήσουν από στάθμες μικρότερης ενέργειας (τα spin ομόρροπα με τα γειτονικά) σε στάθμες μεγαλύτερης ενέργειας με αποτέλεσμα να χαθεί η ομοιογένεια των spins και τελικά η μαγνήτιση του συστήματος.



# Μεταβάσεις Φάσης

Διακρίνουμε τις μεταβάσεις φάσης σε 2 κύριες κατηγορίες

1<sup>ης</sup> Τάξης Μετάβαση

Ιδιότητες

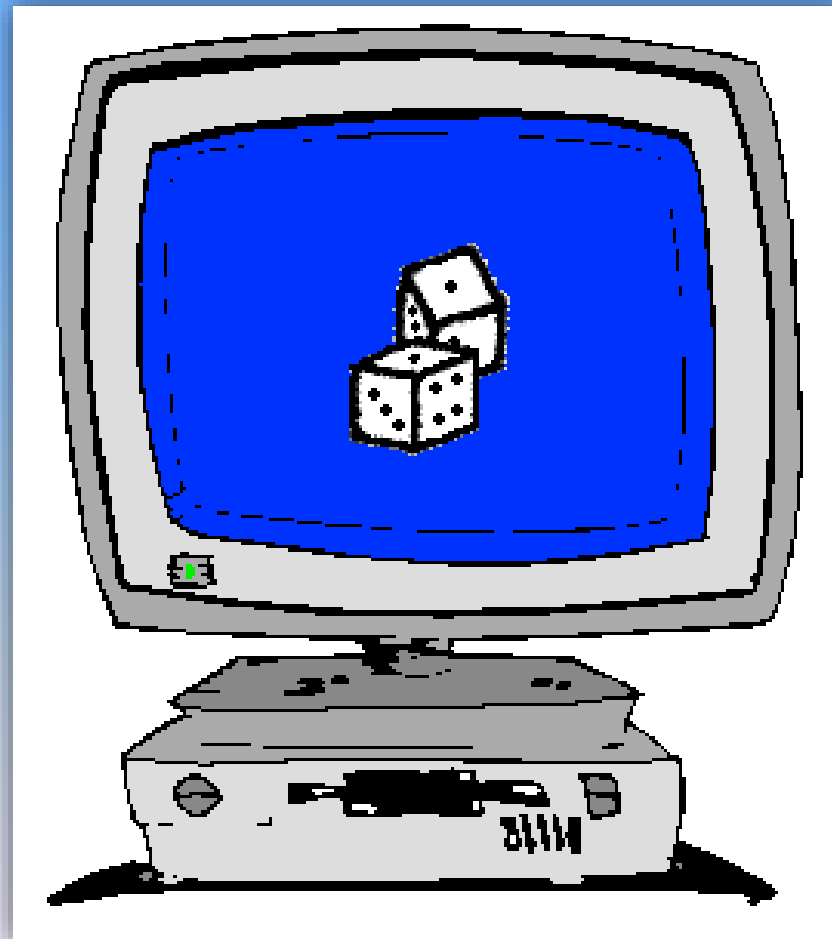
- Ασυνέχεια στην καμπύλη της μαγνήτισης
- Λανθάνουσα θερμότητα
- Συνύπαρξη φάσεων
- Υστέρηση μαγνήτισης

2<sup>ης</sup> Τάξης Μετάβαση - Συνεχής

Ιδιότητες

- Ομαλή καμπύλη μαγνήτισης
- Απειρισμός του μήκους συσχετισμού - Παγκοσμίοτητα
- Απειρισμός της μαγνητικής επιδεκτικότητας

# Προσομοιώσεις Monte Carlo



# Προσομοιώσεις Monte Carlo

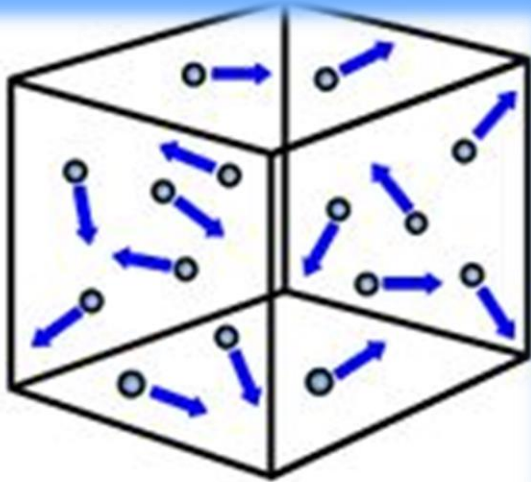
Η βασική ιδέα των προσομοιώσεων Monte Carlo, είναι η δημιουργία ενός συστήματος στο οποίο οι καταστάσεις του να αντιπροσωπεύουν και να προσομοιώνουν όσο καλύτερα και αποδοτικότερα γίνεται το πραγματικό σύστημα.

Στο θέμα μας λοιπόν, θα χρησιμοποιήσουμε τη μέθοδο Monte Carlo για να προσομοιώσουμε τις τυχαίες θερμικές διακυμάνσεις και ιδιότητες του συστήματος, καθώς περνά από μια κατάσταση σε άλλη λόγω της θερμικής ενέργειας (εσωτερικής ενέργειας) που παίρνει/χάνει και από την μέση τιμή αυτών των καταστάσεων να υπολογίσουμε την μέση τιμή της ποσότητας που μας ενδιαφέρει.

# Προσομοιώσεις Monte Carlo

Το δυσκολότερο κομμάτι των προσομοιώσεων Monte Carlo, είναι να κάνουμε το σύστημα να περνά από όλες τις πιθανές φάσεις γρήγορα, πράγμα το οποίο είναι τις περισσότερες φορές αδύνατο. Με διάφορες μεθόδους όμως όπως θα δούμε, μπορούμε να βγάλουμε τα συμπεράσματα-αποτελέσματα που μας ενδιαφέρουν με την χρήση δειγμάτων πολύ μικρότερων του συνολικού χώρου των καταστάσεων.

# Το παράδειγμα του δοχείου αέρα



Σε ένα δοχείο 1lt, γεμάτο με αέρα σε θερμοκρασία δωματίου και πίεσης μιας ατμόσφαιρας, υπάρχει ένας πληθυσμός της τάξης του  $10^{22}$  μορίων.

Οι τυπικές ταχύτητες των μορίων κυμαίνονται στην περιοχή των 100m/s , δίνοντας ένα μήκος κύματος de Broglie της τάξης του  $10^{-10}$ . Συνεπώς το κάθε μόριο έχει  $10^{27}$  διαφορετικές καταστάσεις στις οποίες μπορεί να βρεθεί.

Αν υπολογίσουμε για όλα τα μόρια αέρα του δοχείου μας, καταλήγουμε να έχουμε ένα υπερβολικά μεγάλο αριθμό πιθανών καταστάσεων στις οποίες μπορεί να βρεθεί το δείγμα μας (της τάξης του  $(10^{27})^{10^{22}}$ ). Υποθέτοντας έναν ρυθμό αλλαγής κατάστασης της τάξης του  $10^{31}$  αλλαγές το δευτερόλεπτο, λόγω κρούσης των μορίων μεταξύ τους ή με τα τοιχώματα, υπολογίζουμε ότι για να περάσει το σύστημα μας από όλες τις πιθανές καταστάσεις, θα χρειαστεί ένα χρόνο της τάξης  $10^{10^{23}}$  φορές της ηλικίας του σύμπαντος.

# Δειγματοληψία με κριτήριο σημαντικότητας (*Importance Sampling*)

Η μέθοδος που θα χρησιμοποιήσουμε είναι αντί να προσπαθούμε να περάσει το σύστημα μας (στην προσομοίωση), από όλες τις καταστάσεις (με ίση πιθανότητα), να επιλέγουμε τις καταστάσεις οι οποίες θα συνεισφέρουν σημαντικά στην μεταβολή της ως προς εξέτασης ποσότητας με πιθανότητες  $p_\mu$ . Αυτή η μέθοδος ονομάζεται **δειγματοληψία με κριτήριο σημαντικότητας (*Importance Sampling*)** και είναι ο τρόπος ο οποίος χρησιμοποιείται για προσομοιώσεις στατιστικών συστημάτων στην κανονική συλλογή. Την ίδια επιλογή κάνουν και τα περισσότερα πραγματικά συστήματα, δηλαδή οι καταστάσεις τους επιλέγονται σύμφωνα με την κατανομή Boltzmann (*αναλογικοί υπολογιστές*).

# Κριτήρια – Συνθήκες για την σωστή λειτουργία της μεθόδου.

□ Συνθήκη Εργοδικότητας

□ Συνθήκη λεπτομερούς ισοζύγησης  
(*detailed balance condition*)

# Συνθήκη Εργοδικότητας

Δηλαδή από οποιαδήποτε κατάσταση και αν ξεκινήσουμε, τότε μετά από ένα πεπερασμένο αριθμό βημάτων να καταλήξουμε σε κάθε άλλη δυνατή κατάσταση  $\nu$ , η αλλιώς κάθε κατάσταση  $\nu$  να είναι προσβάσιμη από οποιαδήποτε άλλη κατάσταση  $\mu$ .

Επίσης το κριτήριο της εργοδικότητας μας επιτρέπει να μηδενίσουμε όλες τις πιθανότητες μετάβασης της διαδικασίας Markov, αλλά πρέπει να υπάρχει τουλάχιστον ένας δρόμος για την μετάβαση από μια οποιαδήποτε κατάσταση  $\mu$  σε μια οποιαδήποτε άλλη κατάσταση  $\nu$ .



# Συνθήκη λεπτομερούς ισοζύγησης

Το δεύτερο κριτήριο που πρέπει να ικανοποιείται σε μια διαδικασία Markov είναι να βεβαιωνόμαστε ότι μετά από πεπερασμένο χρόνο θα φτάσουμε σε μια κατάσταση η οποία είναι η κατάσταση ισορροπίας και ότι φτιάξαμε μια κατανομή Boltzmann και όχι μια οποιαδήποτε κατανομή.

$$p_{\mu}P(\mu \rightarrow \nu) = p_{\nu}P(\nu \rightarrow \mu)$$

Για την κατανομή της κανονικής συλλογής όπως έχουμε η πει οι πιθανότητες είναι  $p_{\mu} = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_{\mu}}$  και άρα η συνθήκη λεπτομερούς ισοζύγησης γράφεται:

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

Συνοψίζοντας καταλήγουμε ότι σύμφωνα με τις σχέσεις

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

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

συν το κριτήριο της εργοδηκότητας οι καταστάσεις θερμικής ισορροπίας θα ακολουθούν την κατανομή Boltzmann.

# Πιθανότητα Μετάβασης

Παρατηρούμε ότι η τελευταία σχέση μας αφήνει αρκετές επιλογές για τις πιθανότητες μετάβασης, και το ποια θα επιλέξουμε εξαρτάται από την αποδοτικότητα τους σε ένα συγκεκριμένο πρόβλημα. Για ακόμη μεγαλύτερη αποδοτικότητα των πιθανοτήτων μετάβασης, τις σπάμε σε μέρη, έτσι ώστε:

$$P(\mu \rightarrow \nu) = g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu)$$

τα οποία αντιστοιχούν σε διακριτά βήματα στον αλγόριθμο.

# Πιθανότητα επιλογής

Η ποσότητα  $g(\mu \rightarrow \nu)$  ονομάζεται πιθανότητα επιλογής (*selection probability*), η οποία είναι η πιθανότητα η οποία μιας δεδομένης κατάστασης  $\mu$  θα παράγει μια νέα κατάσταση  $\nu$ . Το πρώτο βήμα δηλαδή είναι να επιλέξουμε μια κατάσταση  $\nu \neq \mu$  με πιθανότητα  $g(\mu \rightarrow \nu)$ .

# Λόγος αποδοχής

Η ποσότητα  $A(\mu \rightarrow \nu)$  ονομάζεται λόγος αποδοχής (ή πιθανότητα αποδοχής) και μας λέει αν θα αποδεχτούμε την αλλαγή κατάστασης  $\nu$  την οποία μας παράγει ο αλγόριθμος δεδομένου της αρχικής κατάστασης  $\mu$ , ή αν θα παραμείνουμε στην ίδια κατάσταση  $\mu$ . Το δεύτερο βήμα είναι λοιπόν να επιλέξουμε με πιθανότητα  $A(\mu \rightarrow \nu)$  αν το σύστημα μας θα μεταβεί στην κατάσταση  $\nu$ .

Είμαστε ελεύθεροι να επιλέξουμε του ρυθμούς αποδοχής μεταξύ των τιμών 0 έως 1, βέβαια η τιμή 0 δεν θα είναι καθόλου χρήσιμη, αφού το σύστημα μας θα παραμένει συνεχώς στην ίδια κατάσταση.

Η επιλογή αυτή για τους λόγους αποδοχής μας δίνει την δυνατότητα να επιλέξουμε ότι τιμή θέλουμε για τις πιθανότητες επιλογής  $g(\mu \rightarrow \nu)$ .

# Στόχος

Ο στόχος μας επικεντρώνεται ώστε να επιλέξουμε τις πιθανότερες επιλογές, που να δίνουν τους μέγιστους δυνατούς λόγους αποδοχής για καταστάσεις  $\nu$  ασυσχέτιστες κατά το μέγιστο δυνατόν από την κατάσταση  $\mu$ . Έτσι θα αποφύγουμε αλγόριθμους οι οποίοι παραμένουν για πολύ ώρα σε μια συγκεκριμένη κατάσταση κάνοντας τους μη αποδοτικούς.

Η ιδανική περίπτωση είναι ένας αλγόριθμος ο οποίος θα επιλέγει καταστάσεις με τις ακριβείς πιθανότερες επιλογές και οι λόγοι αποδοχής θα είναι πάντα μονάδες (1).

# Αλγόριθμος Metropolis

Ο αλγόριθμος Metropolis είναι ο πιο διάσημος και πολυχρησιμοποιημένος αλγόριθμος στις εφαρμογές με μεθόδους Monte Carlo, και αυτό γιατί είναι αρκετά απλός στην λειτουργία του και αξιόπιστος. Το συγκριτικό του μειονέκτημα σε σχέση με άλλους αλγόριθμους όπως ο Wolf, είναι ότι είναι σχετικά αργός σε μεγάλα συστήματα και με πολλούς βαθμούς ελευθερίας.

# Αλγόριθμος Metropolis

Στον αλγόριθμο *Metropolis*, οι πιθανότητες επιλογής  $g(\mu \rightarrow \nu)$ , για την κάθε πιθανή επιλογή μιας κατάσταση  $\nu$ , επιλέγεται να είναι με την ίδια πιθανότητα για όλες, ενώ για όλες τις άλλες καταστάσεις, οι πιθανότητες επιλογής ορίζονται ως μηδενικές.

$$g(\mu \rightarrow \nu) = \frac{1}{N}$$

Με αυτές τις πιθανότητες επιλογής, η συνθήκη λεπτομερούς ισοζύγησης παίρνει την μορφή:

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

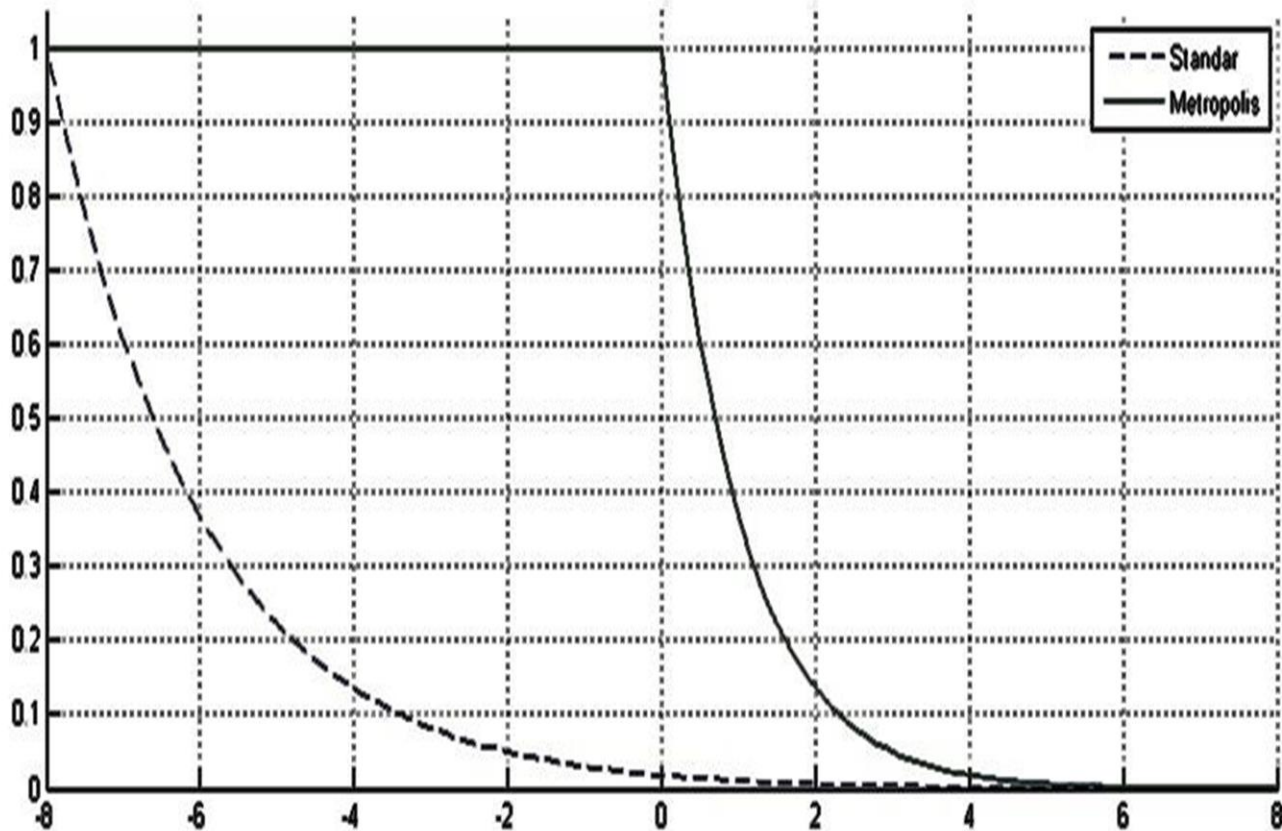


# Αλγόριθμος Metropolis

Σε αυτήν την μέθοδο λοιπόν θεωρούμε τον έναν από τους 2 λόγους αποδοχής της σχέσης, ίσον με την μονάδα (1) και προσαρμόζουμε τον άλλον ώστε να ικανοποιείται η σχέση. Για παράδειγμα αν θεωρήσουμε τις 2 καταστάσεις  $\mu$  και  $\nu$ , και η κατάσταση  $\mu$  έχει την μικρότερη ενέργεια από τις 2, δηλαδή  $E_\mu < E_\nu$ , τότε ο μεγαλύτερος λόγος αποδοχής είναι ο  $A(\nu \rightarrow \mu)$  και άρα τον θέτουμε ίσον με 1. Για να ικανοποιείται όμως και η σχέση θέτουμε τον λόγο αποδοχής  $A(\mu \rightarrow \nu) = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}$ . Συνοψίζοντας καταλήγουμε για τον βέλτιστο αλγόριθμο ότι οι λόγοι αποδοχής παίρνουν τις τιμές:

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} & \text{αν } E_\nu > E_\mu \\ 1 & \text{αλλιώς} \end{cases}$$

# Αλγόριθμος Metropolis



Η διαφορά της μεθόδου Metropolis σε σχέση με της απλής μεθόδου στους λόγους αποδοχής  $A$ . ( $\beta=1, J=1, z=4$ )

# Το μοντέλο $O(3)$ (Heisenberg Model)

Στην κλασική περιγραφή το μοντέλο προσομοιώνεται με την χρήση μοναδιαίου μέτρου διανυσμάτων των spins, με οποιαδήποτε διεύθυνση στο χώρο, δηλαδή

$$\vec{s}_i \in \mathbb{R}^3, |\vec{s}_i| = 1$$

τα οποία είναι τοποθετημένα στις κορυφές του πλέγματος.

# Το μοντέλο $O(3)$ (Heisenberg Model)

Η φυσική του μοντέλου Heisenberg εξαρτάται από το πρόσημο της σταθεράς σύζευξης  $J$  και την διάσταση του χώρου.

Για  $J$  θετικό, η θεμελιώδης κατάσταση (*ground state*) του συστήματος είναι πάντα σιδηρομαγνητική (*ferromagnetic*).

Για αρνητικές τιμές του  $J$  η θεμελιώδης κατάσταση είναι αντισιδηρομαγνητική (*anti-ferromagnetic*), για τις δύο και τρεις διαστάσεις.

Στη μία διάσταση ή στις 2 ( $d \leq 2$ ), δεν παρατηρούμε μεταβάσεις φάσης, έχουμε μόνο φάσεις αταξίας (*disordered phase*). Αντίθετα για διάσταση του πλέγματος μεγαλύτερη από 2 ( $d > 2$ ), παρατηρούμε και φάσεις τάξης αλλά και αταξίας.

Το μοντέλο αυτό παρουσιάζει καθολική συμμετρία (*global symmetry*) ως προς τις περιστροφές των spins.

# Το πρόγραμμα

Για την μελέτη του μοντέλου χρησιμοποιήσαμε κυρίως το πρόγραμμα του Δρ. Ιωάννη Αποστολάκη. [[15](#)]

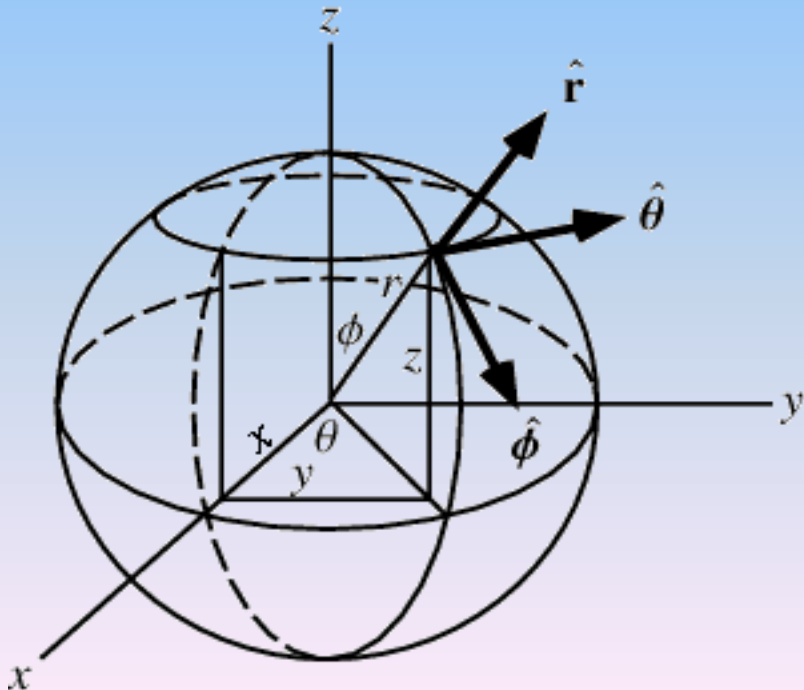
# Το πρόγραμμα

Αρχικά θα πρέπει να φτιάξουμε το σύστημα μας, ξεκινώντας από το πλέγμα μας και να του δώσουμε κάποιες χαρακτηριστικές ιδιότητες. Το σύστημα που χρησιμοποιούμε λοιπόν είναι ένα τετραγωνικό πλέγμα (2 διαστάσεων ΧΥ ανεξάρτητων μεταξύ τους) με περιοδικές συνοριακές συνθήκες.

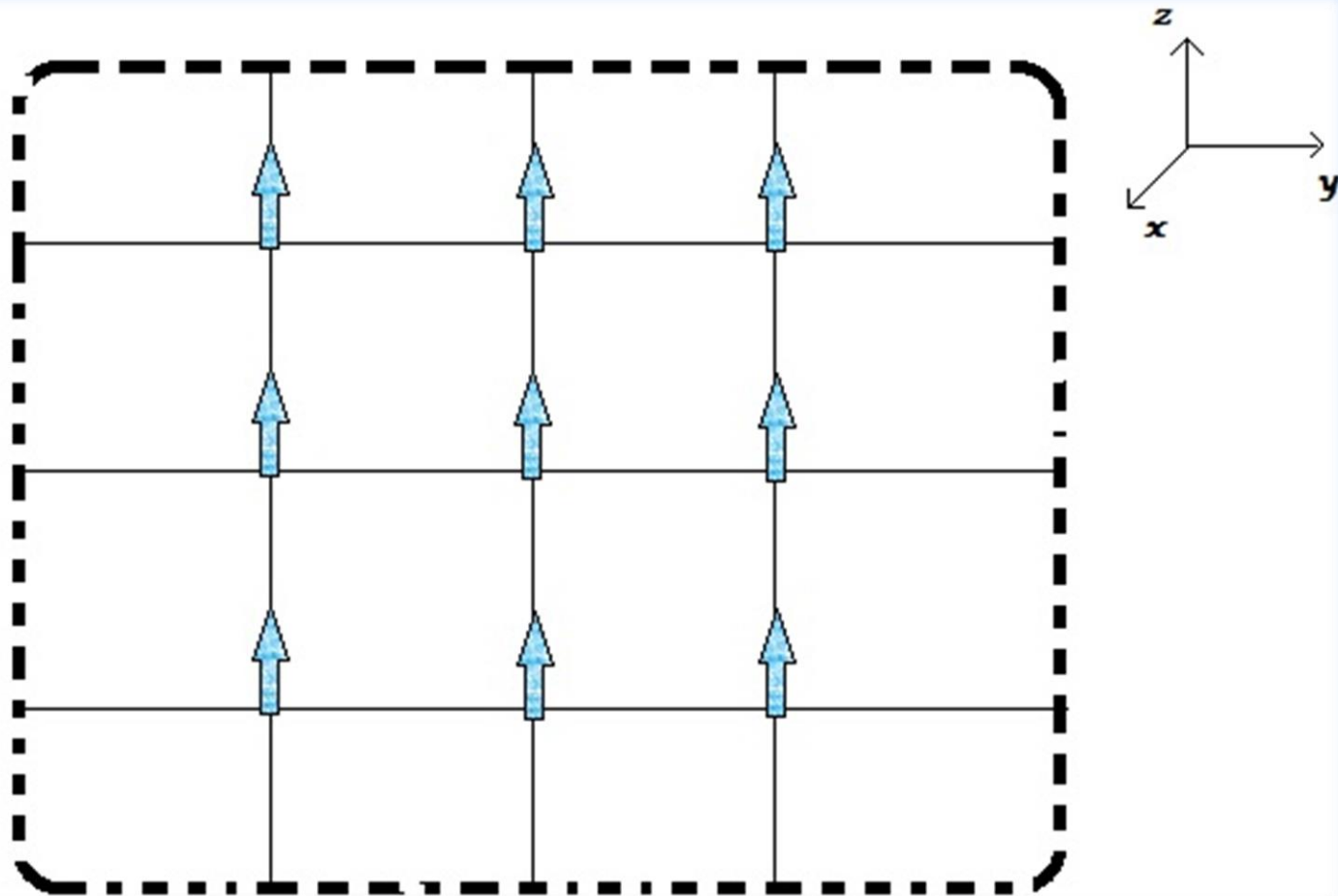
0	1	2	3	4	0	1	2	3	4	0	1	2	3	4
5	6	7	8	9	5	6	7	8	9	5	6	7	8	9
10	11	12	13	14	10	11	12	13	14	10	11	12	13	14
15	16	17	18	19	15	16	17	18	19	15	16	17	18	19
20	21	22	23	24	20	21	22	23	24	20	21	22	23	24
0	1	2	3	4	0	1	2	3	4	0	1	2	3	4
5	6	7	8	9	5	6	7	8	9	5	6	7	8	9
10	11	12	13	14	10	11	12	13	14	10	11	12	13	14
15	16	17	18	19	15	16	17	18	19	15	16	17	18	19
20	21	22	23	24	20	21	22	23	24	20	21	22	23	24
0	1	2	3	4	0	1	2	3	4	0	1	2	3	4
5	6	7	8	9	5	6	7	8	9	5	6	7	8	9
10	11	12	13	14	10	11	12	13	14	10	11	12	13	14
15	16	17	18	19	15	16	17	18	19	15	16	17	18	19
20	21	22	23	24	20	21	22	23	24	20	21	22	23	24

# Το πρόγραμμα

Στην συνέχεια θα πρέπει να θέσουμε σε κάθε πλεγματική θέση – κελί (του πίνακα) μια τιμή η οποία θα αντικατοπτρίζει την διεύθυνση του spin. Στη μελέτη του Heisenberg μοντέλου, θέτουμε σε κάθε spin 3 τιμές, οι οποίες αντικατοπτρίζουν την διεύθυνση των spins σε καρτεσιανές συντεταγμένες από τις σφαιρικές.



$$\begin{aligned}z &= r \cos(\varphi) \\x &= r \sin(\varphi) \cos(\theta) \\y &= r \sin(\varphi) \sin(\theta)\end{aligned}$$



Το μοντέλο Heisenberg σε ένα πλέγμα  $3 \times 3$ , σε κατάσταση πολύ μικρής θερμοκρασίας, στην περίπτωση της *cold start* αρχικής συνθήκης

Σε αυτήν την κατάσταση το σύστημα μας είναι ουσιαστικά σε μία από τις θεμελιώδεις ενέργειες του (ground states).



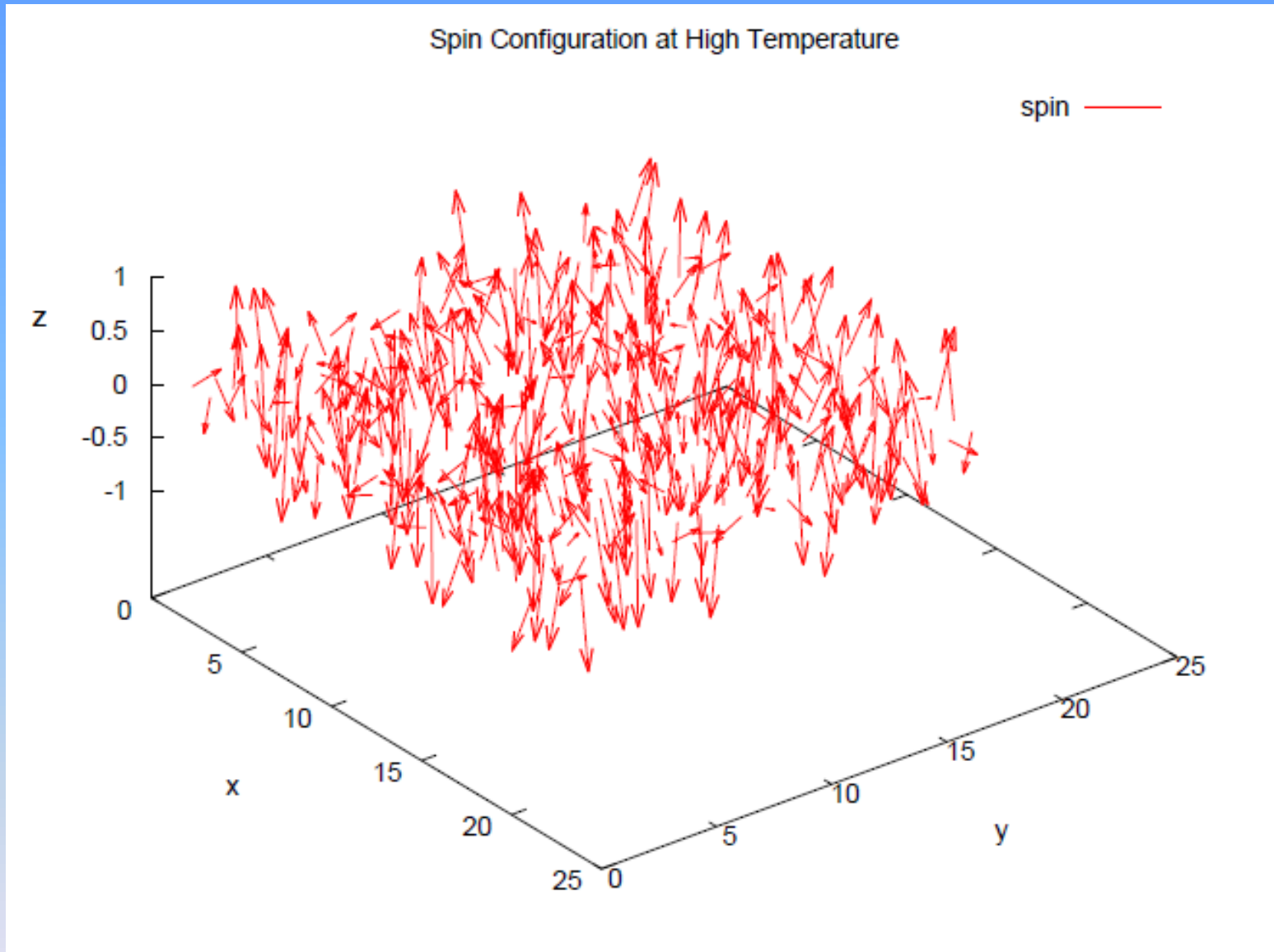
# Το πρόγραμμα

Η δεύτερη επιλογή μας είναι να αρχικοποιούμε το σύστημα μας σε μια εντελώς τυχαία διάταξη των spins, θερμή κατάσταση (*hot start*). Σε αυτήν την περίπτωση χρησιμοποιούμε τις γεννήτριες τυχαίων αριθμών, όπως η *ranmar()*, η οποίες παράγουν τυχαία αριθμούς στο διάστημα (0,1). Έτσι με έναν βρόγχο πάλι περνάμε από όλα τα spins και τους θέτουμε τυχαία τιμές στα διανύσματα της διεύθυνσης τους (z,x,y).

$$z = \cos(\pi \cdot \text{ranmar}())$$

$$x = \sin(\pi \cdot \text{ranmar}()) \cdot \cos(2\pi \cdot \text{ranmar}())$$

$$y = \sin(\pi \cdot \text{ranmar}()) \cdot \sin(2\pi \cdot \text{ranmar}())$$



Το μοντέλο Heisenberg σε ένα πλέγμα 20x20 σε συνθήκες μεγάλης θερμοκρασίας (*Hot start*).

# Το πρόγραμμα

Σημαντικός παράγοντας για την σωστή προσομοίωση του μοντέλου είναι η σωστή επιλογή του αλγόριθμου ο οποίος θα μας παράγει τους τυχαίους αριθμούς. Τα κριτήρια που διαφοροποιούν μία καλή γεννήτρια τυχαίων αριθμών από μια κακή είναι κυρίως:

A) Οι αριθμοί να είναι ομοιόμορφα κατανεμημένοι.

B) Να μην είναι συσχετισμένοι μεταξύ τους.

Γ) Να μην επαναλαμβάνονται μετά από μικρές περιόδους.

# Το πρόγραμμα

Η τρίτη μας επιλογή για την αρχική κατάσταση του συστήματος είναι να χρησιμοποιήσουμε μια ήδη υπάρχουσα κατάσταση που έχουμε φτιάξει με την μέθοδο Metropolis η οποία θα μας βόλευε για την συνέχιση της μελέτης μας, π.χ. μια διάταξη spins η οποία είναι κοντά στην θερμοκρασία που θέλουμε να μελετήσουμε έτσι ώστε να ελαχιστοποιήσουμε τον χρόνο που χρειάζεται για να βρεθεί το σύστημα στην κατάσταση ισορροπίας του για τη δεδομένη θερμοκρασία.

# Το πρόγραμμα

Το επόμενο βήμα της προσομοίωσης μας, αφού επιλέξαμε την αρχική κατάσταση του συστήματος μας, είναι με διαδοχικά βήματα να αλλάζουμε τις διευθύνσεις των spins έτσι ώστε να φθάσουμε στη καινούρια κατάσταση θερμικής ισορροπίας, για την θερμοκρασία που έχουμε επιλέξει.

Για να το επιτύχουμε αυτό χρησιμοποιούμε την μέθοδο Metropolis.

# Το πρόγραμμα

Η διαδικασία υλοποιείται με το αρχείο `update.c` και την μέθοδο `update()`, καθώς και την μέθοδο `newsite()` του αρχείου `newsite.c` και έχει ως έξης:

**A)** Για κάθε spin του πλέγματος υπολογίζουμε το άθροισμα των συνιστωσών  $(x,y,z)$  των γειτονικών spins (4 διευθύνσεις) και τα αποθηκεύουμε σε μια λίστα `sumspin[3]`.

**B)** Με την μέθοδο `newsite` υπολογίζουμε το γινόμενο  $oldprod = \vec{s}_i \cdot \vec{s}_n$ , όπου  $s_n$  είναι το άθροισμα των γειτονικών spins.

**Γ)** Φτιάχνουμε μια τυχαία καινούρια διεύθυνση για το spin.

**Δ)** Υπολογίζουμε το νέο γινόμενο  $newprod = \vec{s}_i \cdot \vec{s}_n$ .

**Ε)** Ελέγχουμε την συνθήκη  $dels = -beta * (newprod - oldprod)$ , και αν είναι αρνητική ή ισχύει  $\exp(-dels) > ranmar()$ , τότε αποδεχόμαστε την νέα διεύθυνση του spin.

# Το πρόγραμμα

Αφού φθάσουμε στην κατάσταση θερμικής ισορροπίας, είμαστε έτοιμοι για να μετρήσουμε τις ποσότητες που μας ενδιαφέρουν για την συγκεκριμένη θερμοκρασία, τέτοιες ποσότητες μπορεί να είναι η ενέργεια του συστήματος (συνολική ή κατά πλεγματική θέση), η μαγνήτιση, η ειδική θερμοχωρητικότητα κ.α

Ο υπολογισμός αυτών των ποσοτήτων όπως έχουμε ήδη αναφέρει γίνεται με το να βγάζουμε τον μέσο όρο πολλών μετρήσεων. Υπάρχουν όμως κάποια σημαντικά ερωτήματα τα οποία πρέπει να ξεκαθαρίσουμε πριν αρχίσουμε να μετράμε τις ποσότητες.

# Το πρόγραμμα

Τέτοια ερωτήματα είναι:

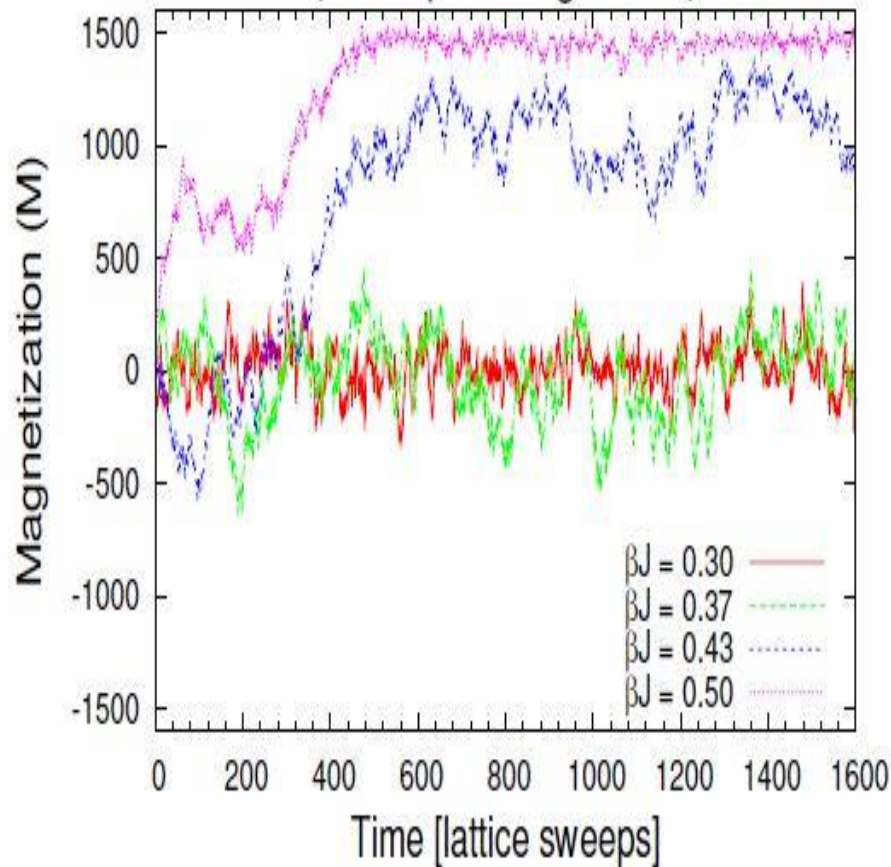
- Ποιος είναι ο χρόνος για να φθάσουμε στην κατάσταση θερμικής ισορροπίας,  $\tau_{eq}$ ;
- Πόσες είναι οι μετρήσεις τις οποίες πρέπει να κάνουμε ώστε να έχουμε ένα σχετικά καλό, ακριβή αποτέλεσμα για την ποσότητα που μας ενδιαφέρει;
- Πόσο ανεξάρτητες είναι οι μετρήσεις που παίρνουμε για να βγει το τελικό αποτέλεσμα;
- Ποιο είναι το σφάλμα των μετρήσεων και των αποτελεσμάτων;



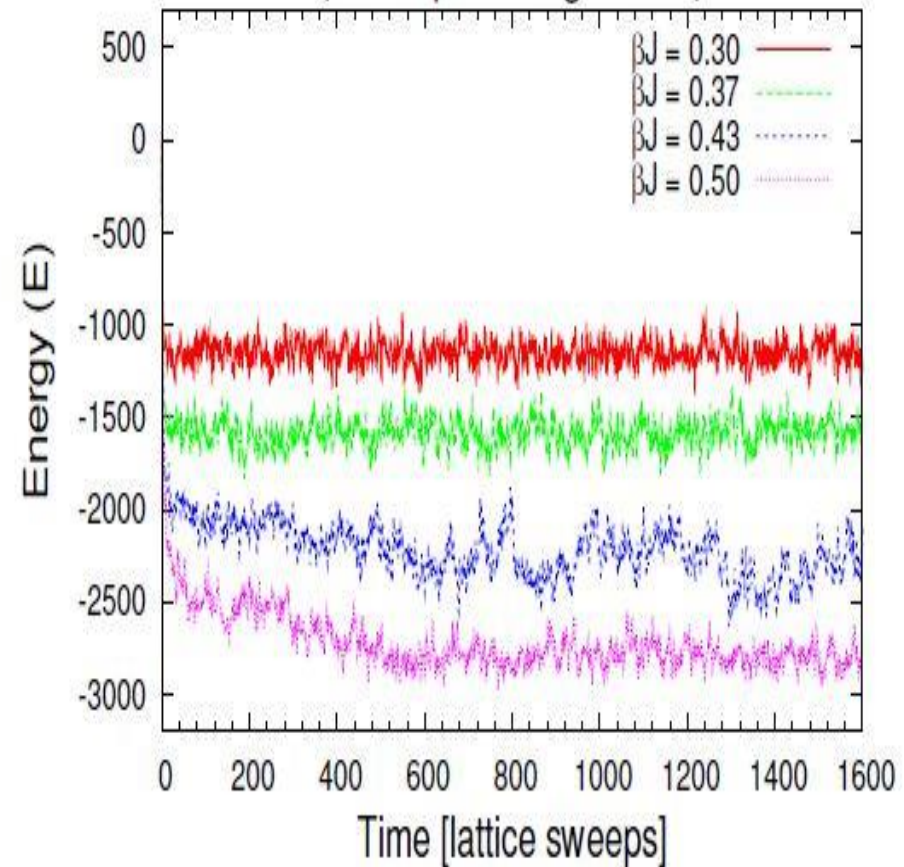
# Το πρόγραμμα

Στην κατάσταση θερμικής ισορροπίας το σύστημα μας περνά από καταστάσεις οι οποίες διαφέρουν πολύ λίγο όσο αφορά την ενέργεια τους, έτσι μια καλή λύση για να βρούμε τον χρόνο που χρειάζεται για να βρεθεί το σύστημα μας σε κατάσταση θερμικής ισορροπίας είναι να παρατηρήσουμε την ενέργεια (ή μια ποσότητα) του συστήματος μας σε σχέση με τα sweeps (χρόνο). Όταν παρατηρήσουμε μικρές διαφορές ανάμεσα στα sweeps, και η ποσότητα φαίνεται να σταθεροποιείται σε μια τιμή, τότε έχουμε μια καλή ένδειξη ότι το σύστημα βρίσκεται σε κατάσταση θερμικής ισορροπίας.

### Thermalization of Magnetization (Metropolis Algorithm)



### Thermalization of Energy (Metropolis Algorithm)



Διαγράμματα της μαγνήτισης και της ενέργειας σε σχέση με τον χρόνο για διαφορετικές θερμοκρασίες στο μοντέλο Ising (40x40). Παρατηρούμε ότι στο διάγραμμα της μαγνήτισης φαίνεται καλύτερα ο χρόνος που χρειάζεται για να φθάσει το σύστημα μας σε κατάσταση θερμικής ισορροπίας.[\[1\]](#)

# Το πρόγραμμα

Καθώς στον αλγόριθμο Metropolis το επόμενο βήμα διαφέρει από το προηγούμενο κατά πολύ λίγο, η επόμενη διάταξη των spins είναι πολύ ισχυρά συσχετισμένη με την προηγούμενη. Η απάντηση δίνεται με τον χρόνο αυτοσυσχετισμού, καθώς μας δίνει μία τάξη μεγέθους ώστε οι μετρήσεις μας να είναι ανεξάρτητες και να μην επηρεάζονται από το προηγούμενο sweep. Χρησιμοποιούμε δύο μεθόδους για τον υπολογισμό του χρόνου αυτοσυσχετισμού.

A) Συνάρτηση Αυτοσυσχετισμού (*autocorrelation function*)  $\rho_0(t)$

B) Ολοκληρωμένο Χρόνο Αυτοσυσχετισμού (*integrated autocorrelation time*)  $\tau_{int,0}$

# Το πρόγραμμα

Τέλος , σημαντική πληροφορία για τις μετρήσεις που λαμβάνουμε από μια προσομοίωση Monte Carlo, είναι η γνώση "του σφάλματος" της μέτρησης. Υπάρχουν 2 είδη σφαλμάτων, τα στατιστικά και τα συστηματικά σφάλματα.

# Το πρόγραμμα

Τα **συστηματικά σφάλματα** οφείλονται σε κακή λειτουργία των μεθόδων που χρησιμοποιούμε, όπως για παράδειγμα μια κακή γεννήτρια τυχαίων αριθμών. Συστηματικό σφάλμα θεωρείτε επίσης και το ότι δεν περιμένουμε απεριόριστο χρόνο για να βρεθεί το σύστημα μας σε κατάσταση θερμικής ισορροπίας ή το πεπερασμένο μέγεθος του πλέγματος για την προσομοίωση συνεχών μοντέλων.

# Το πρόγραμμα

Η αρχή του **στατιστικού σφάλματος** βρίσκεται στις θερμικές διακυμάνσεις γύρω από τη μέση τιμή και έχουν συνήθως κατά πολύ καλή προσέγγιση Gaussian κατανομή.

Χαρακτηριστικό των στατιστικών σφαλμάτων είναι ότι εξαλείφονται αυξάνοντας τον αριθμό των μετρήσεων.

$$(\delta O)^2 = \frac{1 + 2\tau}{n - 1} (\langle O^2 \rangle - \langle O \rangle^2)$$

, όπου  $\tau$  ο χρόνος αυτοσυσχετισμού και  $n$  ο αριθμός των μετρήσεων.

# Το πρόγραμμα

Στις περιπτώσεις όμως της μαγνητικής επιδεκτικότητας και της ειδικής θερμοχωρητικότητας, δεν μπορούμε να πάρουμε το παραπάνω τύπο, λόγω του ότι τα μεγέθη  $\delta\langle m \rangle$  και  $\delta\langle m^2 \rangle$  ή  $\delta\langle e \rangle$  και  $\delta\langle e^2 \rangle$  είναι συσχετισμένα μεταξύ τους και ο τύπος της διάδοσης των σφαλμάτων δεν ισχύει.

Καταφεύγουμε λοιπόν σε 3 βασικούς μέθόδους υπολογισμού σφαλμάτων για να υπολογίσουμε τα σφάλματα των παραπάνω ποσοτήτων. Αναφορικά είναι οι:

α) *Blocking ή Binning Method*

β) *Bootstrap Method*

γ) *Jackknife Method*

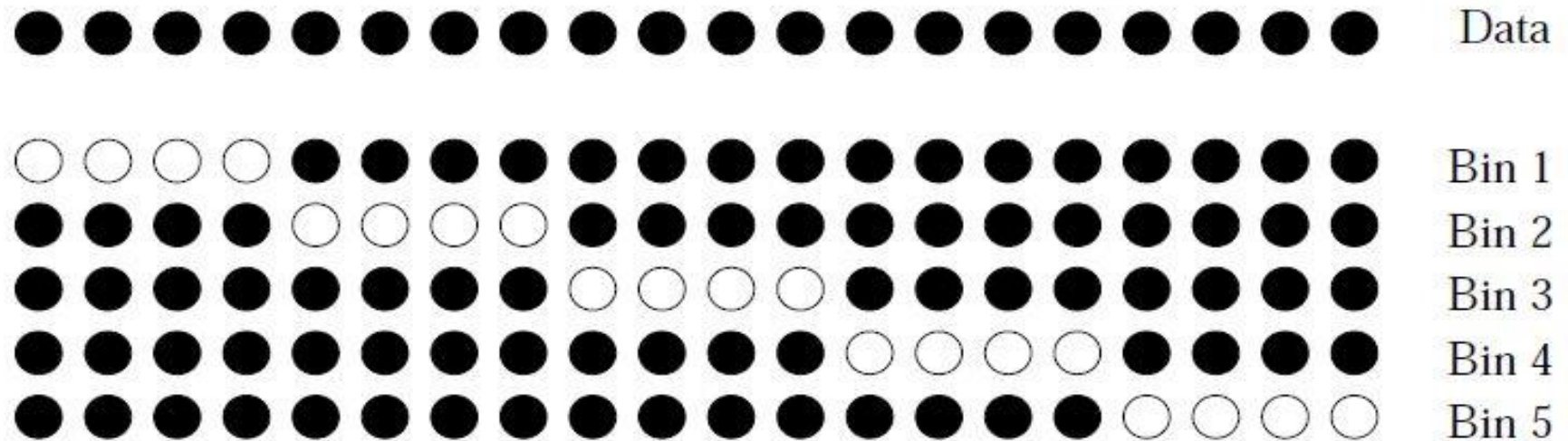
# Το πρόγραμμα

Στην εργασία, χρησιμοποιούμε την μέθοδο *Jackknife*, ή οποία είναι η πιο διαδεδομένη σε αυτού του είδους εφαρμογές. Σε αυτήν την μέθοδο, χωρίζουμε τα δεδομένα μας σε  $n_b$  bins τα οποία περιέχουν από  $b = n - (n/n_b)$  στοιχεία ως εξής: Το *bin*  $j$  προκύπτει από τα αρχικά δεδομένα  $O_0, \dots, O_{n-1}$  αν διαγράψουμε τα περιεχόμενα του  $j$  καλάθιού της μεθόδου binning. Σε κάθε bin υπολογίζουμε τη μέση τιμή της  $O$ . Προκύπτουν τότε οι μέσες τιμές  $O_0^b, O_1^b, \dots, O_{n_b-1}^b$ . Τότε το σφάλμα της μέτρησης υπολογίζεται από τη σχέση:

$$(\delta O)^2 = \sum_{j=0}^{n_b-1} (O_j^b - \langle O^b \rangle)^2 = n_b \left( \langle (O^b)^2 \rangle - \langle O^b \rangle^2 \right)$$



# Το πρόγραμμα



Η μέθοδος Jackknife για ένα δείγμα από  $n=20$  μετρήσεις. Χωρίζουμε τα δεδομένα σε  $n_b = 5$  bins το οποίο το καθένα έχει  $b = n - \left(\frac{n}{n_b}\right) = 20 - 4 = 16$  μετρήσεις. Σε κάθε δείγμα υπολογίζουμε την μέση τιμή  $O_j^b$  και από αυτές το σφάλμα  $\delta O = \sqrt{n_b(\langle(O^b)^2\rangle - \langle O^b \rangle^2)}$ . [1]

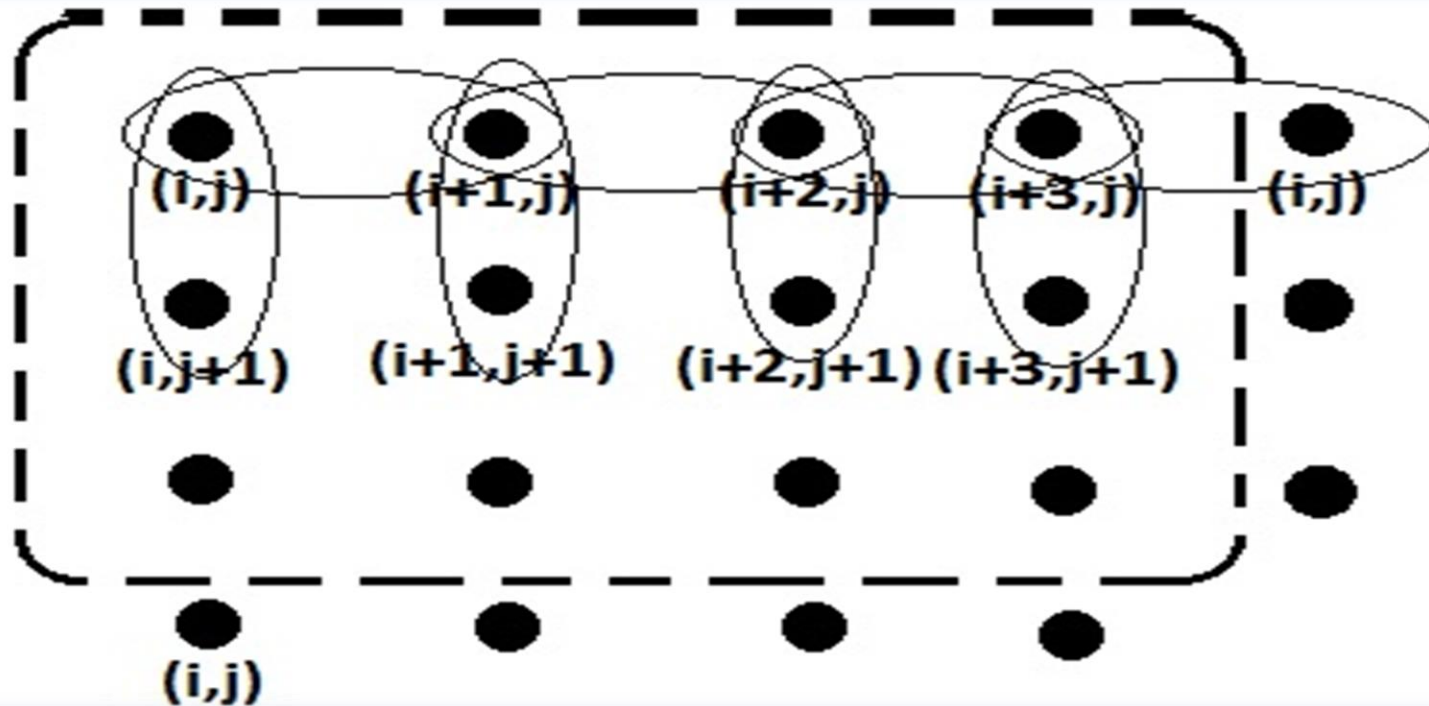
# Το πρόγραμμα

Ο υπολογισμός της ενέργειας του μοντέλου μας, υλοποιείται με την μέθοδο energy().

Η διαδικασία που ακολουθεί η μέθοδος είναι να περνάει από όλες τις πλεγματικές θέσεις να υπολογίζεται το γινόμενο  $\vec{s}_i \cdot \vec{s}_n$ , όπου  $\vec{s}_i$  είναι το spin στο σημείο του πλέγματος που είμαστε και  $\vec{s}_n$  είναι το spin της γειτονικής πλεγματικής θέσης, και στη συνέχεια να αθροίζονται όλα τα γινόμενα σύμφωνα με την σχέση

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j$$

# Το πρόγραμμα



Σχηματική αναπαράσταση του τρόπου υπολογισμού των γινομένων  $\vec{s}_i \cdot \vec{s}_n$ . Προσοχή θέλει στα όρια του πλέγματος. Χρησιμοποιούμε περιοδικές συνοριακές συνθήκες.

# Το πρόγραμμα

Με την μέθοδο `measure()`, υπολογίζουμε την ολική μαγνήτιση στις 3 διευθύνσεις του πλέγματος και τυπώνουμε την ολική μαγνήτιση ανά πλεγματική θέση στο αρχείο που έχουμε ορίσει ως “Spinsquare distribution”. Η διαδικασία έχει ως εξής:

Περνάμε από όλες τις πλεγματικές θέσεις και αποθηκεύουμε τις συνιστώσες των spins σε 3 πίνακες αντίστοιχα με τις διευθύνσεις x, y και z. Η ολική μαγνήτιση ανά πλεγματική θέση υπολογίζεται από την σχέση  $S_{tot} = (s_x^2 + s_y^2 + s_z^2)/sites$ . Το πρόγραμμα με μια μικρή τροποποίηση μπορεί να μας τυπώσει και τις συνισταμένες της μαγνήτισης ανά πλεγματική θέση.

Τέλος σημειώνουμε ότι μετράμε την απόλυτη τιμή της μαγνήτισης στις μικρές θερμοκρασίες και αυτό γιατί λόγω του πεπερασμένου μεγέθους του συστήματος μας, είναι πιθανό η φορά των spins να αλλάζει συχνά πρόσημο οδηγώντας μας έτσι σε μια μηδενική μέση τιμή της μαγνήτισης ακόμα και σε χαμηλές θερμοκρασίες, κάτι το οποίο δεν θα συνέβαινε στο θερμοδυναμικό όριο (πραγματικό σύστημα).

# Το πρόγραμμα

Ο υπολογισμός άλλων ποσοτήτων γίνεται με την βοήθεια των διακυμάνσεων της ενέργειας και της μαγνήτισης του συστήματος.

Έτσι από τις σχέσεις

$$C = k\beta^2 \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} = k\beta^2 (\Delta E)^2$$

$$\chi = \frac{1}{N} \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial B} = \frac{\beta}{N} (\langle (M - \langle M \rangle)^2 \rangle) = \frac{\beta}{N} (\Delta M)^2$$

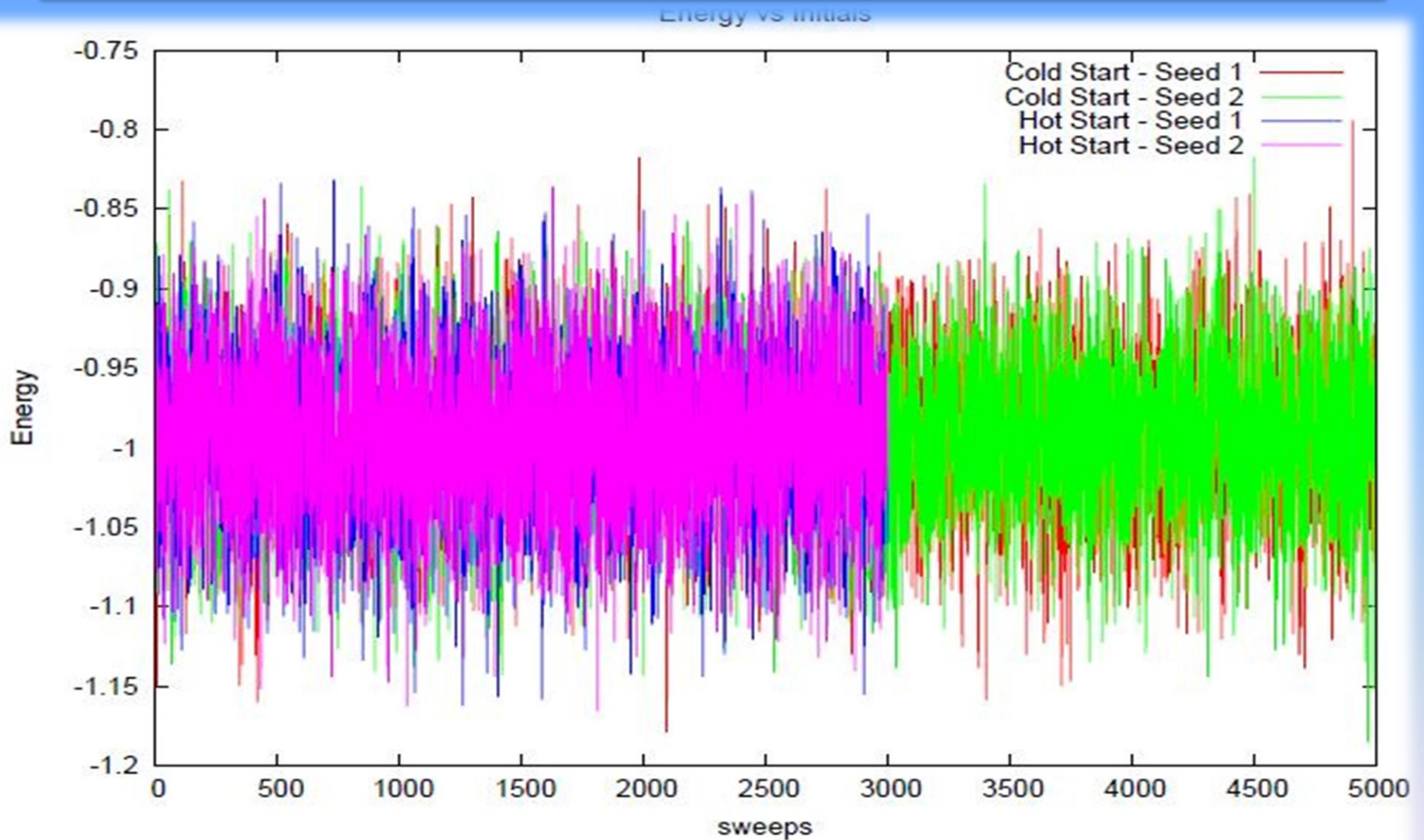
υπολογίσουμε την ειδική θερμότητα και τη μαγνητική επιδεκτικότητα του μοντέλου μας.

# Επεξεργασία Μετρήσεων

Ξεκινάμε ελέγχοντας την συμπεριφορά του μοντέλου μας σε σχέση με τις αρχικές συνθήκες και παρατηρούμε για την εμφάνιση *thermalization time*.

Έτσι για σταθερή θερμοκρασία, μεταβάλλουμε την αρχική κατάσταση του συστήματος (hot start / cold start) όπως επίσης και τα αρχικά seeds.

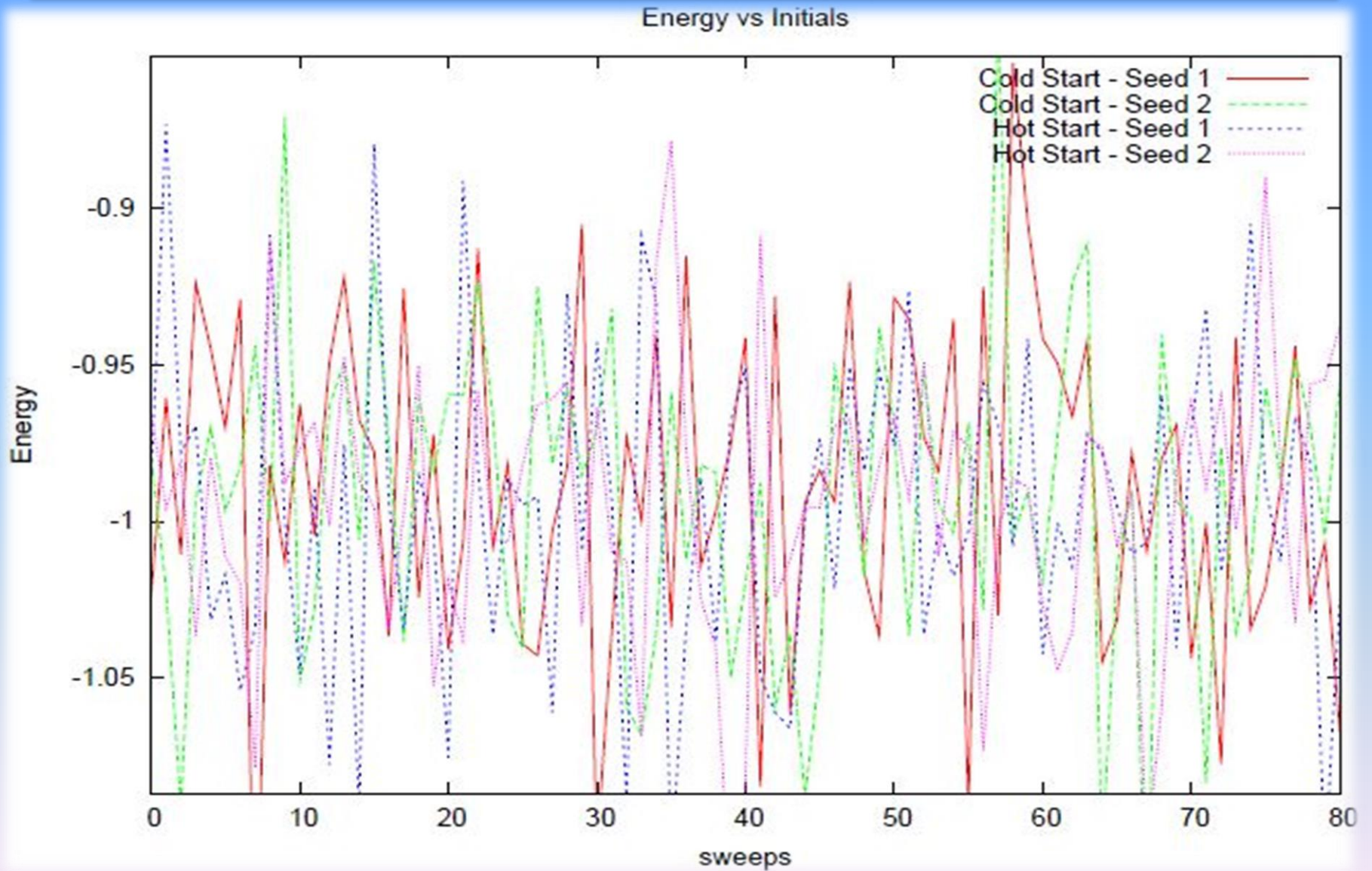
# Thermalization Time



Η ενέργεια του συστήματος προσομοιώνεται για  $L=20$ ,  $\beta=1.25$

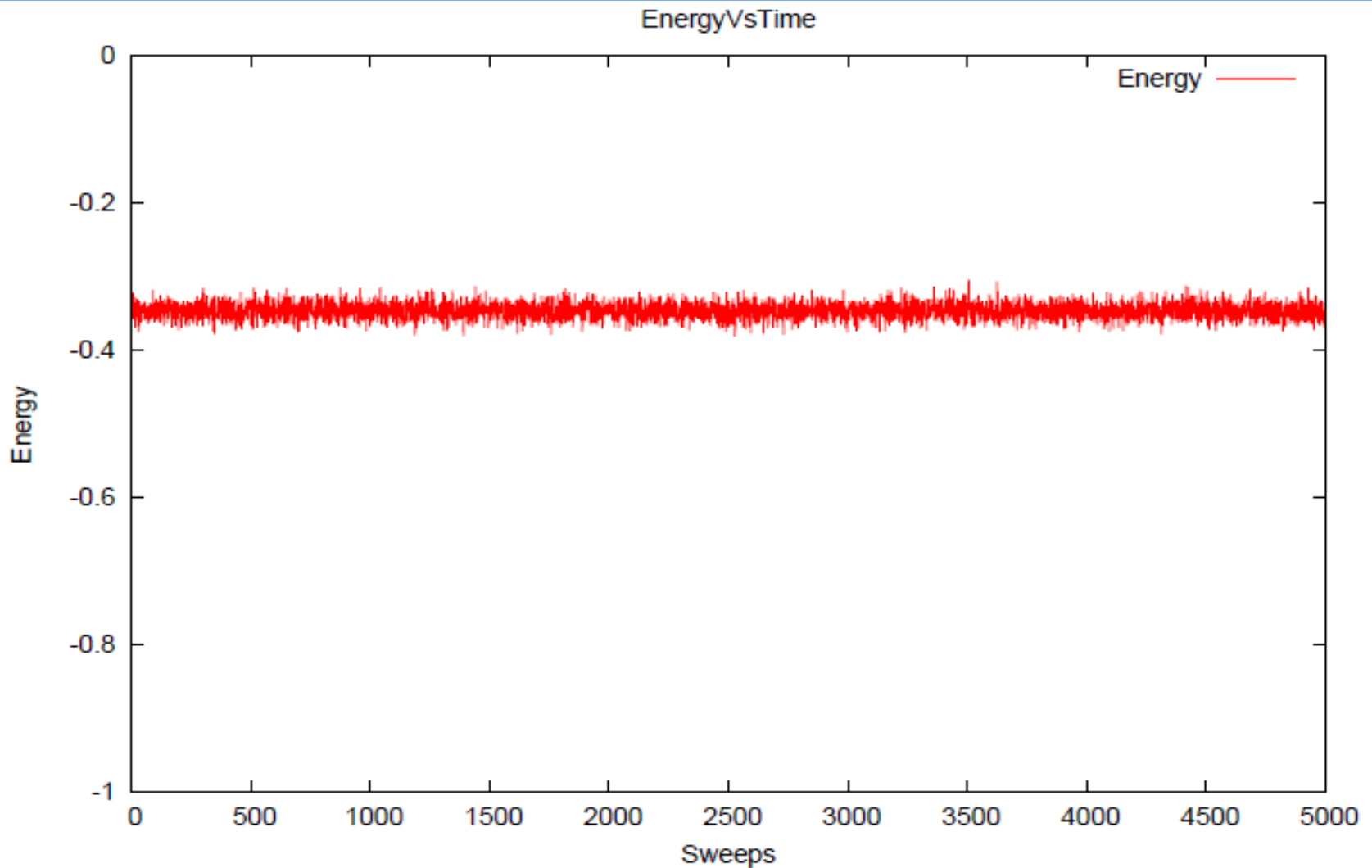


# Thermalization Time





# Thermalization Time



Η εξάρτηση της ενέργειας σε σχέση με τα sweeps, για το μοντέλο Heisenberg μεγέθους 80x80, για θερμοκρασία  $\beta=0.5$ .

# Thermalization Time

Παρατηρούμε ότι οι αρχικές συνθήκες δεν επηρεάζουν καθόλου το αποτέλεσμα της ενέργειας όπως και τον χρόνο για να βρεθεί το σύστημα σε θερμική ισορροπία.

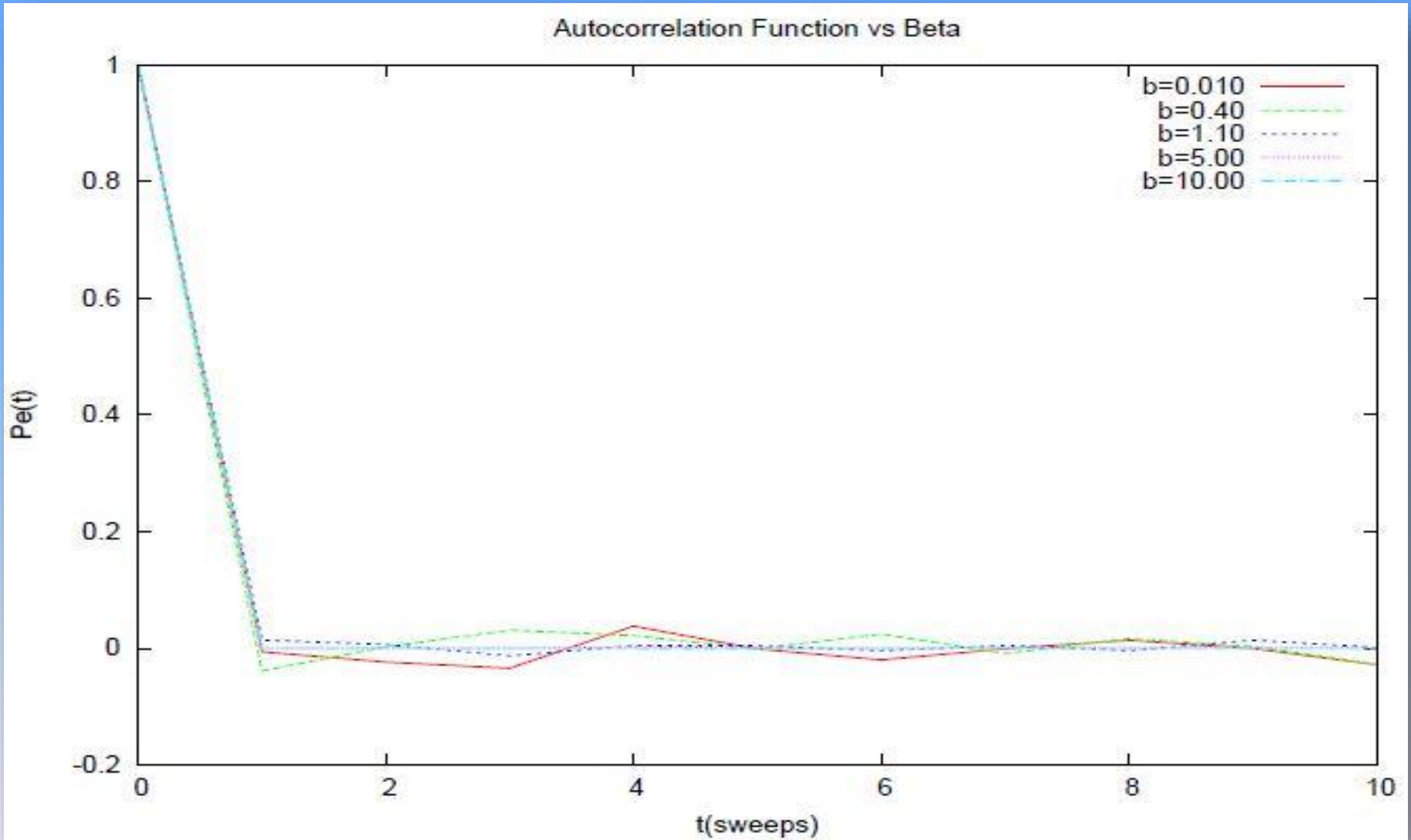
Στο τελευταίο γράφημα, έχουμε τρέξει το πρόγραμμα για αρκετά μεγάλο αριθμό sweeps (5000), έτσι ώστε να βεβαιωθούμε ότι το σύστημα δεν βρίσκεται σε μια ψευδή κατάσταση ισορροπίας από την οποία θα βγει μετά από αρκετά βήματα.

# Χρόνος αυτοσυσχετισμού

Ελέγχουμε τον χρόνο αυτοσυσχετισμου για το μοντέλο μας, σε σχέση με την θερμοκρασία και το μέγεθος του πλέγματος.

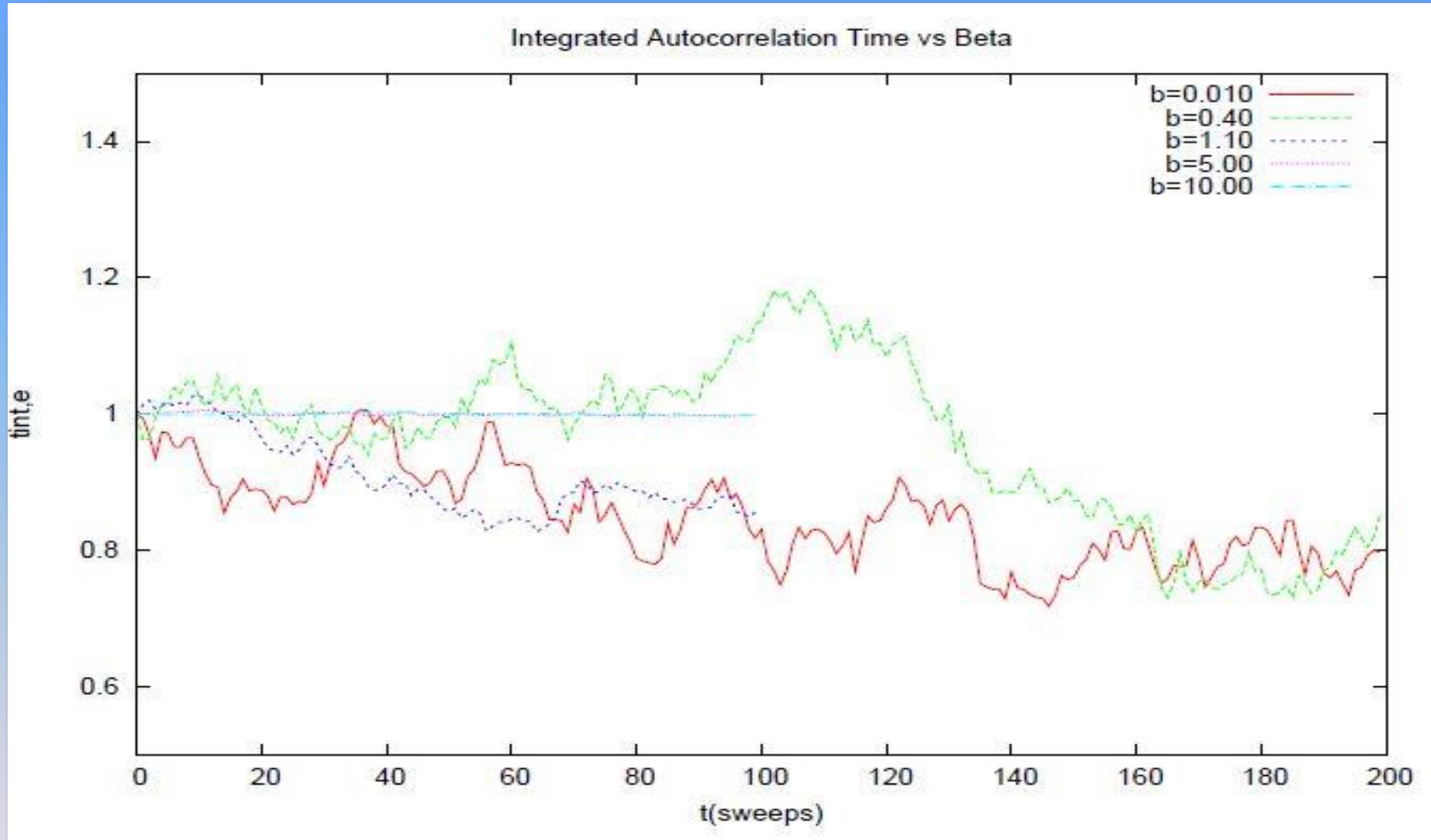
Έτσι φτιάχνουμε τα παρακάτω γραφήματα της συνάρτησης αυτοσυσχετισμού (*autocorrelation function*)  $\rho_0(t)$  και του ολοκληρωμένου χρόνου αυτοσυσχετισμού (*integrated autocorrelation time*)  $\tau_{int,0}$

# Χρόνος αυτοσυσχετισμού



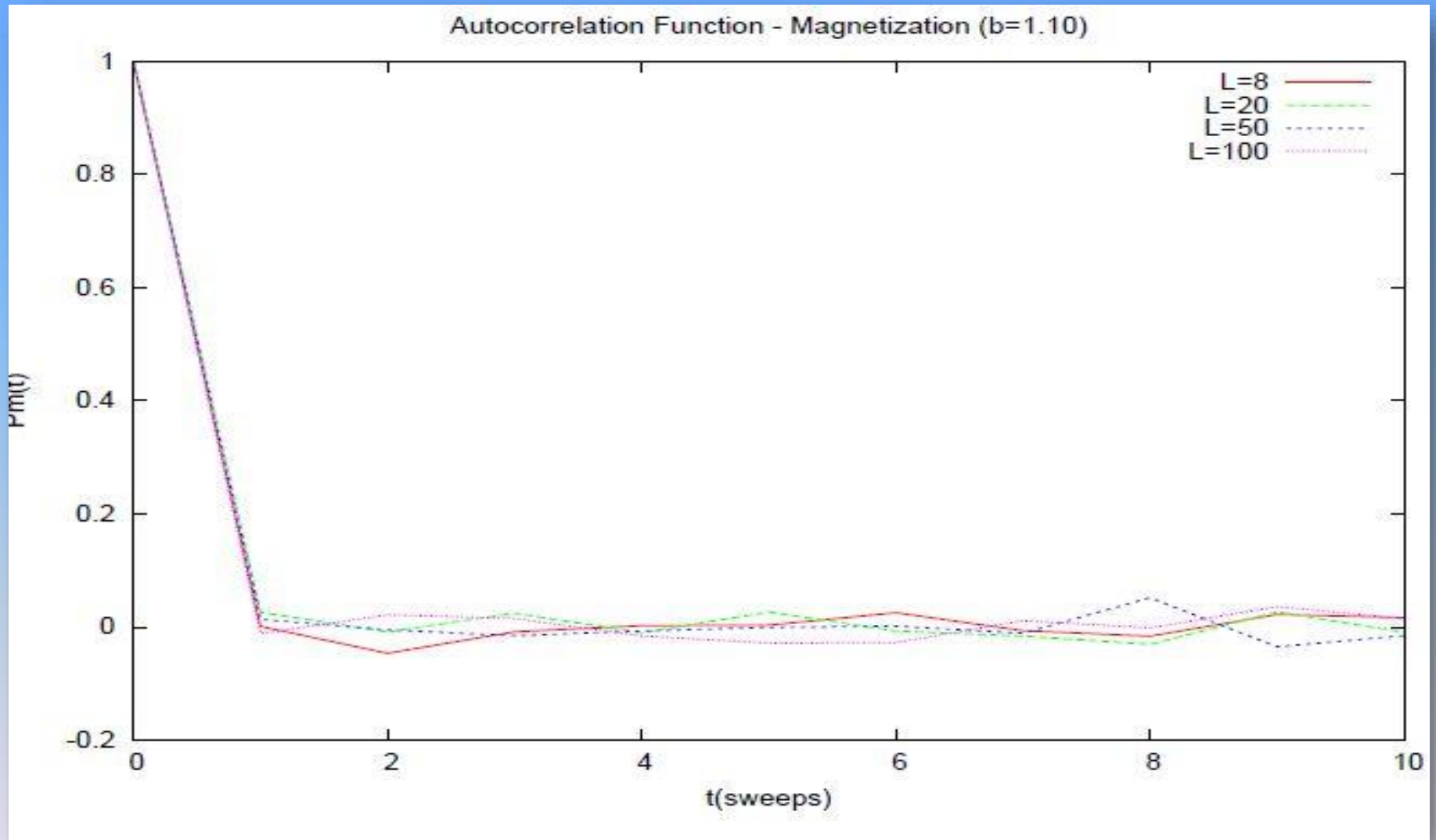
Η συνάρτηση αυτοσυσχετισμού της ενέργειας για διάφορες θερμοκρασίες, με τον αλγόριθμο *Metropolis*.

# Χρόνος αυτοσυσχετισμού



Ο ολοκληρωμένος χρόνος αυτοσυσχετισμού του συστήματος για διάφορες θερμοκρασίες, με τον αλγόριθμο *Metropolis*.

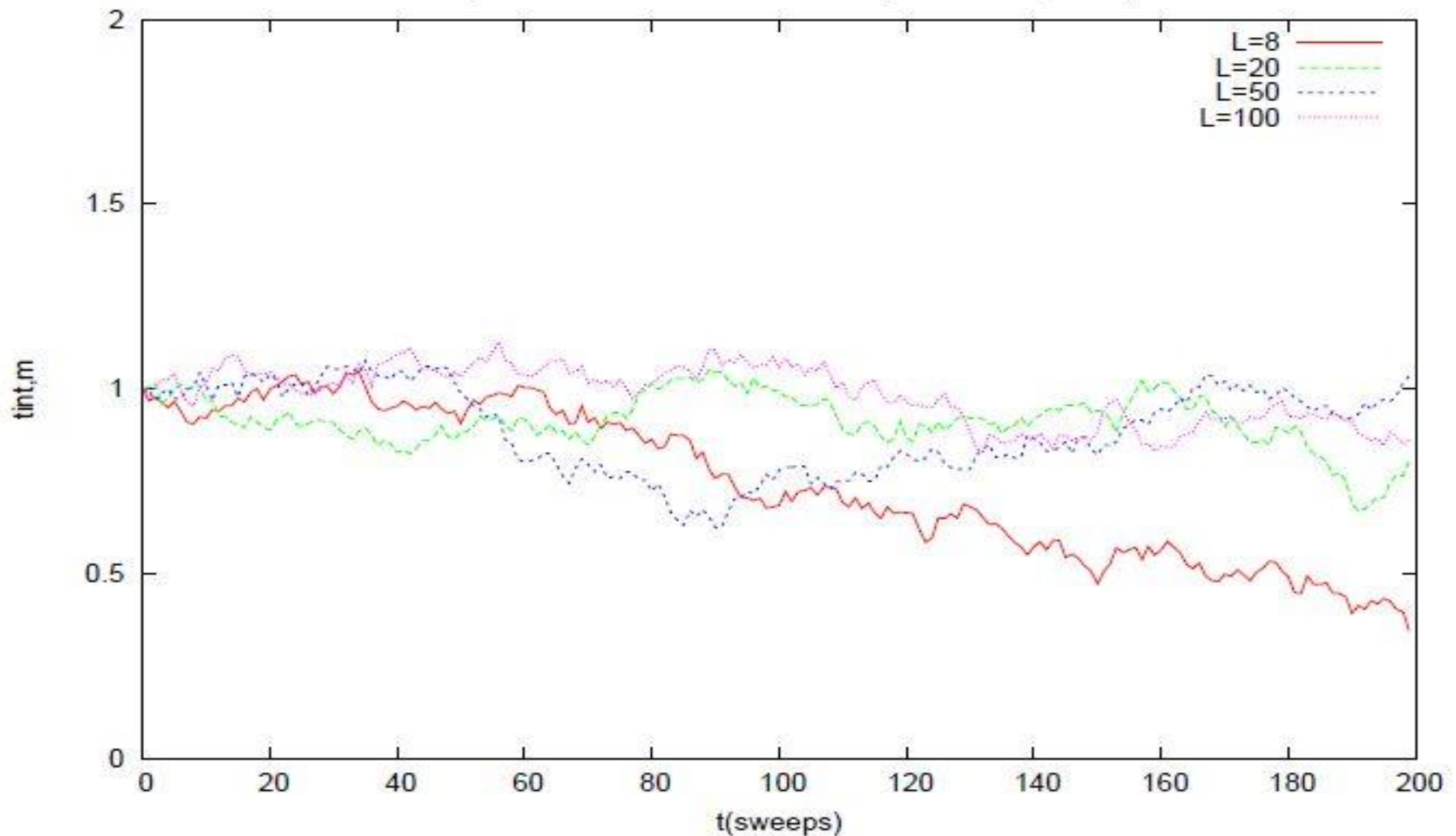
# Χρόνος αυτοσυσχετισμού



Η εξάρτηση της συνάρτησης συσχετισμού από το μέγεθος του πλέγματος με τον αλγόριθμο *Metropolis*.

# Χρόνος αυτοσυσχετισμού

Integrated Autocorrelation Time -Magnetization ( $b=0.40$ )



Η εξάρτηση του ολοκληρωμένου χρόνου αυτοσυσχετισμού από το μέγεθος του πλέγματος με τον αλγόριθμο *Metropolis*.

# Χρόνος Αυτοσυσχετισμού

Και οι δύο μέθοδοι δίνουν για το σύστημα μας, έναν χρόνο αυτοσυσχετισμού ο οποίος δεν υπερβαίνει το 1 sweep.

Σημειώνουμε ότι μεγάλους χρόνους αυτοσυσχετισμού παρατηρούμε σε θερμοκρασίες όπου έχουμε μετάβαση φάσης, και το μήκος συσχετισμού  $\xi$  γίνεται πολύ μεγαλύτερο από μια πλεγματική θέση.



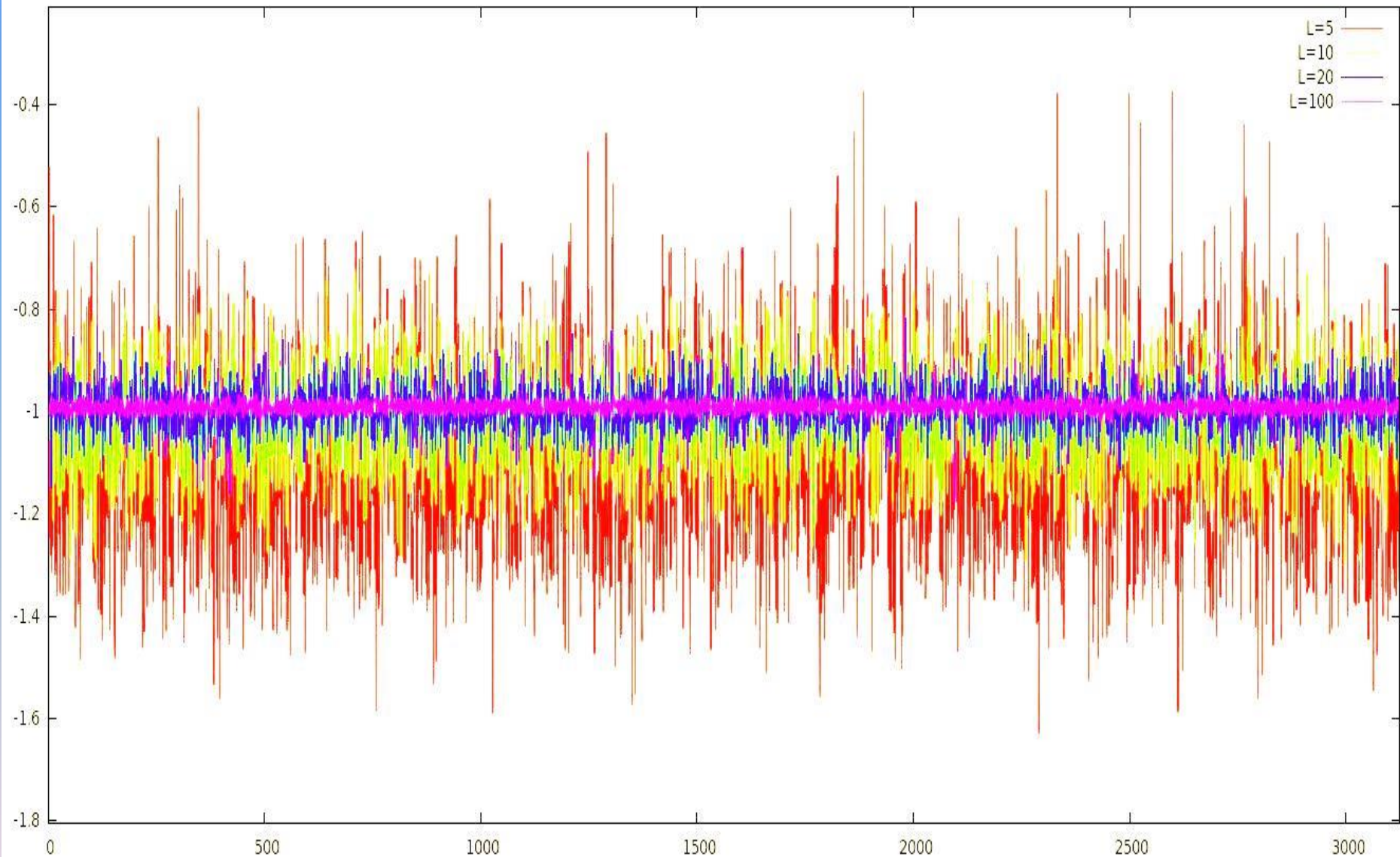
# Συμπεριφορά μοντέλου σε σχέση με το μέγεθος πλέγματος

Οι προσομοιώσεις που κάνουμε για να μελετήσουμε το μοντέλο πραγματοποιούνται με πολλές διαφορετικές παραμέτρους με σημαντικότερη την αλλαγή του μεγέθους του πλέγματος.

Χρησιμοποιήσαμε λοιπόν διαφορετικά μεγέθη πλέγματος έτσι ώστε να πάρουμε μια εικόνα για την συμπεριφορά του μοντέλου σε σχέση με το μέγεθος του πλέγματος, όπως και επίσης να μειώσουμε όσο μπορούμε τα σφάλματα λόγω πεπερασμένου μεγέθους του πλέγματος (*finite size effects*) αλλά και να βγάλουμε χρήσιμες σχέσεις για τη συμπεριφορά του μοντέλου στο θερμοδυναμικό όριο (*finite size scaling*).

Έτσι πήραμε μετρήσεις για μεγέθη πλέγματος  $L = 8, 20, 40, 50, 60, 80, 100$  και  $200$ .

# Συμπεριφορά μοντέλου σε σχέση με το μέγεθος πλέγματος



# Συμπεριφορά μοντέλου σε σχέση με το μέγεθος πλέγματος

Παρατηρούμε ότι όσο μεγαλύτερο είναι το μέγεθος του πλέγματος, τόσο μικρότερες είναι οι διακυμάνσεις της ενέργειας του συστήματος σύμφωνα και με την σχέση  $\frac{\Delta E}{E} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}$ .

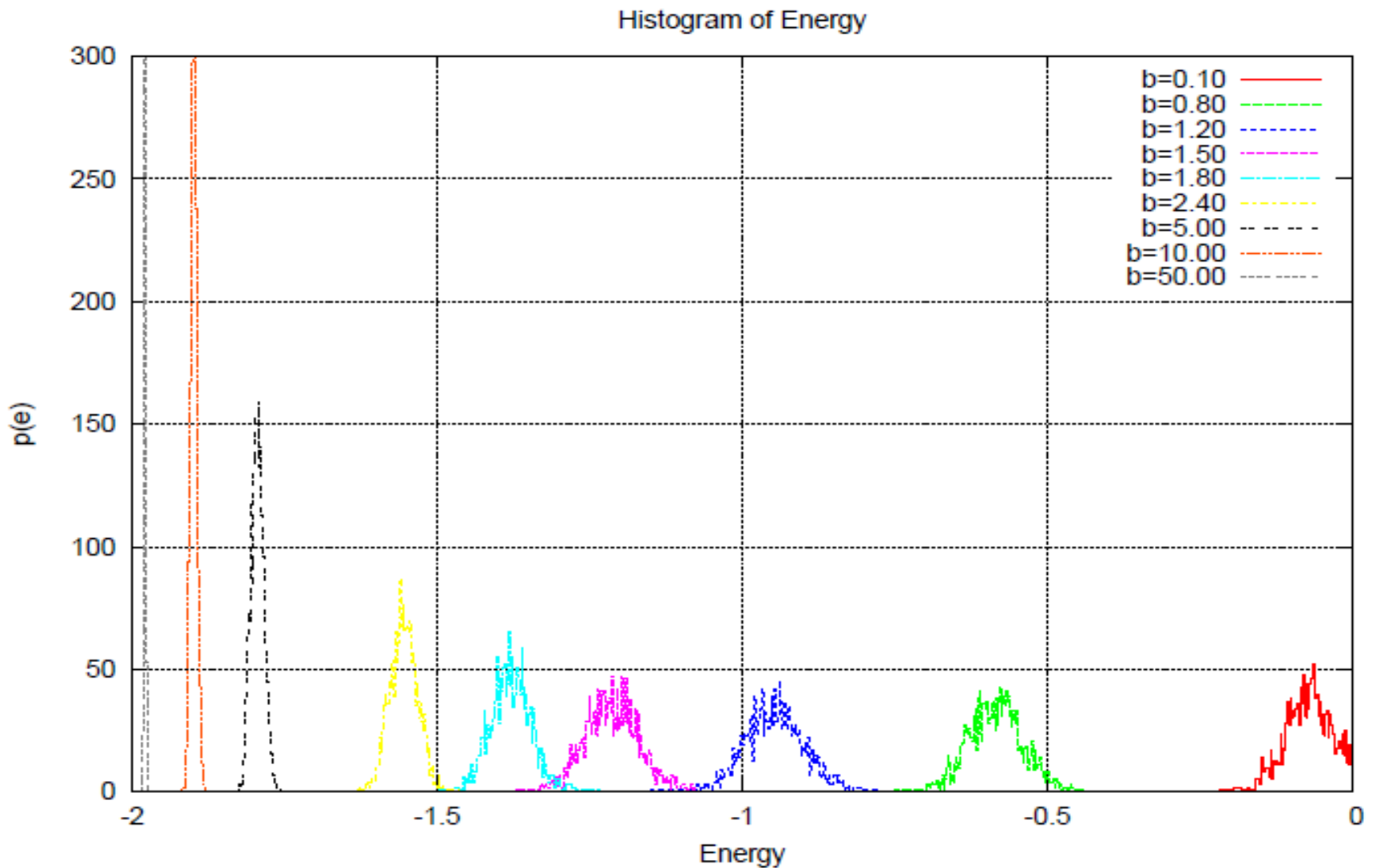
Η μεταβολή ενός spin σε ένα μικρό πλέγμα έχει μεγάλη επίδραση στην ενέργεια του συστήματος, αντίθετα με την περίπτωση που θα είχαμε αν το πλέγμα ήταν μεγάλο, όπου η συνεισφορά της μεταβολής ενός spin στην συνολική ενέργεια του συστήματος είναι αρκετά μικρή.

Ξεκινώντας λοιπόν από μια υψηλή θερμοκρασία ( $\beta=0,001$ ) και σταδιακά μειώνοντας την, καταγράφουμε για κάθε θερμοκρασία την ενέργεια ανά δεσμό  $e$  και την μαγνήτιση ανά spin  $m$  (μέσες τιμές).

Προσέχουμε να μην συμπεριλάβουμε στον υπολογισμό των μέσων τιμών, τις μετρήσεις οι οποίες "ανήκουν" στο thermalization time, καθώς επίσης οι μετρήσεις που καταγράφουμε να είναι ανεξάρτητες.

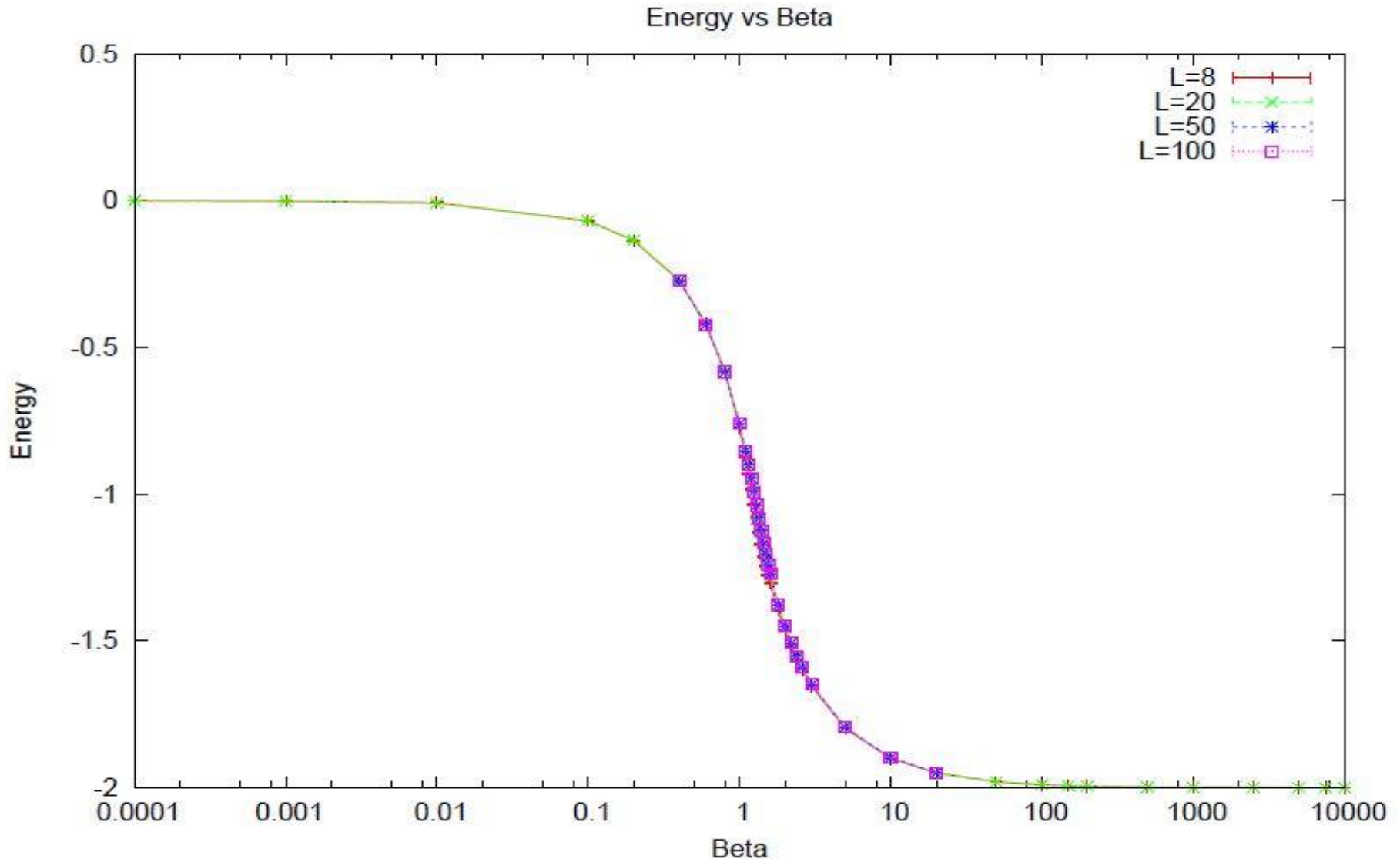
Σημειώνουμε ότι αποθηκεύουμε την διάταξη των spins μετά το τέλος της κάθε μέτρησης και συνεχίζουμε από αυτήν την διάταξη για το υπολογισμό της καινούριας μέτρησης στην αμέσως επόμενη θερμοκρασία που μας ενδιαφέρει. Με αυτόν τον τρόπο ελαχιστοποιούμε τον χρόνο για να βρεθεί το σύστημα μας πάλι σε κατάσταση θερμικής ισορροπίας.

# Ενέργεια



Ιστογράμματα της ενέργειας σε σχέση με την θερμοκρασία.

# Ενέργεια



Γραφική παράσταση της εξάρτησης της ενέργειας του συστήματος σε σχέση με την θερμοκρασίας, για διάφορα μεγέθη πλέγματος.

# Εξάρτηση της ενέργειας τους συστήματος σε σχέση με την θερμοκρασία.

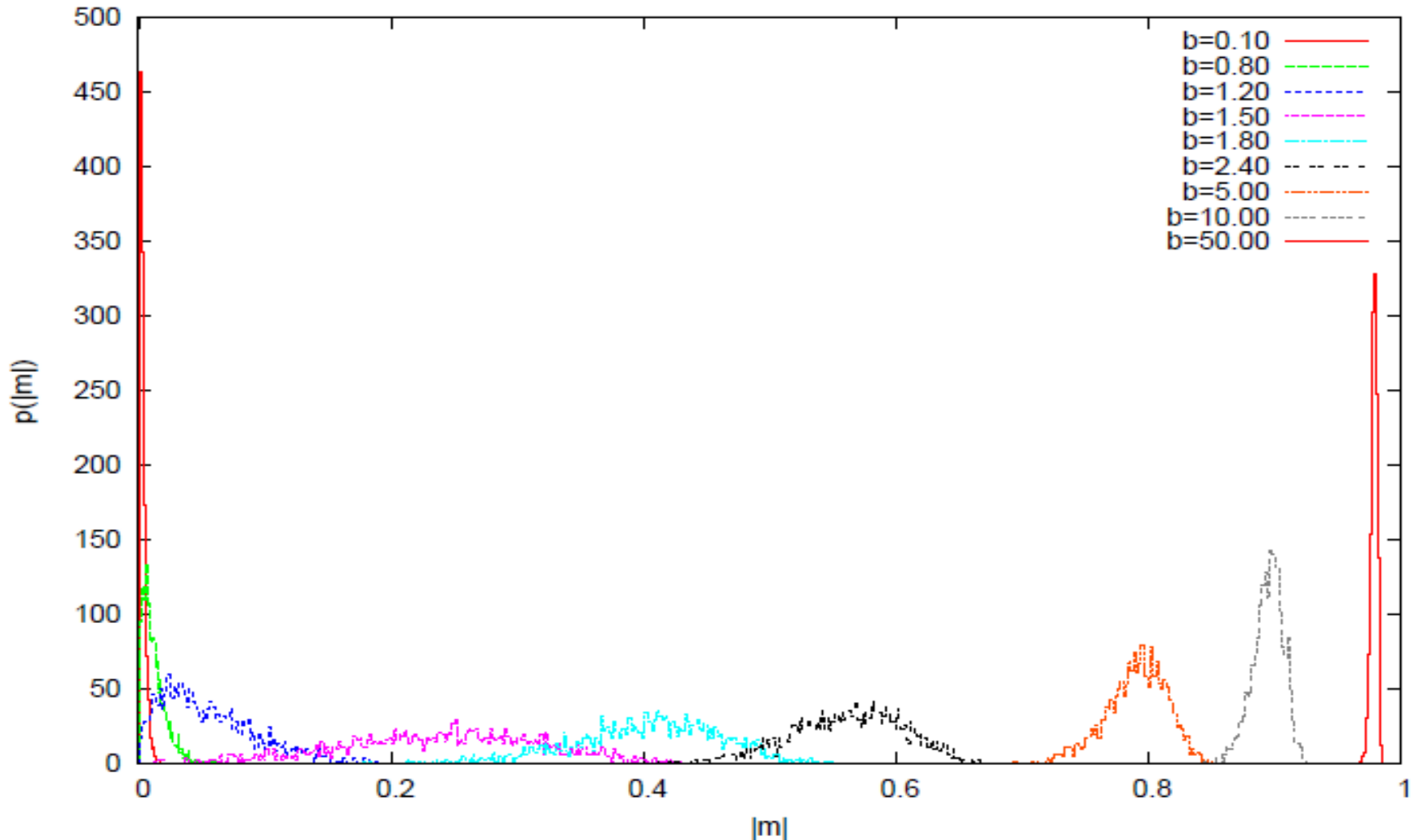
Παρατηρούμε ότι για υψηλές θερμοκρασίες ( $\beta=0.0001$ ) το σύστημα μας έχει την μεγαλύτερη τιμή ενέργειας ενώ παρουσιάζει την ελάχιστη για μικρές θερμοκρασίες ( $\beta=10000$ ). Αυτό το εξηγείται από την φύση του συστήματος όπου για μικρές θερμοκρασίες, όπως αναφέραμε, όλα τα spins του πλέγματος τείνουν να ευθυγραμμιστούν ομόρροπα έτσι ώστε να έχουμε την ελάχιστη ενέργεια (θεμελιώδης ενέργεια).

Βλέπουμε ότι η συμπεριφορά του συστήματος δεν επηρεάζεται από το μέγεθος του πλέγματος. Επίσης παρατηρούμε μια ομαλή μετάβαση της ενέργειας, από τις υψηλές θερμοκρασίες προς τις χαμηλές, κάτι που υποδηλώνει την μη ύπαρξη μετάβασης φάσης όπως θα δούμε και στα επόμενα διαγράμματα της μαγνήτισης.

Σημαντικό είναι να αναφέρουμε ότι όπως θα δούμε παρακάτω, οι τιμές της ενέργειας για  $\beta > 1.80$  παρουσιάζουν προβλήματα λόγω πεπερασμένου μεγέθους του πλέγματος και δεν θα πρέπει να λαμβάνονται υπ' όψιν.

# Μαγνήτιση

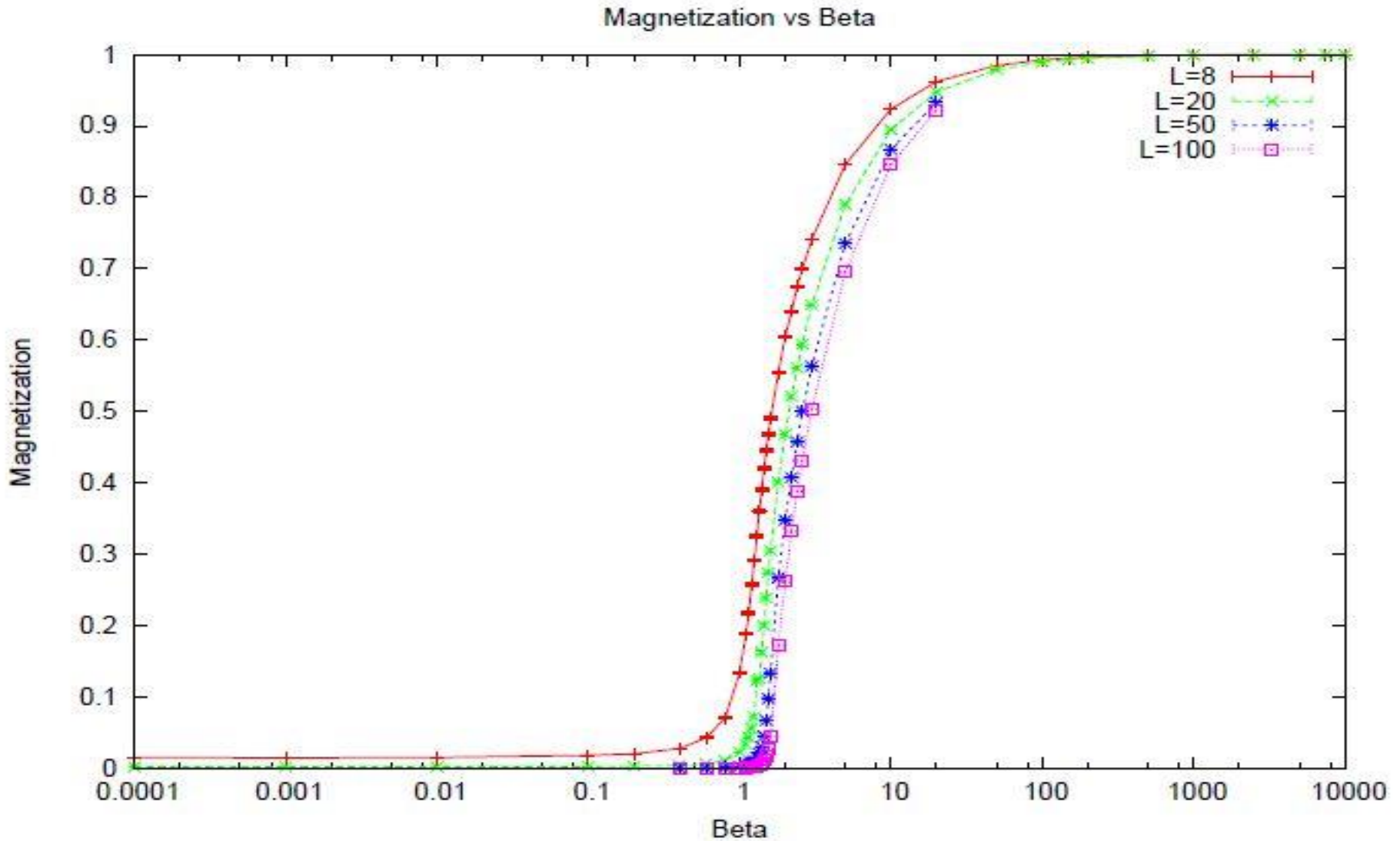
Histogram of Magnetization



Ιστόγραμμα της απόλυτης τιμής της μαγνήτισης ανά πλεγματική θέση για διάφορες θερμοκρασίες.



# Μαγνήτιση



Η μαγνήτιση του συστήματος ανά πλεγματική θέση σε σχέση με την θερμοκρασία για διαφορετικά μεγέθη πλέγματος.

# Μαγνήτιση ανά πλεγματική θέση του συστήματος σε σχέση με την θερμοκρασία.

Παρατηρούμε μια συνεχής καμπύλη, ένδειξη για την μη παρουσία αλλαγής φάσης, η οποία για υψηλές θερμοκρασίες τείνει στο μηδέν (0), ενώ για χαμηλές θερμοκρασίες τείνει στην τιμή ένα (1). Φαινόμενο που εξηγείται εφόσον έχουμε πει ότι στις υψηλές θερμοκρασίες τα spins είναι προσανατολισμένα τυχαία, με αποτέλεσμα να μην συνεισφέρουν σε μια ολική μαγνήτιση για το σύστημα. Αντίθετα στις χαμηλές θερμοκρασίες τα spins είναι ευθυγραμμισμένα ομόρροπα (θεμελιώδης κατάσταση) και έτσι δίνουν την μέγιστη τιμή μαγνήτισης στο σύστημα.

Επίσης παρατηρούμε μια μετατόπιση της καμπύλης προς τις χαμηλότερες θερμοκρασίες καθώς αυξάνεται το μέγεθος του πλέγματος.

# Μαγνήτιση

Σημειώνουμε επίσης ότι δεν αλλάζει η κλίση της καμπύλης όσο μεγαλώνει το πλέγμα, οπότε η συνεχής καμπύλη δεν οφείλεται σε φαινόμενα πεπερασμένου μεγέθους πλέγματος.

Τέλος όπως έχουμε πει και θα δείξουμε και στη συνέχεια, οι μετρήσεις για θερμοκρασίες μεγαλύτερες του 1.80 παρουσιάζουν έντονα τα φαινόμενα λόγω πεπερασμένου μεγέθους του πλέγματος και δεν θα πρέπει να λαμβάνονται υπ' όψιν.

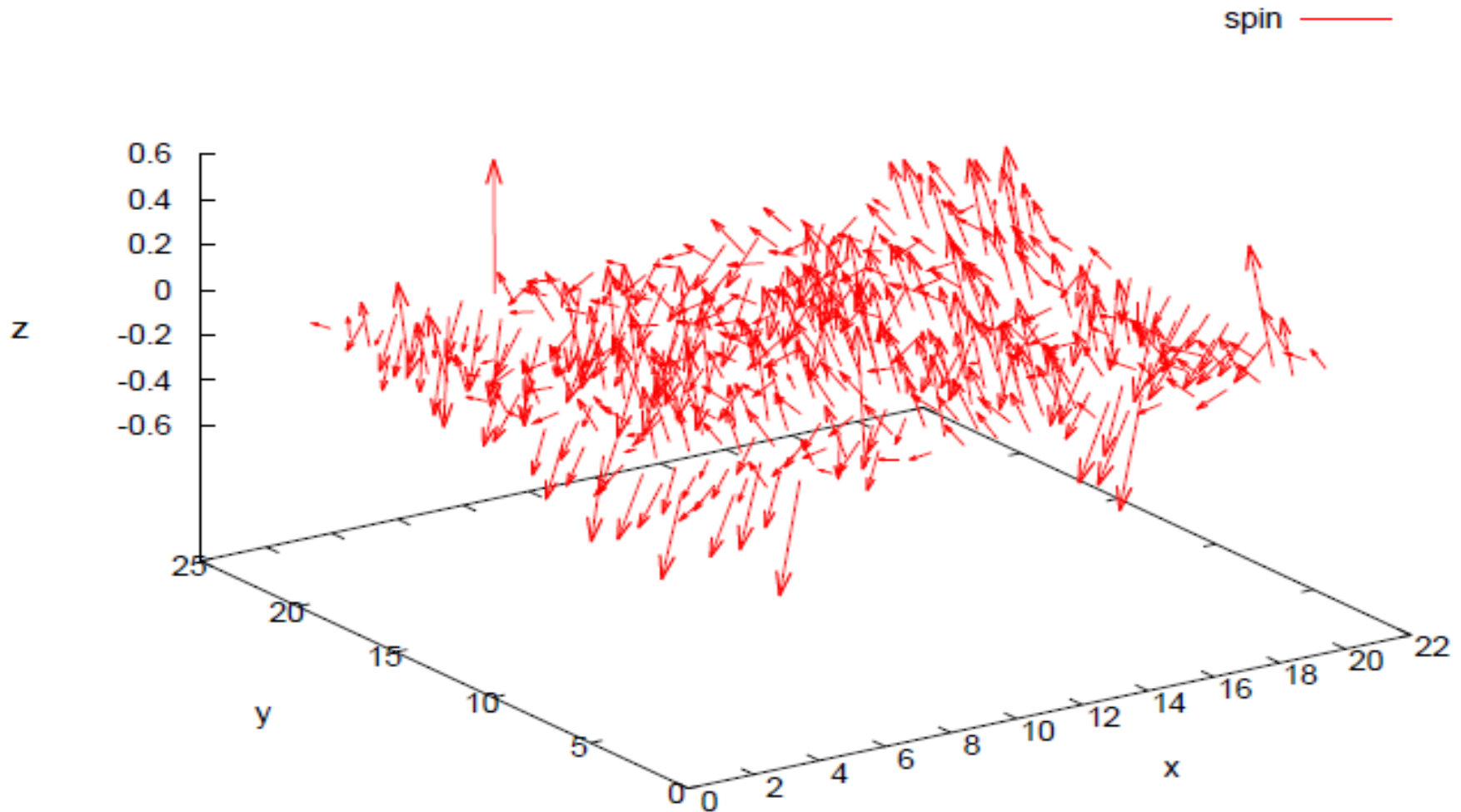
# Διαμόρφωση των spins σε χαμηλές θερμοκρασίες

Χαρακτηρίστηκες είναι οι παρακάτω εικόνες του πλέγματος ( $L=20 \times 20$ ) για χαμηλή θερμοκρασία, όπου παρατηρούμε την επιλογή της διεύθυνσης των spins προς την διεύθυνση του  $y$  άξονα χωρίς να παρατηρούμε όμως αυθόρμητο σπάσιμο συμμετρίας στις θερμοκρασίες που μπορούμε να προσομοιώσουμε.

Υπενθυμίζουμε, ότι στο μοντέλο Heisenberg στις 2 διαστάσεις, δεν παρατηρούμε φάση τάξης, οπότε δεν έχουμε αυθόρμητο σπάσιμο συμμετρίας, σύμφωνα και με το θεώρημα *Mermin–Wagner–Hohenberg*

# Διαμόρφωση των spins σε χαμηλές θερμοκρασίες

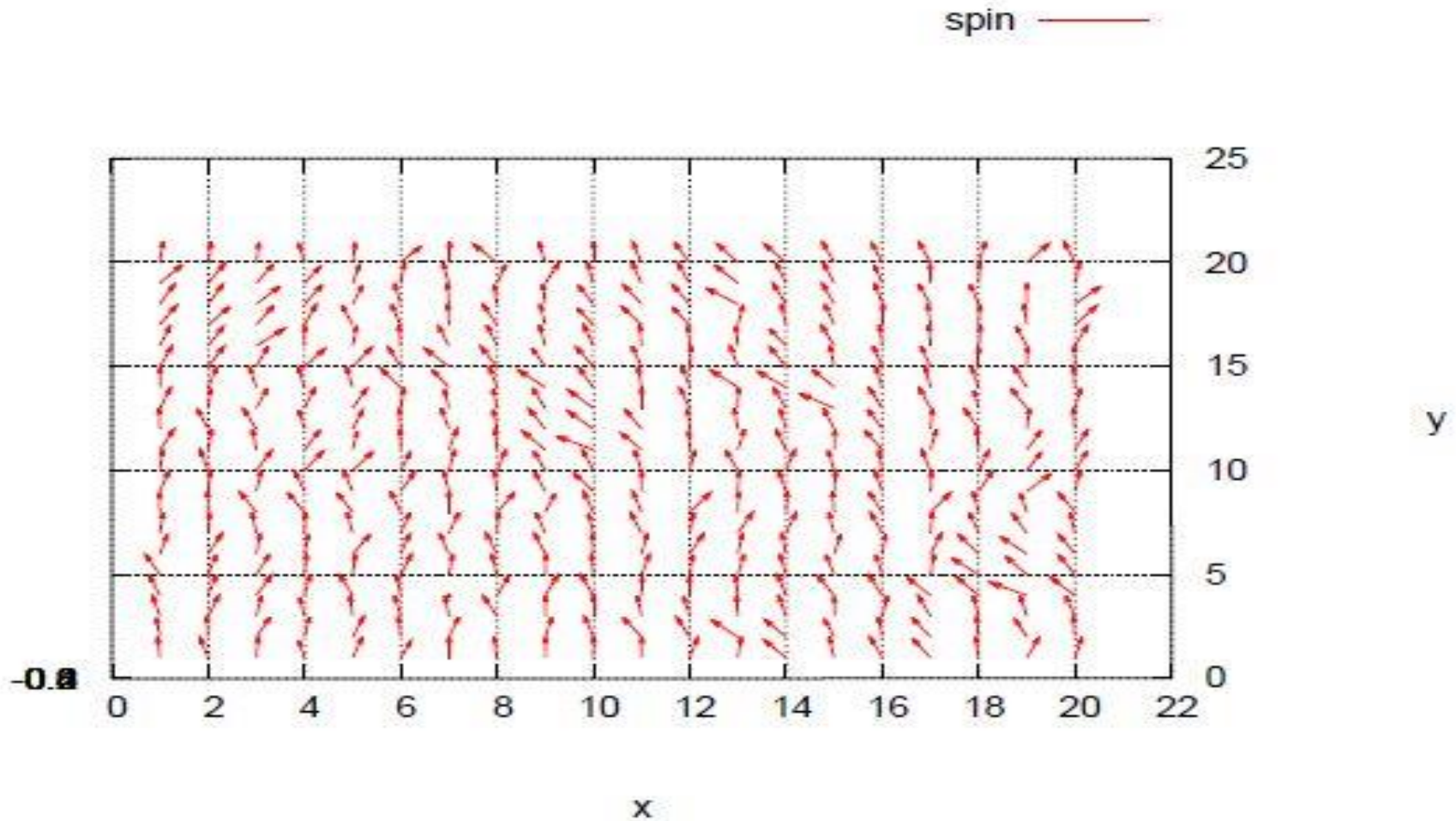
Spin Configuration at Low Temperature



Η διάταξη των spins σε ένα πλέγμα 20x20 για χαμηλή θερμοκρασία.

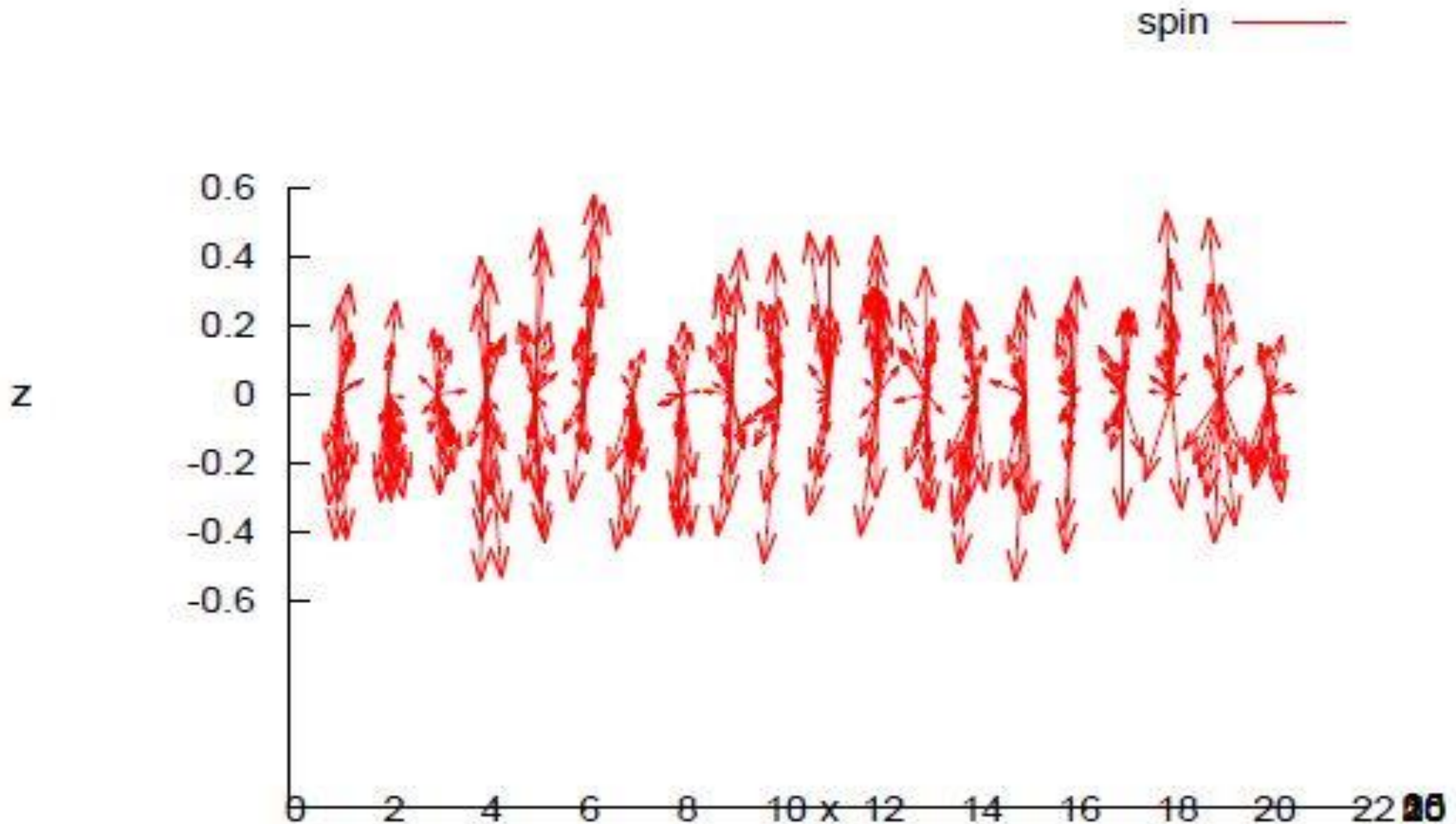
# Διαμόρφωση των spins σε χαμηλές θερμοκρασίες

Spin Configuration at Low Temperature



# Διαμόρφωση των spins σε χαμηλές θερμοκρασίες

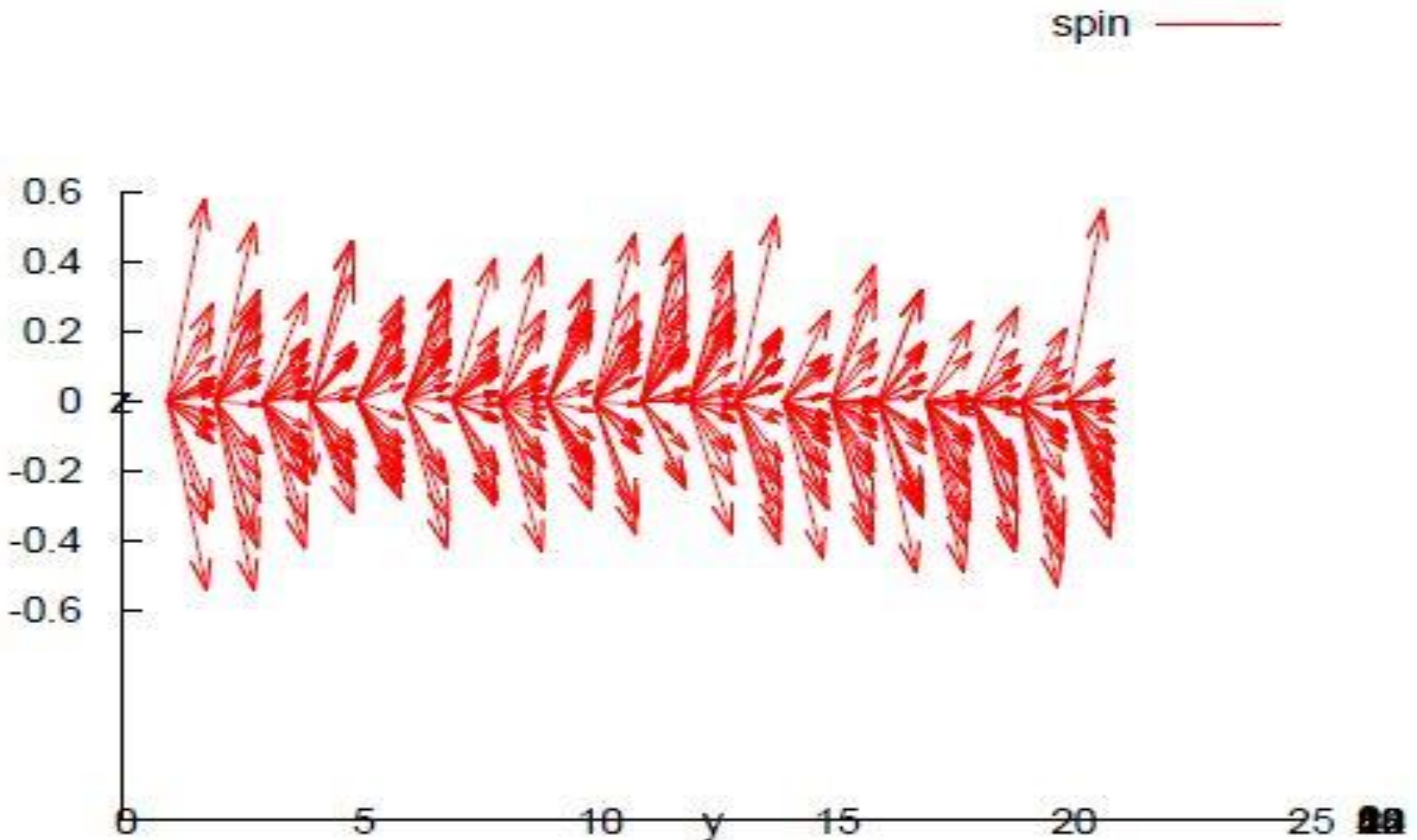
Spin Configuration at Low Temperature





# Διαμόρφωση των spins σε χαμηλές θερμοκρασίες

Spin Configuration at Low Temperature





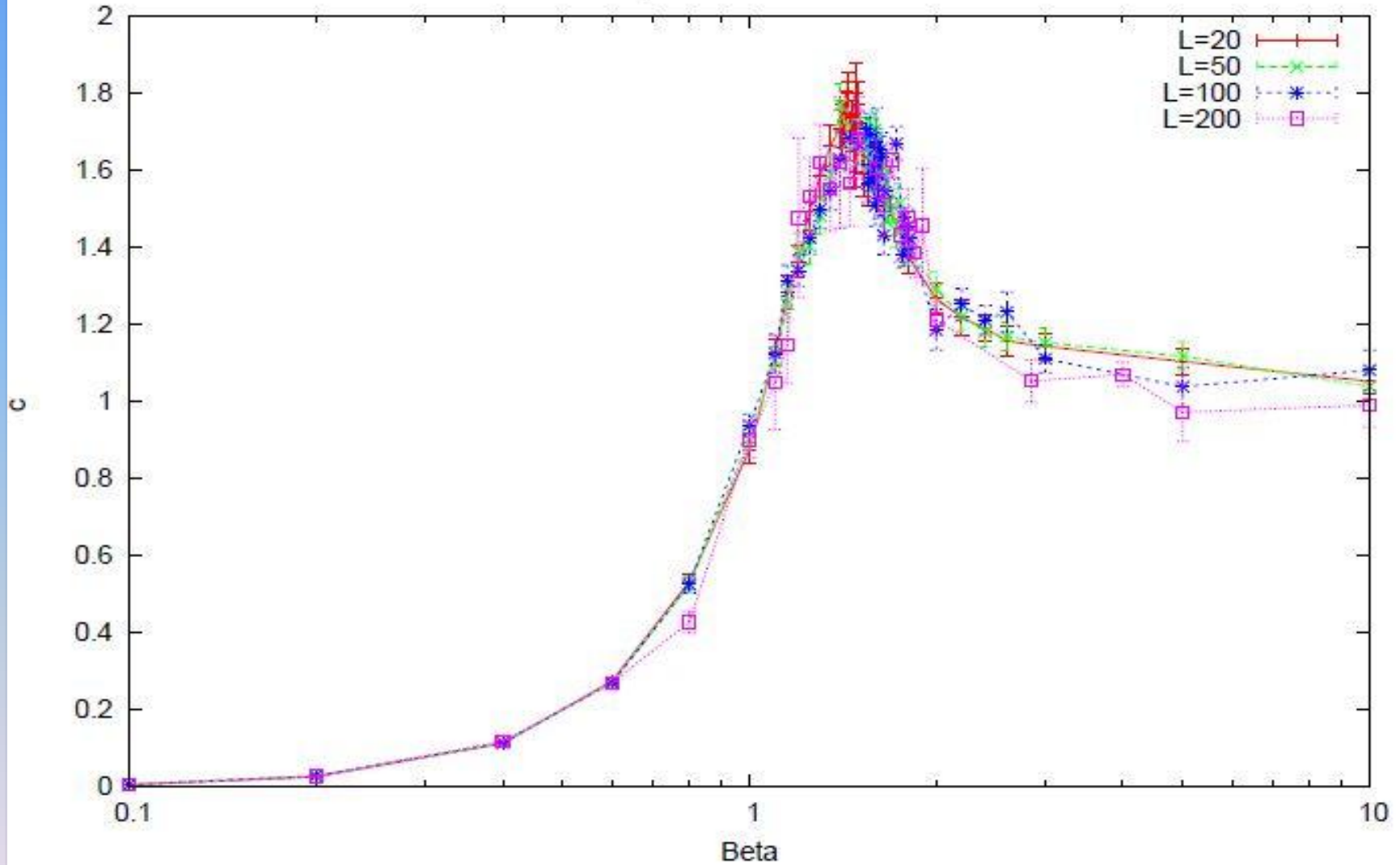
# Ειδική θερμοχωρητικότητα

Μέσω των μετρήσεων της ενέργειας και των διακυμάνσεων αυτής υπολογίζουμε την ειδική θερμότητα από τη σχέση

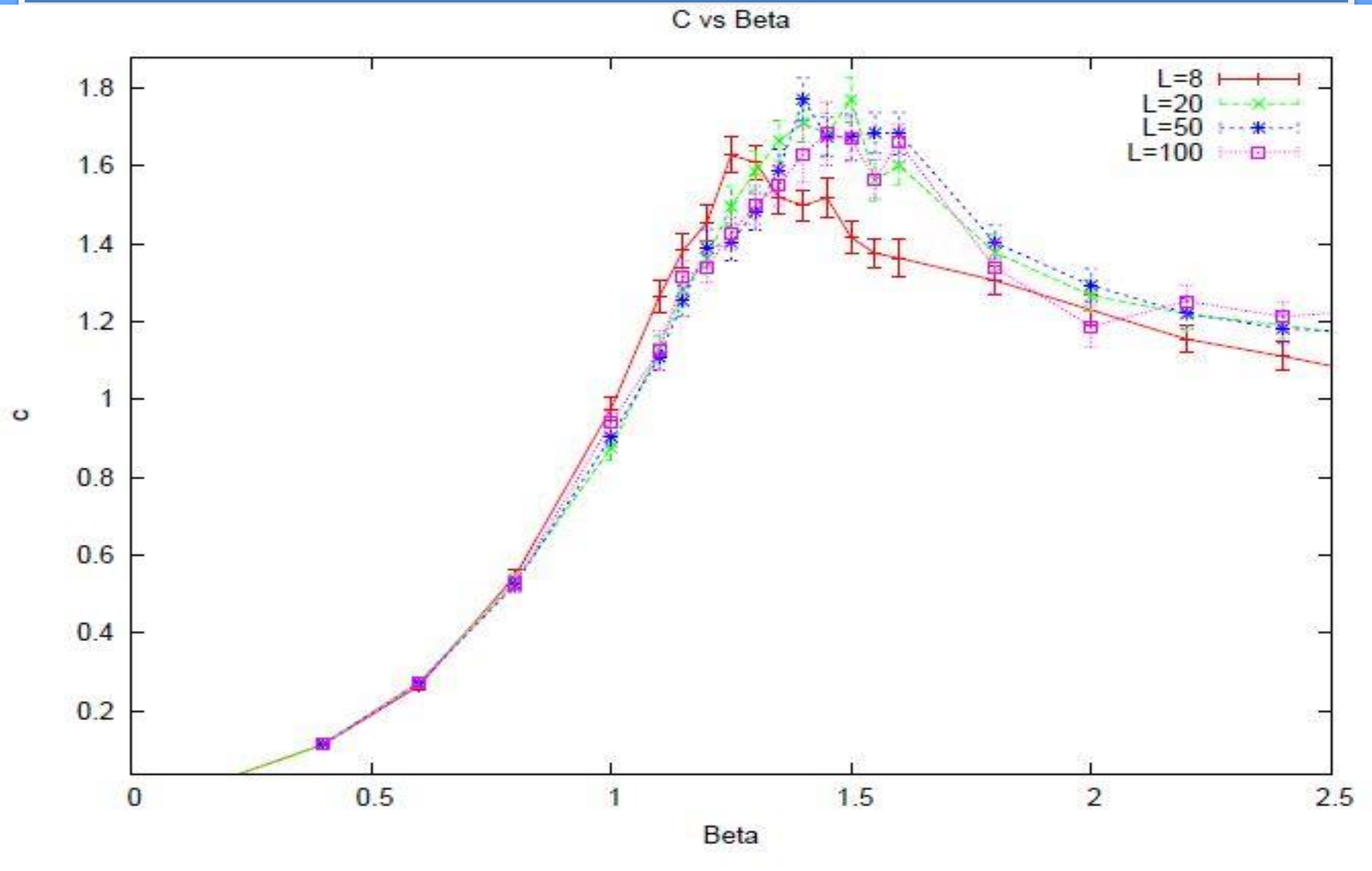
$$c = N\beta^2(\Delta E)^2$$

# Ειδική Θερμοχωρητικότητα

Specific Heat - Beta



# Ειδική θερμοχωρητικότητα



# Ειδική θερμοχωρητικότητα

Παρατηρούμε στο γράφημα της ειδικής θερμότητας, ότι η τιμή της αυξάνεται παρουσιάζοντας ένα μέγιστο για θερμοκρασία κοντά στην τιμή 1.50. Βλέπουμε επίσης ότι το μέγεθος του συστήματος μετατοπίζει την κορυφή του γραφήματος μετακινώντας την προς τις μικρότερες θερμοκρασίες (μεγαλύτερο  $\beta$ ) καθώς αυξάνεται. Οι τιμές για θερμοκρασίες μεγαλύτερες από  $\beta > 1.80$  επηρεάζονται σημαντικά από φαινόμενα λόγω πεπερασμένου μεγέθους του πλέγματος, ώστε να μην θεωρούνται σωστές.

Η ύπαρξη κορυφής στο γράφημα της ειδικής θερμότητας αποκλείει την ύπαρξη μετάβασης φάσης 1<sup>ης</sup> ή 2<sup>ης</sup> τάξης στις οποίες περιμένουμε απειρισμό της ποσότητας.

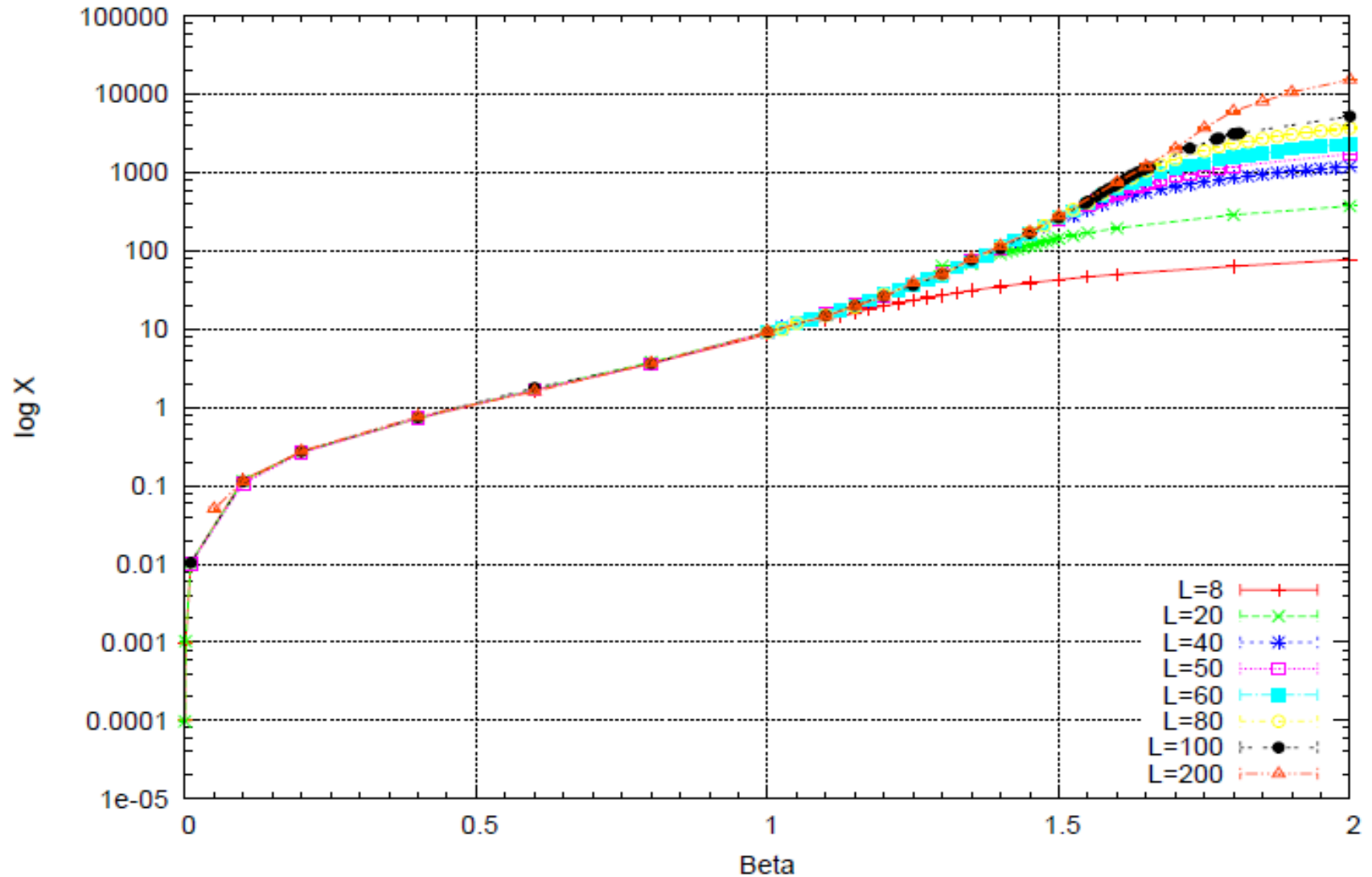
# Μαγνητική επιδεκτικότητα

Αντίστοιχα για τον υπολογισμό της μαγνητικής επιδεκτικότητας χρησιμοποιούμε την σχέση

$$X = \frac{\beta}{N} \langle M^2 \rangle$$

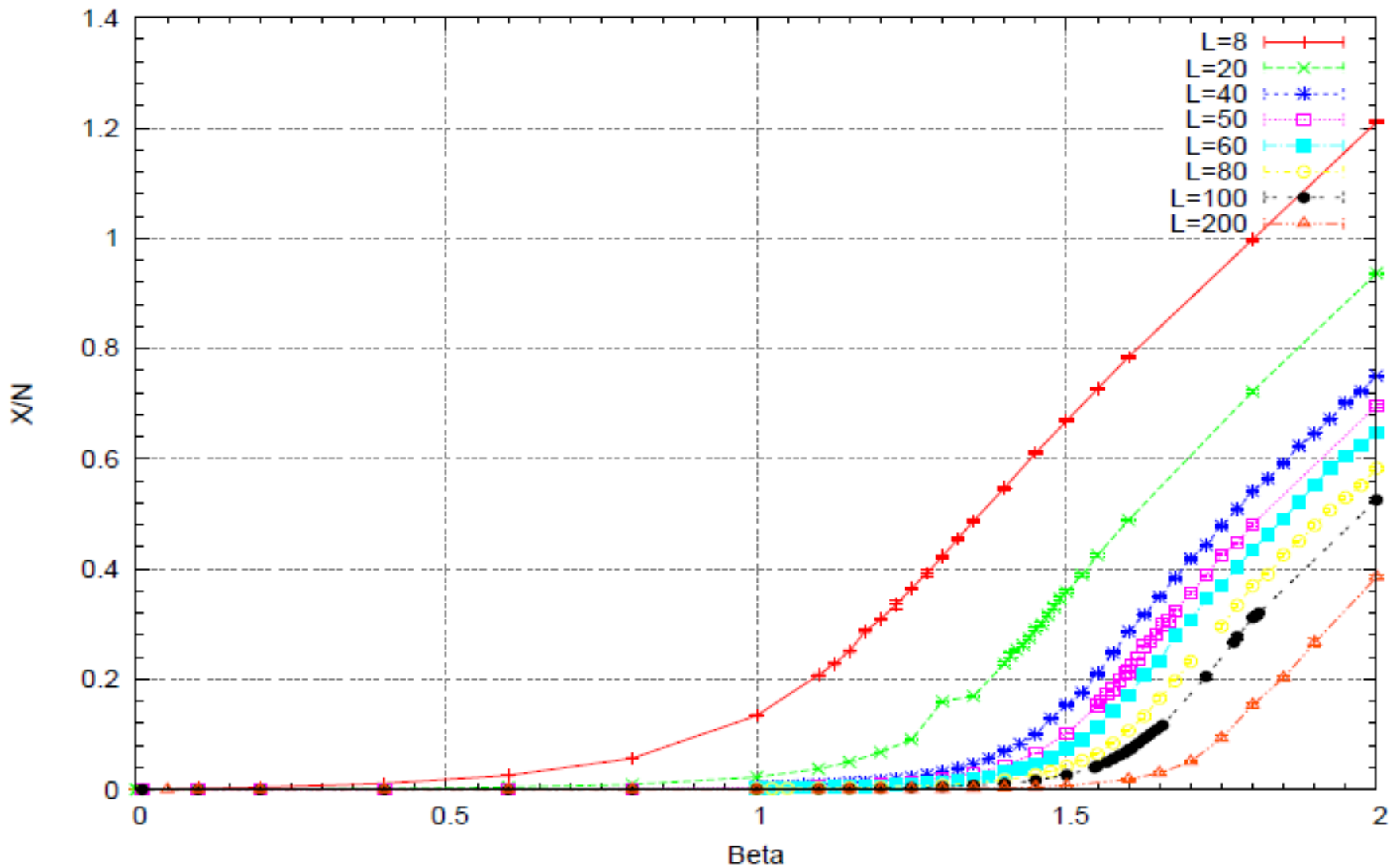
# Μαγνητική επιδεκτικότητα

Magnetic Susceptibility



# Μαγνητική επιδεκτικότητα

Magnetic Susceptibility per Site



# Μαγνητική επιδεκτικότητα

Παρατηρούμε ότι μετά από κάποια θερμοκρασία (αντίστοιχη για κάθε μέγεθος πλέγματος) οι τιμές της μαγνητικής επιδεκτικότητας αυξάνονται εκθετικά και τείνουν να απειριστούν. Επίσης βλέπουμε ότι όσο μεγαλύτερο είναι το πλέγμα της προσομοίωσης μας, τόσο η θερμοκρασία στην οποία παρατηρούμε την αλλαγή στο ρυθμό αύξησης της τιμής της μεγαλώνει. Το φαινόμενο οφείλεται και πάλι στα φαινόμενα λόγω πεπερασμένου μεγέθους του πλέγματος μας και υποθέτουμε ότι σε ακόμα μεγαλύτερα πλέγματα η μαγνητική επιδεκτικότητα θα ακολουθεί την asymptotic scaling συμπεριφορά, υπόθεση την οποία θα ελέγξουμε στη συνέχεια.

Τέλος σημαντικό είναι να σημειώσουμε ότι τα σφάλματα των μετρήσεων και για τα δύο μεγέθη μεγαλώνουν παρά την αύξηση του μεγέθους του πλέγματος, λόγω των λιγότερων μετρήσεων που κάνουμε ώστε ο χρόνος της προσομοίωσης μας να είναι σε «φυσιολογικά» πλαίσια



# Ροπή 4<sup>ης</sup> Τάξης - Binder Cumulant

Μία συνήθης μέθοδος για να προσδιορίσουμε την κρίσιμη θερμοκρασία  $T_c$  είναι με την χρήση της ροπής 4<sup>ης</sup> τάξης, ή αλλιώς της ροπής Binder. Η μέθοδος αυτή γενικά είναι καλύτερη για τον προσδιορισμό της κρίσιμης θερμοκρασία σε σχέση με άλλες μεθόδους, λόγω του ότι περιορίζονται αρκετά τα φαινόμενα λόγω πεπερασμένου μεγέθους του συστήματος.

$$V_x(L) = 1 - \frac{\langle (x - \langle x \rangle_L)^4 \rangle}{3 \langle (x - \langle x \rangle_L)^2 \rangle^2}$$

,όπου  $x$  η ποσότητα που μελετάμε και  $L$  το μέγεθος του συστήματος μας.

Στην εργασία αυτήν θα την χρησιμοποιήσουμε σαν ακόμα μία ένδειξη για την μη ύπαρξη μετάβασης φάσης.

# Ροπή 4<sup>ης</sup> Τάξης - Binder Cumulant

Για την περίπτωση της μαγνήτισης ισχύει ότι  $\langle m^n \rangle_L = 0$  για άρτιο  $n$ , λόγω της συμμετρίας που παρουσιάζει το σύστημα. Οπότε η ροπή 4<sup>ης</sup> τάξης μπορεί να γραφτεί ως:

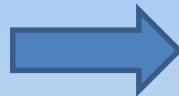
$$V_m(L) = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3\langle m^2 \rangle_L^2}$$

Όπου για  $T > T_c$  ( $\beta < \beta_c$ )



$$V_m(L) \rightarrow 0$$

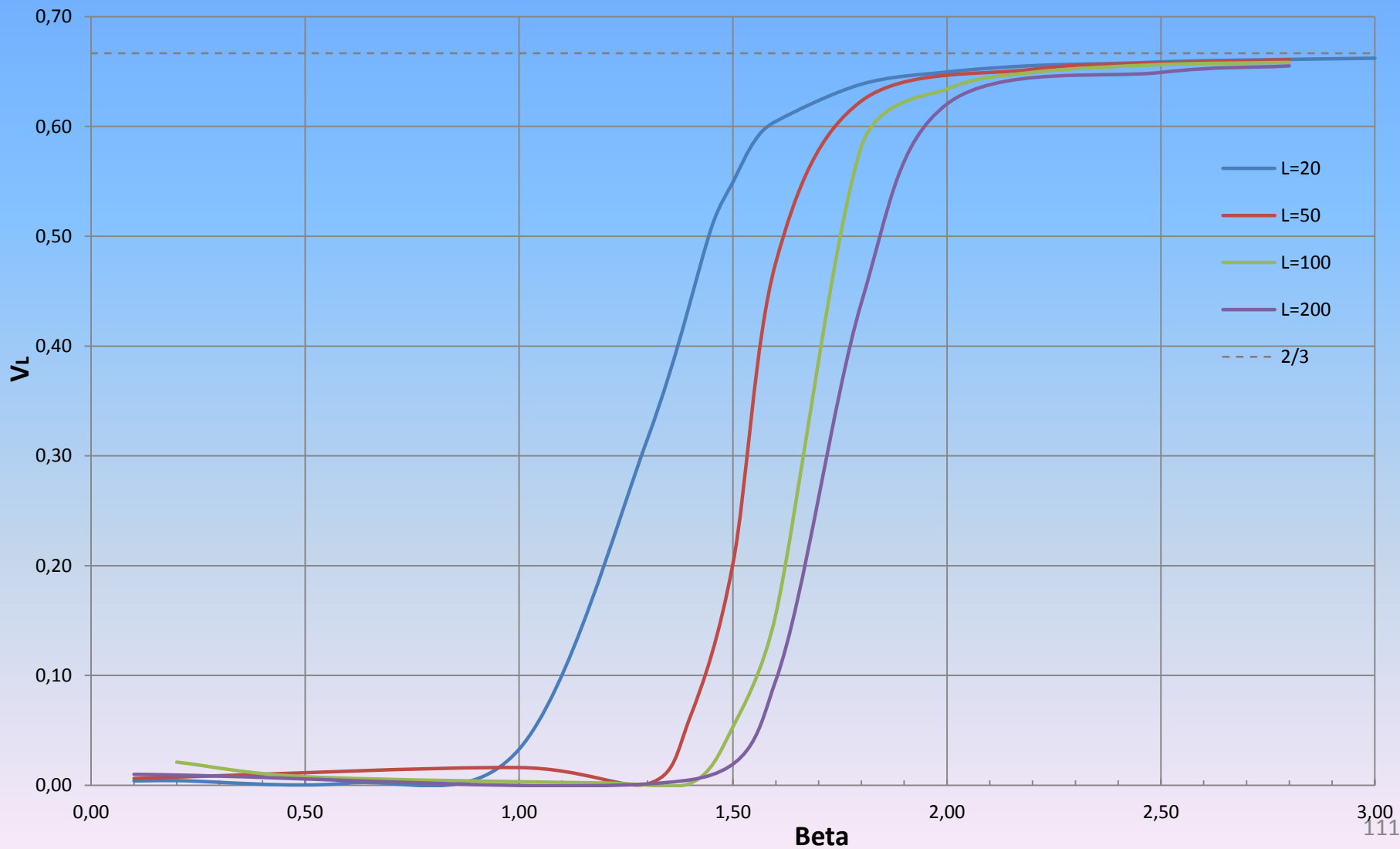
για  $T < T_c$  ( $\beta > \beta_c$ )



$$V_m(L) \rightarrow \frac{2}{3}$$

Ενώ για  $T \approx T_c$  (ή  $L \ll \xi$ ) η τιμή της ροπής 4<sup>ης</sup> τάξης τείνει σε μια συγκεκριμένη τιμή  $0 < V_m^* < \frac{2}{3}$  η οποία μεταβάλλεται πολύ λίγο με την επίδραση της θερμοκρασίας ή το μέγεθος του πλέγματος. Ενώ για  $T \approx T_c$  (ή  $L \ll \xi$ ) η τιμή της ροπής 4<sup>ης</sup> τάξης τείνει σε μια συγκεκριμένη τιμή  $0 < V_m^* < \frac{2}{3}$  η οποία μεταβάλλεται πολύ λίγο με την επίδραση της θερμοκρασίας ή το μέγεθος του πλέγματος.

# Ροπή 4<sup>ης</sup> Τάξης - Binder Cumulant

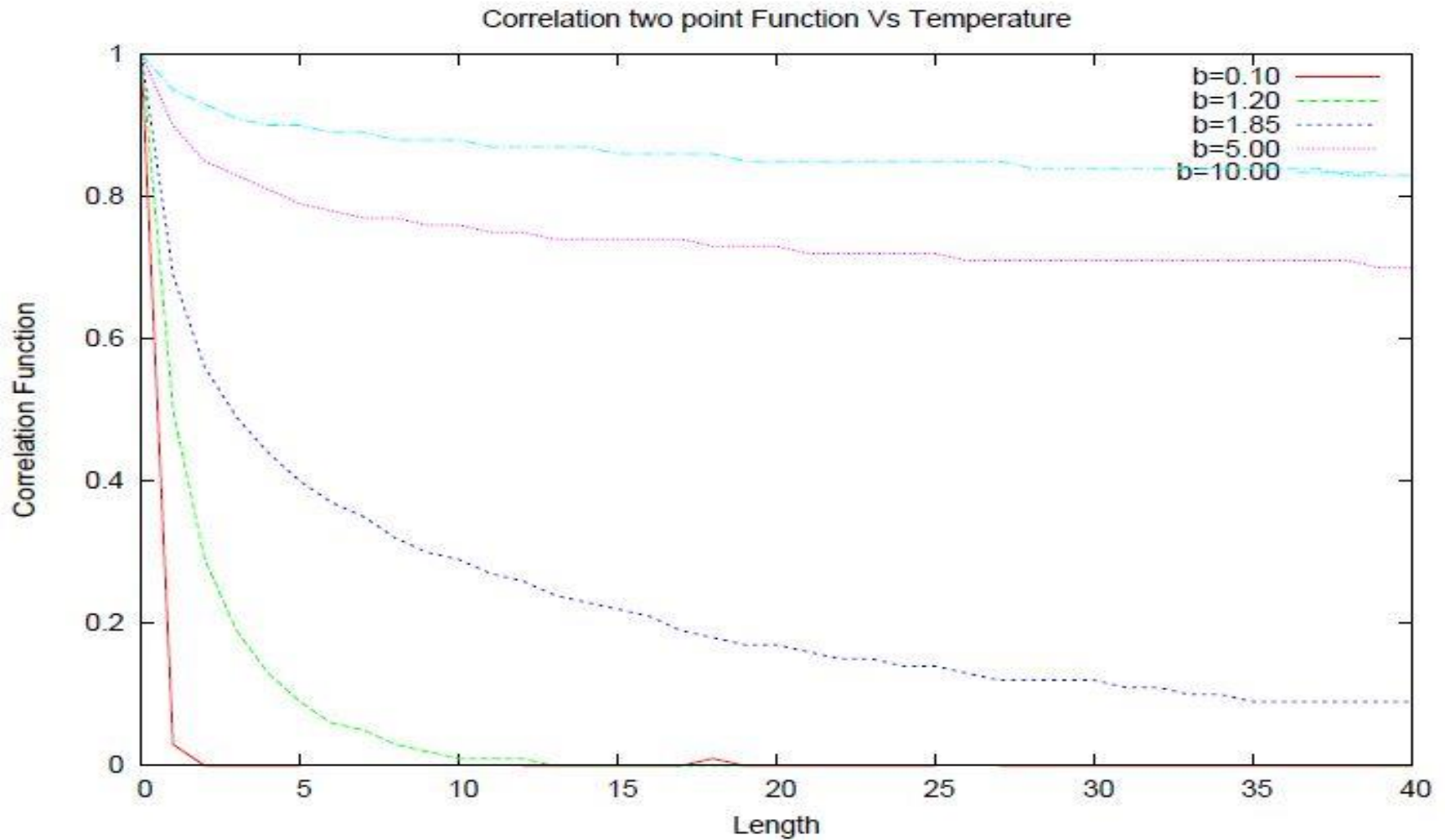


# Ροπή 4<sup>ης</sup> Τάξης - Binder Cumulant

Αν κάνουμε λοιπόν τις γραφικές παραστάσεις της ροπής 4<sup>ης</sup> τάξης για διάφορα μεγέθη πλέγματος, τότε το σημείο τομής τους μπορεί να μας δώσει την κρίσιμη θερμοκρασία  $T_c$ .

Παρατηρούμε ότι οι καμπύλες της Binder Cumulant για τα διάφορα πλέγματα δεν παρουσιάζουν σημείο τομής και μάλιστα όσο μεγαλώνει το πλέγμα, τόσο η καμπύλες κινούνται προς μεγαλύτερες τιμές  $\beta$  (μικρότερες θερμοκρασίες). Δηλαδή δεν μπορούμε να προσδιορίσουμε μία κρίσιμη θερμοκρασία όπου πραγματοποιείται η μετάβαση φάσης και έτσι έχουμε ακόμα μία ένδειξη για την μη ύπαρξη μετάβασης.

# Συνάρτηση Αυτοσυσχετισμού



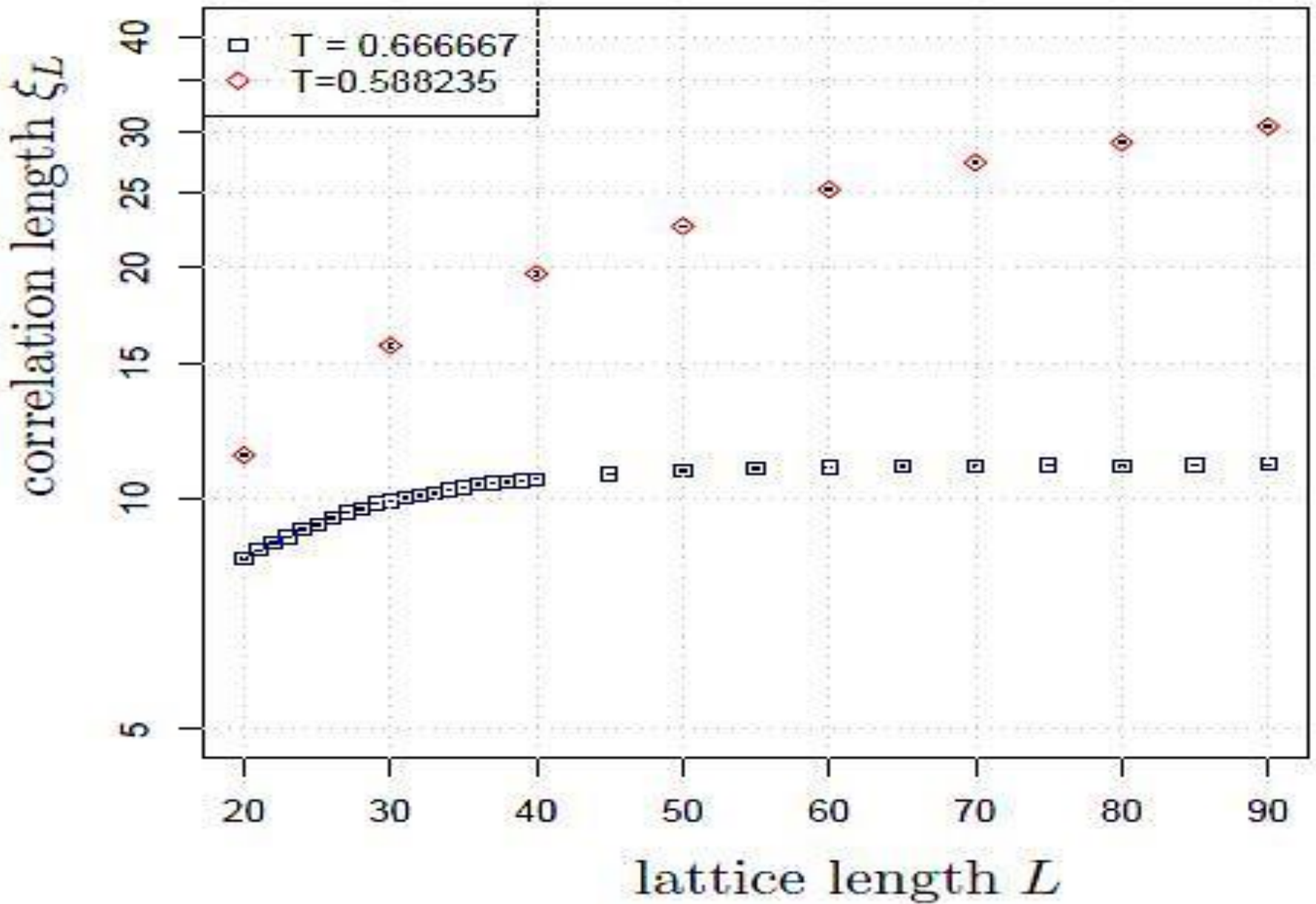
# Συνάρτηση Αυτοσυσχετισμού

Παρατηρούμε ότι για υψηλές θερμοκρασίες (μικρό  $\beta$ ) η συνάρτηση συσχετισμού μειώνεται εκθετικά σε σχέση με την απόσταση των spins και ήδη στην απόσταση μιας πλεγματικής θέσης τα spins είναι ασυσχέτιστα. Αντιθέτως για μικρές θερμοκρασίες (μεγάλο  $\beta$ ) η συνάρτηση συσχετισμού φθίνει πολύ αργά αποδεικνύοντας έτσι ότι για χαμηλές θερμοκρασίες το μοντέλο είναι ισχυρά συσχετισμένο και το μήκος συσχετισμού αγγίζει την τάξη μεγέθους  $L$  του πλέγματος.

# Μήκος Συσχετισμού

Το μήκος συσχετισμού,  $\xi$ , είναι μια σημαντική και ενδιαφέρουσα ποσότητα του μοντέλου Heisenberg, και ειδικότερα η συμπεριφορά του στην κρίσιμη περιοχή των χαμηλών θερμοκρασιών ( $T \rightarrow 0$ ).

Γενικά επειδή τα υπολογιστικά συστήματα που φτιάχνουμε είναι πολύ μικρά σε σχέση με τα φυσικά συστήματα, όταν θέλουμε να υπολογίσουμε ποσότητες που είναι κοντά σε θερμοκρασίες όπου το μήκος συσχετισμού γίνεται πολύ μεγάλο, χρησιμοποιούμε μεθόδους ώστε να ελαχιστοποιήσουμε όσο γίνεται περισσότερο τα σφάλματα λόγω πεπερασμένου μεγέθους των μοντέλων μας. Στην συγκεκριμένη εργασία θα χρησιμοποιήσουμε την μέθοδο του Kim (1996), η οποία καθιστά την περιοχή γύρω από την κρίσιμη θερμοκρασία προσιτή.



Το μήκος συσχετισμού  $\xi$  σε σχέση με το μέγεθος του πλέγματος  $L$  για 2 θερμοκρασίες. [7]



# Μέθοδος Kim για την βάθμωση πεπερασμένου μεγέθους – Finite Size Scaling (FSS)

Βασική υπόθεση της FSS

$$A_L(T) = A(T)f_A(s)$$

,όπου  $A_L$  η τιμή του μεγέθους  $A$  που μας ενδιαφέρει σε ένα μέγεθος πλέγματος  $L$  και  $s \equiv s(L, T) \equiv L/\xi$ .

Η συνάρτηση  $f_A$ , ονομάζεται καθολική συνάρτηση βάθμωσης (*universal scaling function*).

Στη σχέση κάνουμε την υπόθεση ότι η σχέση βάθμωσης  $f_A$  εξαρτάται μόνο από το  $s$ . Ενώ με  $\xi = \xi_\infty$  συμβολίζουμε το μήκος συσχετισμού στο θερμοδυναμικό όριο.

# Kim's Finite Size Scaling (FSS)

Για  $A=\xi$  γράφουμε την σχέση  $\xi_L(T) = \xi(T)f_\xi(s)$ . Αφού το  $\xi_L/L$  είναι συνάρτηση του  $\xi/L$  μπορούμε να γράψουμε τη προηγούμενη σχέση ως

$$A_L(T) = A(T)Q_A(x(L, T))$$
$$x(L, T) = \xi_L/L$$

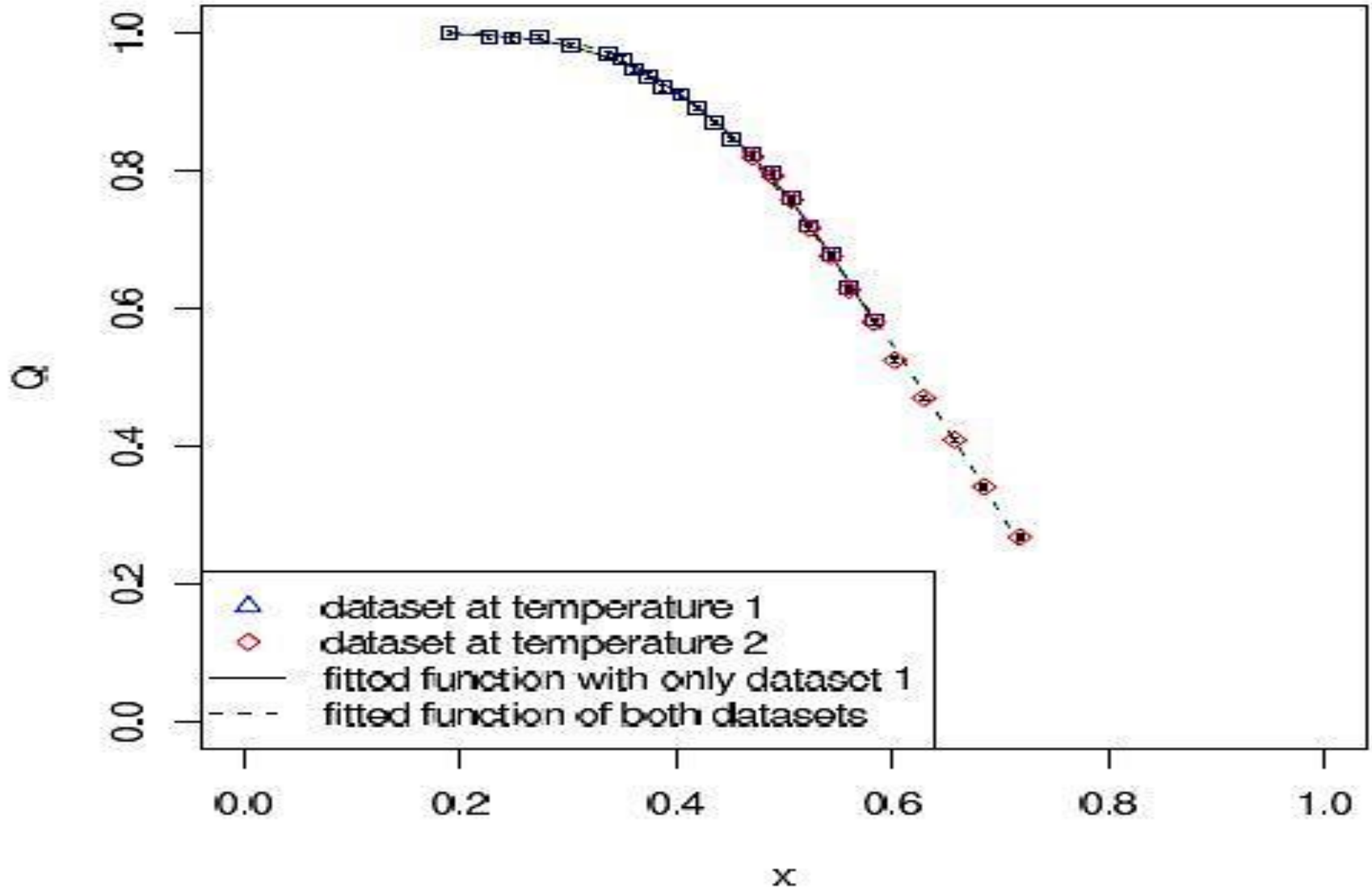
Η συνάρτηση  $Q_A$  είναι μία άλλη καθολική συνάρτηση βάρθρωσης. Το πλεονέκτημα της παραπάνω σχέσης είναι ότι δεν χρειάζεται να γνωρίζουμε το άγνωστο  $\xi = \xi_\infty$ . Με την γνώση του  $Q_A$  είναι πιθανό να υπολογίσουμε τα θερμοδυναμικά όρια από την σχέση  $A(T) = A_L(T)/Q(x)$  υπολογίζοντας πρώτα το  $Q$  και συνέχεια χρησιμοποιώντας το  $A_L(T)$  για ένα «μικρό»  $L$ .

# Kim's Finite Size Scaling (FSS)

Η μέθοδος για να βρούμε το  $Q(x) = \xi_L/\xi_\infty$  για μια μεγάλη περιοχή  $x$  είναι η ακόλουθη:

- Διαλέγουμε μία αρχική θερμοκρασία  $T_0$ , όπου το μήκος συσχετισμού  $\xi_L$  συγκλίνει και παίρνουμε το  $x(T_0) = \xi_L(T_0)/L$  και το  $Q(x(T_0))$ , για διάφορα μεγέθη πλέγματος.
- Φτιάχνουμε την γραμμή τάσης (*regression*) αυτών των δεδομένων
- Διαλέγουμε μία άλλη χαμηλότερη θερμοκρασία  $T_1$  όπου το  $\xi_L$  δεν συγκλίνει για  $L$  προσβάσιμα από την προσομοίωση Monte Carlo. Παίρνουμε το  $x(T_1) = \xi_L(T_1)/L$ . Η βάση του  $x(T_1)$  θα πρέπει να επικαλύπτεται με το  $x(T_0)$ . Για να βρούμε το αντίστοιχο  $Q(x(T_1))$  χρειαζόμαστε το  $\xi_\infty(T_1)$  το οποίο δεν έχουμε. Αντί για αυτού χρησιμοποιούμε την γραμμή τάσης  $Q(x(T_0))$  για να προεκταθούμε στο  $\xi(T_1)$ . Αυτό είναι το ίδιο με το να βαθμώναμε τα δεδομένα  $\xi_L(T_1)$  έως ότου τα σημεία της  $x(T_1)$  να επικαλύπτονται με την γραμμή τάσης. Στη συνέχεια φτιάχνουμε μια νέα γραμμή τάσης και στα δύο σετ δεδομένων.

# Kim's Finite Size Scaling (FSS)



# Kim's Finite Size Scaling (FSS)

Γνωρίζοντας το  $Q$  έχουμε δύο δυνατότητες.

- Μπορούμε να υπολογίσουμε το μήκος συσχετισμού για υψηλότερες θερμοκρασίες σε πολύ μικρά πλέγματα
- Μπορούμε να υπολογίσουμε το μήκος συσχετισμού για μικρές θερμοκρασίες με τον υπολογισμό του  $\xi_L$  και  $x$  για μεγάλα  $L$ .

Μάλιστα η τελευταία περίπτωση μας επιτρέπει να υπολογίσουμε το μήκος συσχετισμού μέχρι και  $10^5$ , το οποίο είναι πολύ μεγαλύτερο από συστήματα που μπορούμε να προσομοιώσουμε με την μέθοδο Monte Carlo.

# Kim's Finite Size Scaling (FSS)

Σκοπός μας είναι να βρούμε την εξάρτηση του μήκους συσχετισμού  $\xi$  με την θερμοκρασία  $T$  κοντά σε πολύ χαμηλές θερμοκρασίες όπου παρατηρείται το φαινόμενο του asymptotic scaling.

Σε αυτές τις θερμοκρασίες περιμένουμε μια εκθετική σχέση της μορφής

$$\xi \propto e^{2\pi J/k_B T}$$

# Μήκος Συσχετισμού

Το μήκος συσχετισμού για περιοδικές συνοριακές συνθήκες υπολογίζεται από τη σχέση:

$$\xi_L \approx \frac{1}{2 \sin\left(\frac{|q|}{2}\right)} \sqrt{\frac{\hat{g}(0)}{\hat{g}(q)} - 1}$$

, όπου  $\hat{g}(\cdot)$  είναι η διακριτός μετασχηματισμός Fourier (Discrete Fourier Transform - DFT) της συνάρτησης συσχετισμού ζεύγους  $g(\cdot)$ .

$$g(S_0, S_k) = \mathbb{E}[S_0 \cdot S_k] = \frac{1}{N} \mathbb{E} \left[ \sum_i (S_i \cdot S_{i+k}) \right]$$

# Βελτιωμένος Εκτιμητής για το Μήκος Συσχετισμού με τον αλγόριθμο του Wolff.

Για να μπορέσουμε να υπολογίσουμε το μήκος συσχετισμού χρειαζομαστε να υπολογίσουμε πρώτα την συνάρτηση συσχετισμού

Φτιάχνουμε έναν εκτιμητή του διακριτού μετασχηματισμού της συνάρτησης συσχετισμού, ο οποίος χρησιμοποιεί το μέγεθος των cluster του Αλγόριθμου Wolff.

$$\hat{g}(q) = 3 \frac{1}{M} \sum_{n=1}^M \frac{1}{NS(cluster_n)} \left| \sum_{i,j \in cluster_n} (e_n \cdot S_i^{(n)}) e^{i \frac{2\pi}{L} qi} \right|^2$$

,όπου  $S_i^{(n)}$  είναι η διαμόρφωση των spins στο n-οστό βήμα Monte Carlo και  $S(cluster_n)$  είναι το μέγεθος του cluster στο n-οστό βήμα Monte Carlo.



# Αλγόριθμος Wolff

Για τον υπολογισμό του μήκους συσχετισμού με την μέθοδο του Kim, χρησιμοποιήσαμε τον κώδικα του κ. S. Walter, στον οποίο χρησιμοποιείται ο αλγόριθμος Wolff.

Ο αλγόριθμος Wolff είναι ο ευκολότερος τρόπος για μελετήσουμε και να υπολογίσουμε το μήκος συσχετισμού  $\xi$ , καθώς δεν παρουσιάζει κρίσιμη επιβράδυνση (*critical slowing down*) και επιτρέπει τον υπολογισμό του  $\xi$  με καλή προσέγγιση.

# Αλγόριθμος Wolff

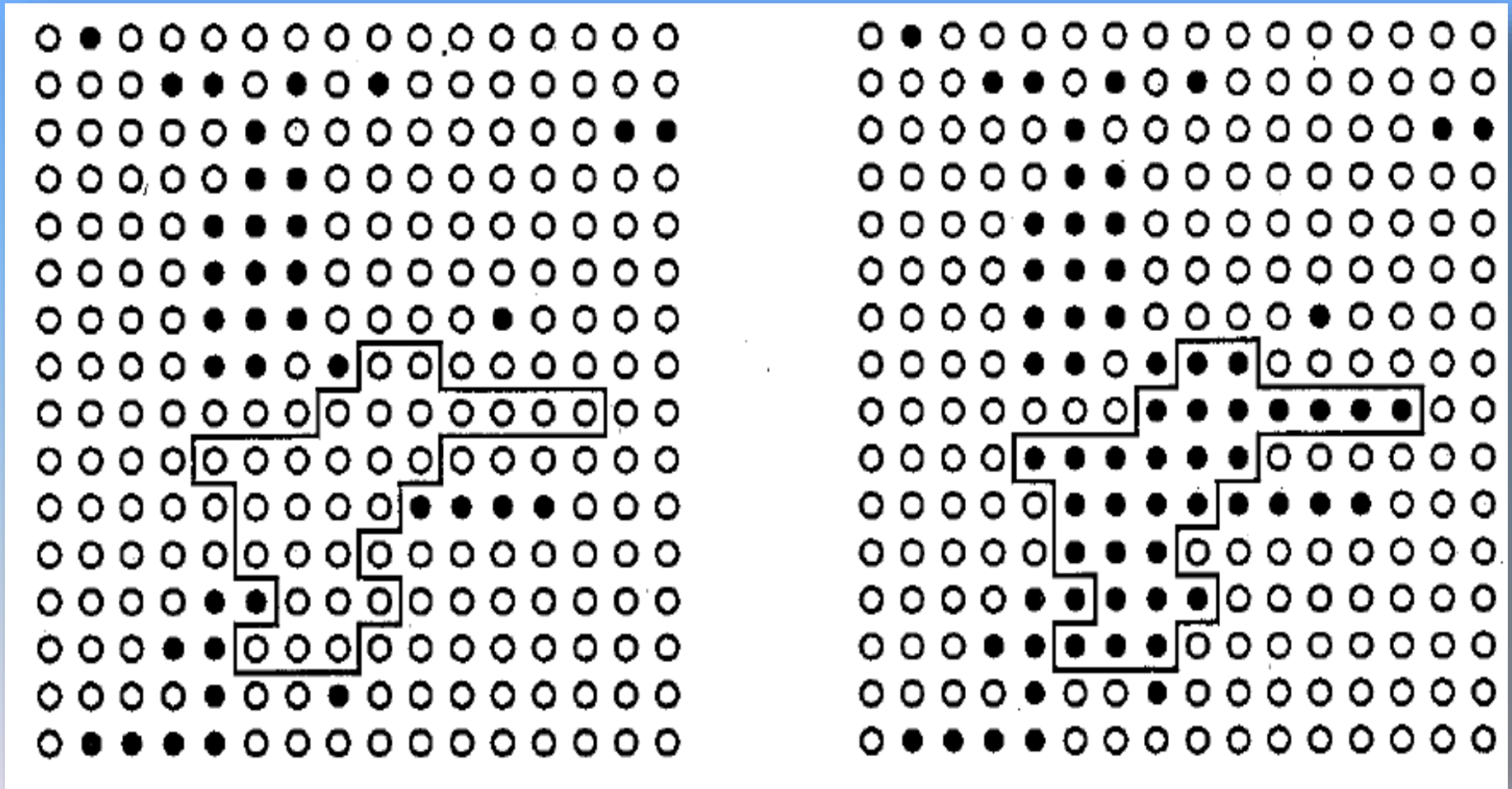
Ο αλγόριθμος Wolff υλοποιείται συνοπτικά στα παρακάτω βήματα ως εξής:

1. Επιλέγουμε με ομοιόμορφη πιθανότητα  $p_{seed} = 1/N$  μια πλεγματική θέση που θα είναι ο γεννητορας (seed) του συμπλέγματος (*cluster*). Είναι το πρώτο νέο μέλος του cluster.
2. Επαγωγικά: Για κάθε νέο μέλος του cluster επισκεπτόμαστε τους πλησιέστερους γείτονες του που δεν ανήκουν ήδη στο cluster. Τους προσθέτουμε στα 'νέα μέλη' με πιθανότητα  $P_{add}$ . Το αρχικό spin είναι πια 'παλιό μέλος'.

$$P_{add} = P(S_i, S_j) = 1 - \exp(\min[0, 2J/(k_B T)(e \cdot S_i)(e \cdot S_j)])$$

3. Όταν τελειώσουν τα 'νέα μέλη' η διαδικασία ανάπτυξης του cluster σταματάει.
4. Αλλάζουμε την τιμή του spin κάθε μέλους του cluster.

# Αλγόριθμος Wolff



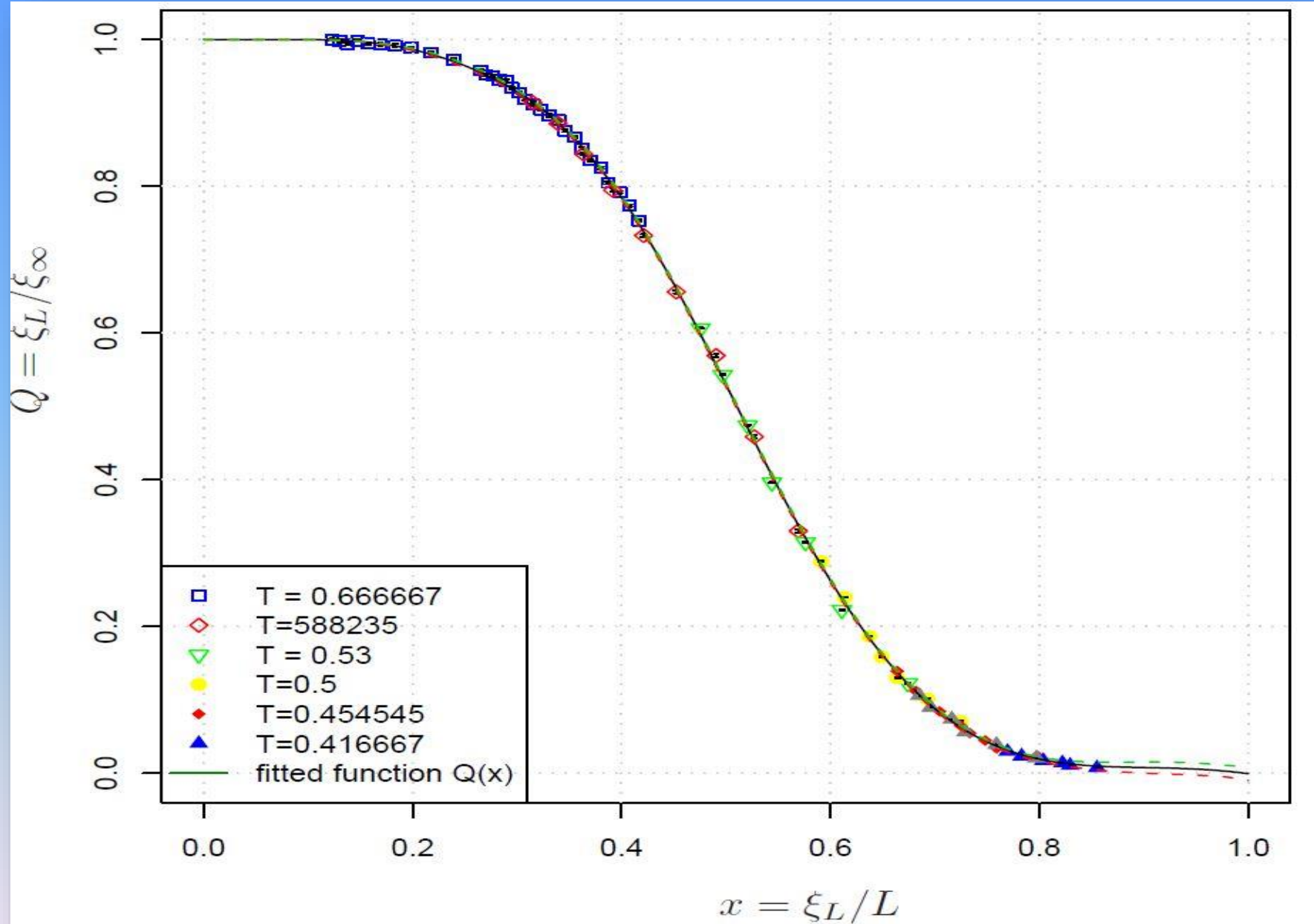
Αναστροφή ενός cluster στο μοντέλο Ising [5]

# Μήκος Συσχετισμού

Χρησιμοποιώντας την εκθετική συνάρτηση

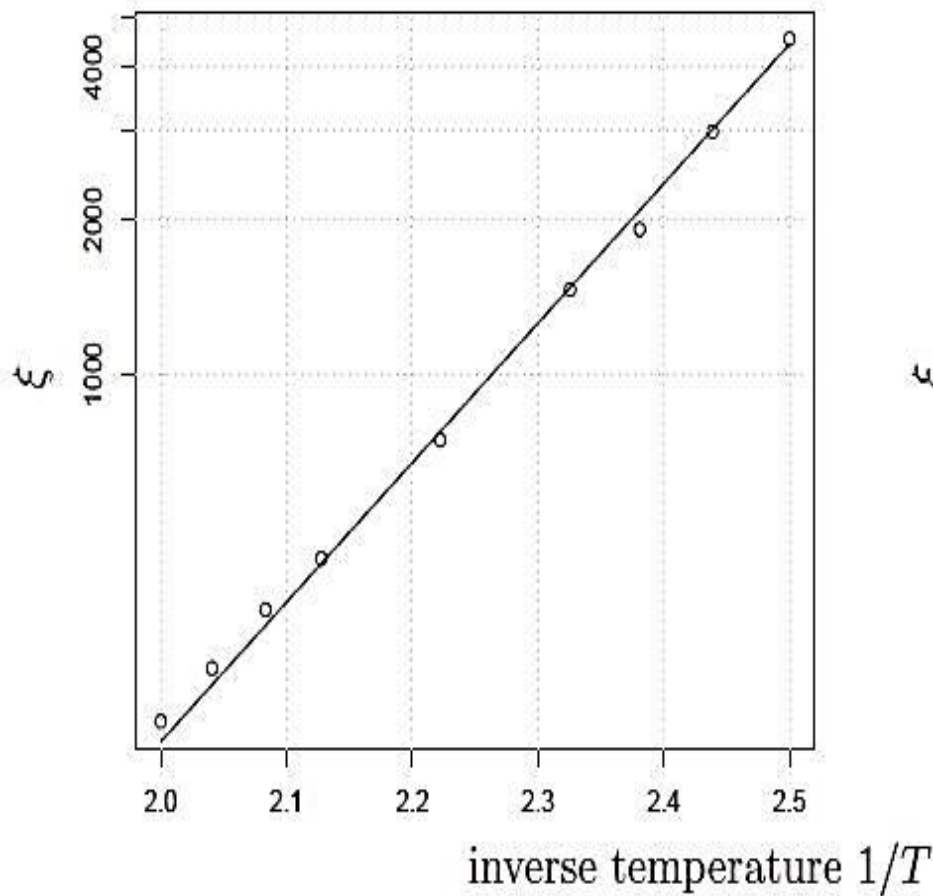
$$Q(x) = 1 + a_1 \exp\left(-\frac{1}{x}\right) + a_2 \exp\left(-\frac{2}{x}\right) + a_3 \exp\left(-\frac{3}{x}\right) + \dots$$

για τον υπολογισμό της γραμμής τάσης της συνάρτησης  $x$  φτιάχνουμε το επόμενο διάγραμμα της συνάρτησης  $Q$  συναρτήσει του  $x$ .

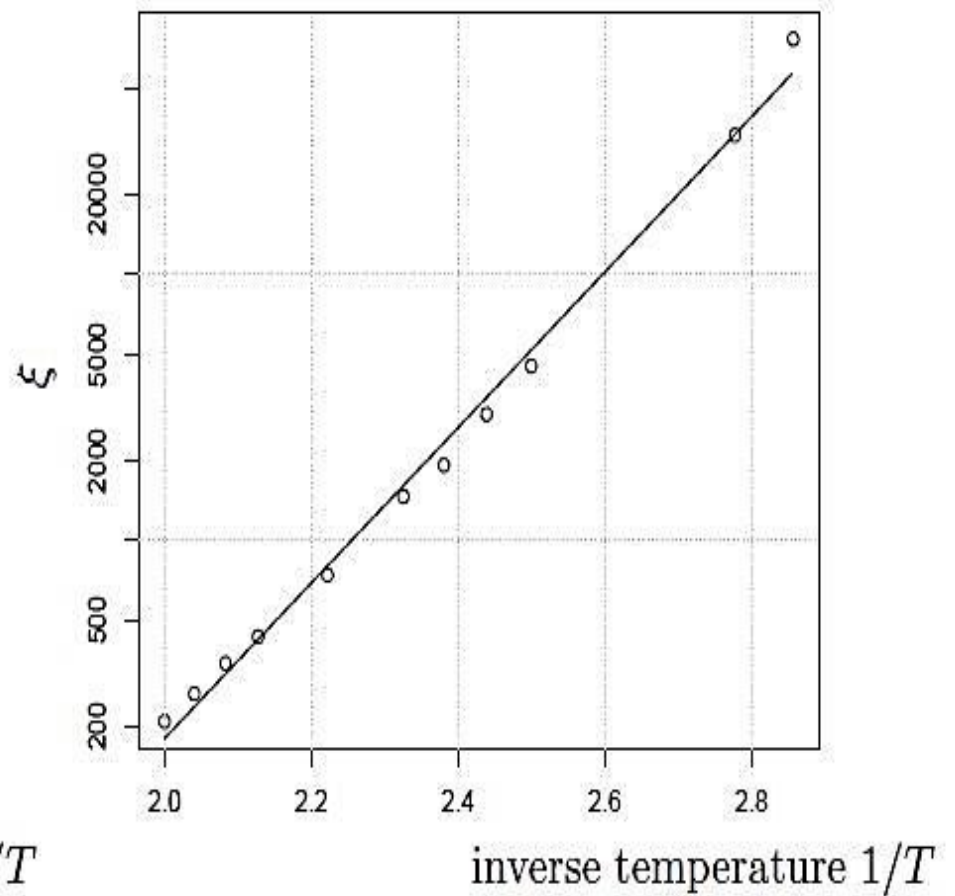


length	temperature	$\xi_L$	error of $\xi_L$	$\xi$	computation time (seconds)	cluster updates
100	0.5	59.1226	0.0950944	208.8692	7570	1000000
100	0.49	61.4012	0.100177	265.4039	7022	1000000
100	0.48	63.7259	0.104739	345.5347	7528	1000000
100	0.47	65.6162	0.10197	434.9305	8134	1000000
100	0.45	69.5925	0.105169	742.1125	6911	1000000
100	0.43	73.9694	0.133509	1462.4487	8109	1000000
100	0.42	75.5442	0.131312	1916.6082	8226	1000000
100	0.41	77.935	0.113375	2976.3249	10398	1000000
100	0.4	80.0327	0.131155	4517.7130	13279	1000000
120	0.36	105.36	0.150598	33204.9478	23510	1440000
100	0.35	91.2382	0.157301	76408.6109	10773	1000000

Ο πίνακας δείχνει τα υπολογισμένα μήκη συσχετισμού  $\xi_L$  με τα αντίστοιχα προβλεπόμενα (*extrapolated*)  $\xi$  για διάφορες θερμοκρασίες. Οι δύο τελευταίες σειρές είναι αποτέλεσμα για  $x \approx 0.9$ . Σε αυτήν την περιοχή το προβλέψιμο  $\xi$  είναι μάλλον αναξιόπιστο καθώς τα σφάλματα της συνάρτησης προσαρμογής συσσωρεύονται στην μέθοδο Kim. [7]



(a)



(b)

Το προβλεπόμενο μήκος συσχετισμού  $\xi$  συναρτήσει της θερμοκρασίας (κύκλοι) και της θεωρητικής τιμής  $\xi \propto \exp\left(\frac{2\pi J}{k_B T}\right)$ . (b) Η πρόβλεψη για μεγαλύτερες θερμοκρασίες με  $\log \xi = a_1 + a_2 \beta$  όπου  $a_1 = -8.24 \pm 0.41$  και  $a_2 = 6.72 \pm 0.17$  [7]



Σύμφωνα με τους παραπάνω υπολογισμούς, κάθε προσομοίωση για  $\beta > 1.80$  δεν πρέπει να λαμβάνετε υπ' όψιν για τα συμπεράσματα μας καθώς για τα πλέγματα που χρησιμοποιούμε ισχύει  $L < \xi$ .

Χαρακτηριστικότερο παράδειγμα είναι το γράφημα της ειδικής θερμότητας σε σχέση με την θερμοκρασία, όπου βλέπουμε τις «ουρές» μετά την κορυφή, για θερμοκρασίες στις οποίες το μήκος συσχετισμού γίνεται μεγαλύτερο από το πλέγμα.

Στα ίδια συμπεράσματα καταλήγουμε και για τα διαγράμματα της ενέργειας και της μαγνήτισης, οι τιμές των οποίων για θερμοκρασίες μεγαλύτερες από  $\beta > 1.80$  οφείλονται σε φαινόμενα λόγω περασμένου μεγέθους του πλέγματος.



# Asymptotic Scaling

Τέλος, από τα προηγούμενα γραφήματα βλέπουμε να ικανοποιείται μερικώς το φαινόμενο του asymptotic scaling.

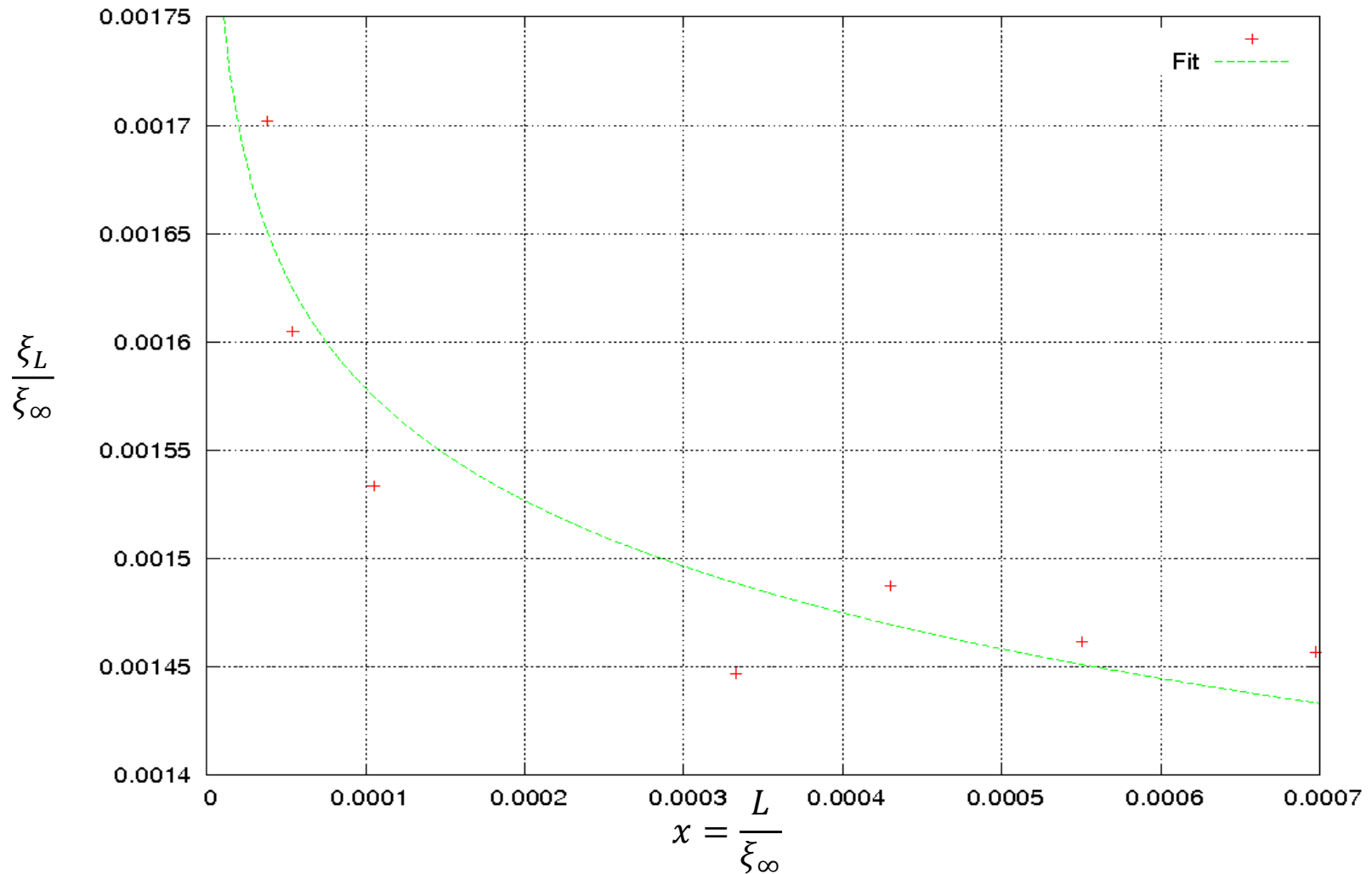
Φτιάχνουμε επίσης τα δύο επόμενα γραφήματα, όπου μελετάμε την συμπεριφορά του  $\frac{\xi_L}{\xi_\infty}$  συναρτήσει του  $\frac{L}{\xi_\infty}$  και της απόκλισης του μήκους συσχετισμού (*correlation length defect*)  $\delta_\xi$  συναρτήση του  $\beta$ .

Η απόκλιση του μήκους συσχετισμού ορίζεται αν διαιρέσουμε το μήκος συσχετισμού από την θεωρητική τιμή, δηλαδή

$$\delta_\xi = \beta e^{-2\pi\beta\xi}$$

και για να ικανοποιείται το asymptotic scaling θα πρέπει το  $\delta_\xi$  να πηγαίνει σε μια σταθερή τιμή καθώς το  $\beta \rightarrow \infty$ .

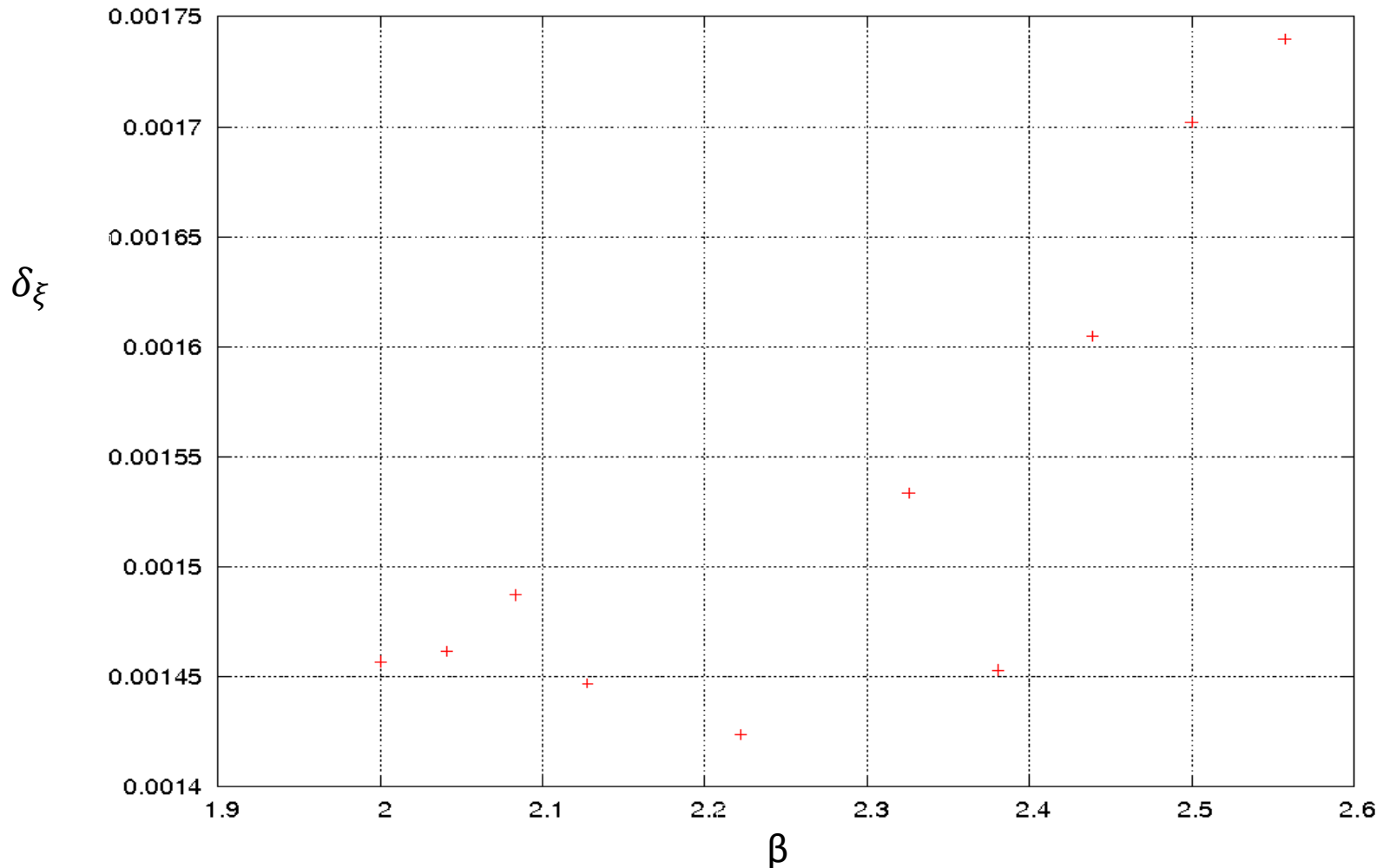
# Asymptotic Scaling



# Asymptotic Scaling

Παρατηρούμε ότι στις υψηλές θερμοκρασίες (μικρά  $\beta$ ) και άρα μικρά μήκη συσχετισμού  $\xi_L$  ο λόγος  $\frac{\xi_L}{\xi_\infty}$  είναι μικρός, υποδεικνύοντας έτσι ότι η συμπεριφορά της asymptotic scaling δεν ικανοποιείται. Καθώς όμως οι θερμοκρασίες μικραίνουν (μεγαλύτερα  $\beta$ ), παρατηρούμε μια εκθετική αύξηση του λόγου  $\frac{\xi_L}{\xi_\infty}$ , συμπεραίνοντας έτσι ότι ικανοποιείται το φαινόμενο του asymptotic scaling και μάλιστα παρατηρούμε ότι το μετρήσιμο μήκος συσχετισμού  $\xi_L$  αυξάνεται γρηγορότερα από την θεωρητική τιμή  $\xi_\infty$ . Το φαινόμενο αυτό φαίνεται καλύτερα στο επόμενο γράφημα, όπου παρατηρούμε μια διακύμανση της τιμής του  $\delta_\xi$  γύρω από μια σταθερή τιμή για θερμοκρασίες  $2 < \beta < 2.4$  (ικανοποιείται η asymptotic scaling) ενώ για μεγαλύτερες τιμές του  $\beta$  η απόκλιση μεγαλώνει.

# Asymptotic Scaling



Η απόκλιση του μήκους συσχετισμού συναρτήσει της θερμοκρασίας.

# Asymptotic Scaling

Το φαινόμενο της asymptotic scaling συμπεριφοράς μελετάται και για την περίπτωση της μαγνητικής επιδεκτικότητας.

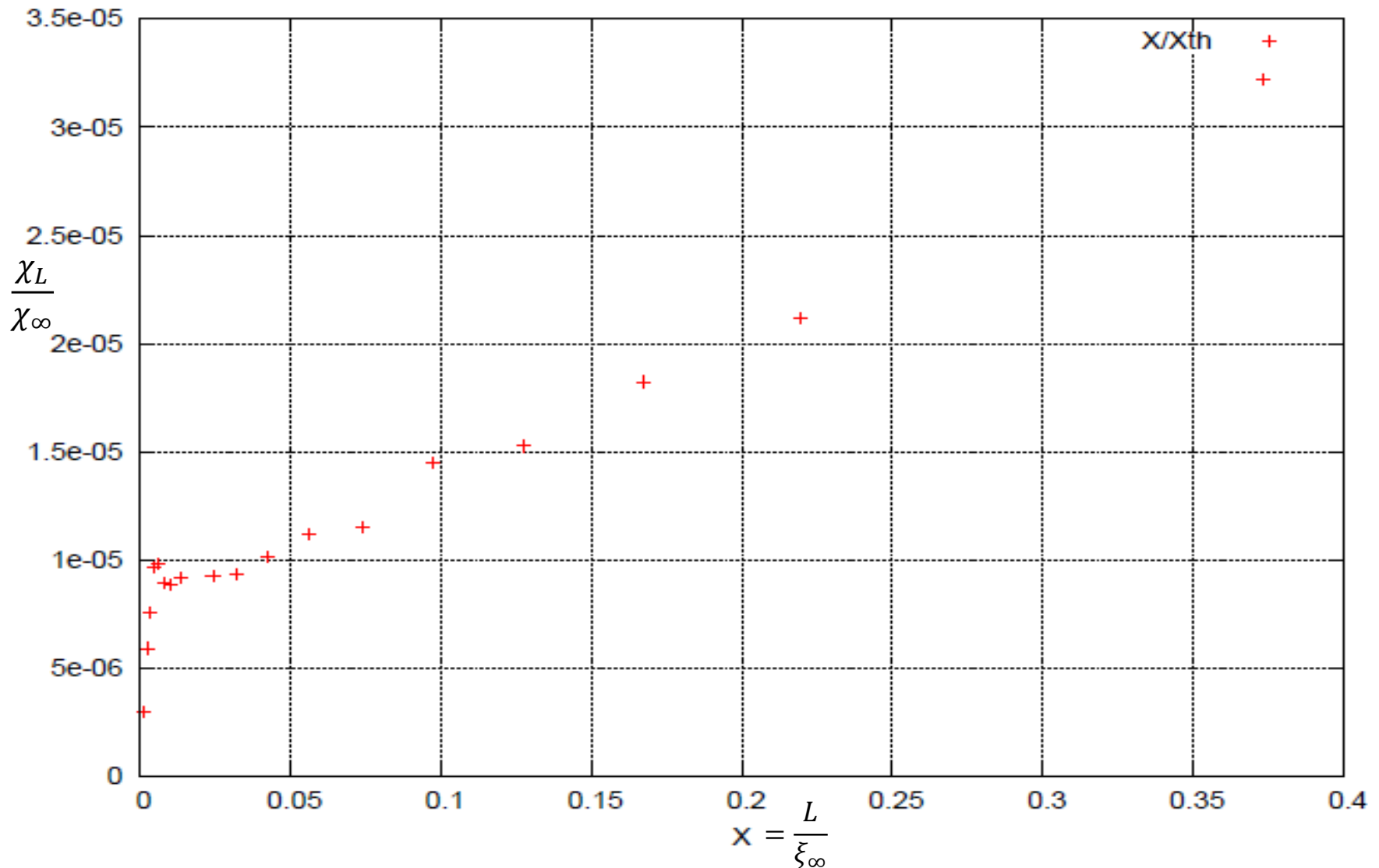
Η θεωρητική τιμή της μαγνητικής επιδεκτικότητας, υπολογισμένη με την βοήθεια της θεωρίας διαταραχών (*perturbation theory*) δίνεται από τον τύπο [18]

$$\chi_{\infty} = \frac{e^{4\pi\beta}}{\beta^4}$$

Για να ερευνήσουμε την ύπαρξη της asymptotic scaling συμπεριφοράς φτιάχνουμε το αντίστοιχο διάγραμμα των λόγων της μαγνητικής επιδεκτικότητας που υπολογίσαμε στην εργασία προς τις θεωρητικές τιμές  $\frac{\chi_L}{\chi_{\infty}}$  συναρτήσει του  $\chi = \frac{L}{\xi_{\infty}}$  και το γράφημα της απόκλισης η οποία για την περίπτωση της μαγνητικής επιδεκτικότητας υπολογίζεται από τον τύπο [15]

$$\delta_{\chi} = 2 \times 10^5 \beta^4 e^{-4\pi\beta} \chi$$

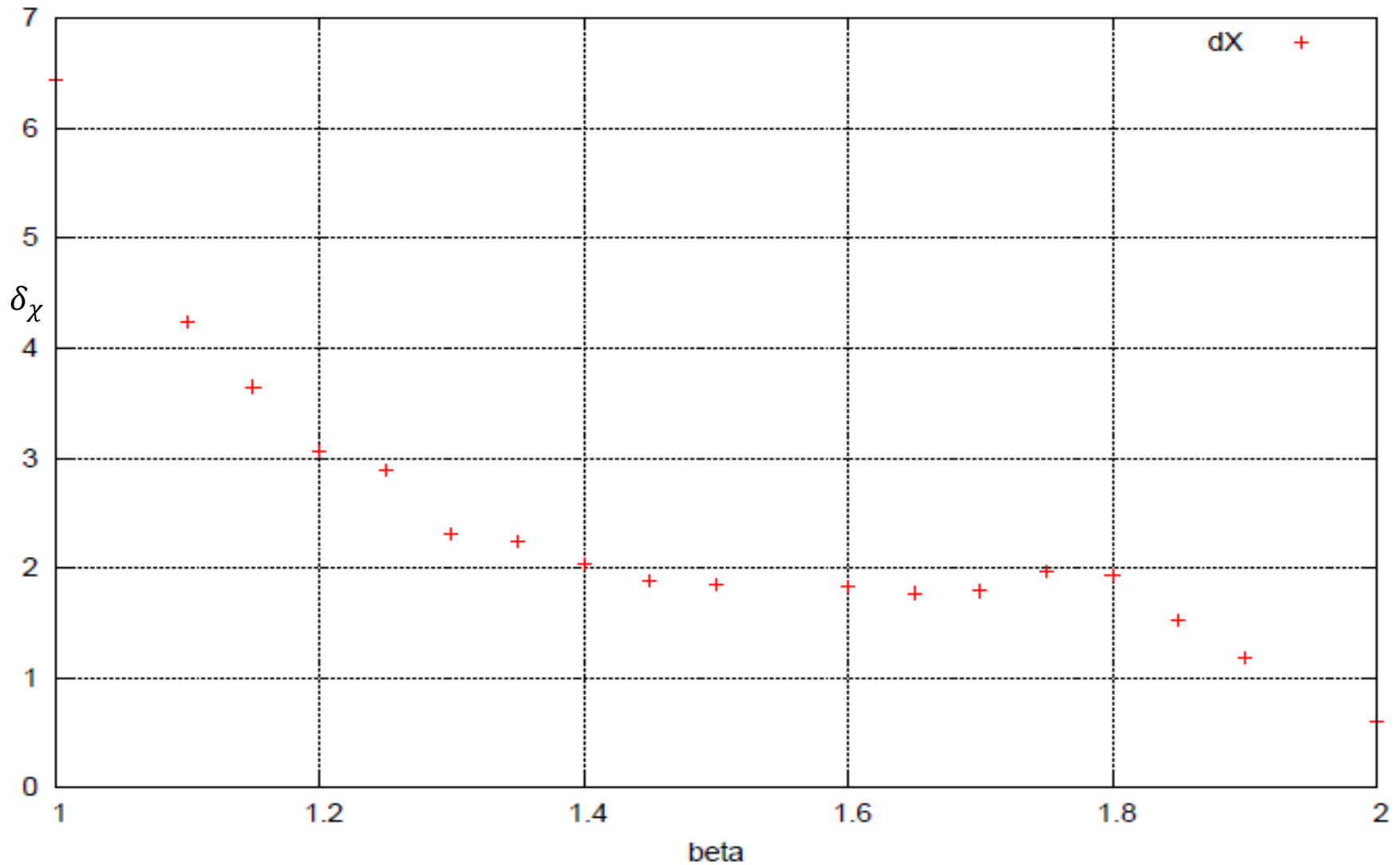
# Asymptotic Scaling



Η συμπεριφορά του λόγου  $\frac{\chi_L}{\chi_\infty}$ .

# Asymptotic Scaling

Susceptibility Defect



# Asymptotic Scaling

Από τα παραπάνω διαγράμματα παρατηρούμε ότι η μαγνητική επιδεκτικότητα φαίνεται να ακολουθεί την asymptotic scaling συμπεριφορά για μικρές θερμοκρασίες (για μικρότερα  $X$ ), και συγκεκριμένα για θερμοκρασίες  $1.4 < \beta < 1.8$  παρατηρούμε σταθερή τιμή στο γράφημα της απόκλισης, το οποίο δείχνει την συμφωνία των τιμών που υπολογίσαμε με τις θεωρητικές τιμές της σχέσης. Για θερμοκρασίες πέρα της τιμής  $\beta = 1.80$ , τα αποτελέσματα μας και πάλι ξεφεύγουν από τις αναμενόμενες τιμές, λόγω της ύπαρξης των φαινομένων πεπερασμένου μεγέθους και δεν πρέπει να λαμβάνονται υπ' όψιν.



# Συμπεράσματα

Η μελέτη μας στο μοντέλο Heisenberg με την βοήθεια της υπολογιστικής φυσικής και πιο συγκεκριμένα με την χρήση των μεθόδων Monte Carlo, μας έδειξε ότι το μοντέλο

Δεν παρουσιάζει μετάβαση φάσης για τις τιμές θερμοκρασιών που μπορούμε να προσομοιώσουμε και να έχουμε σωστά αποτελέσματα ( $\beta < 1.80$ )

Σε αυτό το συμπέρασμα μας οδήγησαν τα ιστογράμματα της μαγνήτισης και της ενέργειας τα οποία παρουσιάζουν μια κορυφή, συνεχής μετάβαση φάσης, αλλά χωρίς να πραγματοποιείται στο εύρος θερμοκρασιών μια φάση τάξης. Επίσης σε αυτό συμβάλουν και οι γραφικές παραστάσεις της μαγνήτισης, της ενέργειας, της ειδικής θερμότητας και της μαγνητικής επιδεκτικότητας οι οποίες δεν παρουσιάζουν καμία ασυνέχεια.

Ακόμη η μέθοδος για τον υπολογισμό της κρίσιμης θερμοκρασίας με την μέθοδο της ροπής 4<sup>ης</sup> τάξης (*Binder*) δεν μπόρεσε να μας προσδιορίσει την κρίσιμη θερμοκρασία, ενισχύοντας πάλι την άποψη για την μη ύπαρξη μετάβασης φάσης.

# Συμπεράσματα

Στη συνέχεια με την μέθοδο Kim δείξαμε ότι μπορούμε να προσδιορίσουμε τις τιμές μεγεθών όπως το μήκος συσχετισμού για θερμοκρασίες ή πλέγματα τα οποία δεν είναι προσβάσιμα από τις συνήθεις πρακτικές υπολογισμού.

Έτσι μελετήσαμε το μήκος συσχετισμού  $\xi$ , το οποίο φαίνεται να ακολουθεί τις θεωρητικές προβλέψεις της asymptotic scaling θεωρίας για θερμοκρασίες μεταξύ  $2 < \beta < 2.4$ .

Τέλος βλέπουμε ότι και η μαγνητική επιδεκτικότητα φαίνεται να ικανοποιεί τις προβλέψεις της asymptotic scaling συμπεριφοράς και μάλιστα σε μεγαλύτερες θερμοκρασίες από την περίπτωση του μήκους συσχετισμού.

# Βιβλιογραφία

- [1]. Σημειώσεις Υπολογιστικής Φυσικής, Μια Εισαγωγή στις Προσομοιώσεις Monte Carlo στη Στατιστική Φυσική, Κωνσταντίνος Ν. Αναγνωστόπουλος, 2010
- [2]. Markov Chain Monte Carlo Simulations and Their Statistical Analysis, Bernd A. Berg, 2004
- [3]. Monte Carlo Simulation in Statistical Physics An Introduction, K. Binder, D.W. Heermann, 2002
- [4]. A Guide to Monte-Carlo Simulations in Statistical Physics, David P. Landau & Kurt Binder, 2009
- [5]. Monte Carlo Methods in Statistical Physics, M. E. J. Newman & G.T. Barkema, 2002
- [6]. Kim, J. and de Souza A. J. F. and Landau, D.P. Numerical computation of finite size scaling functions: An alternative approach to finite size scaling., 1996, Phys. Rev. E, Vol 54, Number 3, Pages 2291-2297
- [7]. Correlation Length of the 2D Classical Heisenberg Model, S. Walter, ETH Zurich, CH, May 2000
- [8]. Group Theory and its Physical Applications, Chicago Lectures in Physics, L.M. Falicov, June 1966

- [9]. Στοιχειώδεις διαφορικές εξισώσεις και προβλήματα συνοριακών τιμών, William E. Boyce, Richard C. DiPrima, 1999
- [10]. Theory of Magnetism, International Max Planck Research School for Dynamical Processes in Atoms, Molecules and Solids Lectures, Carsten Timm, 2011
- [11]. <http://www.phy.duke.edu/~rgb/Research/BCdesc/node2.html>
- [12]. <http://periodictable.com/Properties/A/CuriePoint.html>
- [13]. <http://www.ibiblio.org/e-notes/Perc/xy.htm>
- [14]. [http://www.aldebaran.cz/bulletin/2009\\_47\\_mag.php](http://www.aldebaran.cz/bulletin/2009_47_mag.php)
- [15]. J. Apostolakis, Cl.F.Baillie, G.C.Fox, Investigation of the two-dimensional O(3) model using the overrelaxation algorithm, Physical Review D, Volume 43, Number 8, 15 April 1991.
- [16]. S.Caracciolo, R. G. Edwards, A. Pelisseto, A.D.Sokal, Asymptotic Scaling in the Two-Dimensional O(3)  $\sigma$ -Model at Correlation Length 105, November 5 1994.
- [17]. D. J. Gross, Fr. Wilczek, Asymptotically Free Gauge Theories, Physical Review D, Volume 8, Number 10, 15 November 1973.
- [18]. J.K. Kim, Application of Finite Size Scaling to Monte Carlo Simulations, Physical Review Letters, Volume 70, Number 12, 22 March 1993
- [19]. B. Alles, A. Buonanno, G. Cella, Perturbation theory predictions and Monte Carlo simulations for the 2D O(n) non-linear  $\sigma$ -models, Nuclear Physics B 500 [FS] (1997), 513-543, 3 June 1997.
- [20]. <http://www.zamandayolculuk.com/cetinbal/elementaryparticles.htm>
- [21]. Spontaneous Symmetry Breaking, Lecture Notes 221B, University of Tokyo, 2005
- [22]. [http://en.wikipedia.org/wiki/Phase\\_transition](http://en.wikipedia.org/wiki/Phase_transition)

# Ευχαριστίες

Θα ήθελα να ευχαριστήσω κυρίως τον καθηγητή μου κ. Κωνσταντίνο Αναγνωστόπουλο για την προθυμία με την οποία δέχτηκε να αναλάβει την επίβλεψη της διπλωματικής μου εργασίας και την βοήθεια του καθ' όλη τη διάρκεια της συνεργασία μας.

Επίσης ευχαριστώ όλους τους καθηγητές μου, στη Σ.Ε.Μ.Φ.Ε., οι οποίοι με βοήθησαν και μου έδωσαν τις βάσεις να λειτουργώ με επιστημονική σκέψη.

Τέλος οφείλω να πω ένα μεγάλο ευχαριστώ για την στήριξη, όλα αυτά τα χρόνια, στην οικογένεια μου και στους φίλους μου.