

Αριθμητικές Προσομοιώσεις του
Πρότυπου Ising στις τρεις Διαστάσεις

ΚΟΡΝΑΡΟΣ ΕΥΑΓΓΕΛΟΣ

*Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών
Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο*

Ιούλιος 2013

Περιεχόμενα

1	Βασικές έννοιες	7
1.1	Στατιστική μηχανική	7
1.1.1	Ένα πρώτο σύστημα	8
1.1.2	Διακυμάνσεις-Συσχετισμοί	9
1.2	Μοντέλο Ising	11
2	Αριθμητικές μέθοδοι	13
2.1	Monte Carlo προσομοιώσεις	13
2.1.1	Βασικές αρχές των αλγορίθμων M.C	15
3	Metropolis και Wolff αλγόριθμοι	18
3.1	Metropolis Αλγόριθμος	18
3.2	Υλοποίηση	20
3.3	Δυσκολίες και στροφή σε άλλο αλγόριθμο	27
3.4	Υλοποίηση αλγορίθμου Wolff	30
3.4.1	Υπολογισμός Σφαλμάτων	34
4	Μέθοδοι υπολογισμού	36
4.1	Μία πρώτη μέθοδος	36
4.2	Finite-size scaling	38
4.3	Binder Cumulant	40
4.4	Αποτελέσματα	43
5	Παραρτήματα	55
5.1	Παράρτημα 1	55
5.1.1	<i>init.c</i>	55
5.1.2	<i>options.c</i>	57
5.1.3	<i>include.h</i>	60
5.1.4	<i>end.c</i>	60
5.1.5	<i>main.c</i>	61

5.1.6	<i>drandom.c</i>	62
5.1.7	<i>measure.c</i>	62
5.2	Παράρτημα 2	63
5.2.1	<i>jack.c</i>	65
5.3	Παράρτημα 3	68
6	Βιβλιογραφία	76

Εισαγωγή

Σκοπός αυτής της εργασίας είναι η μελέτη του τρισδιάστατου μοντέλου Ising με τη χρήση αλγορίθμων Monte Carlo και η μελέτη της συμπεριφοράς του στην κρίσιμη περιοχή. Αρχικά θα γίνει μια συνοπτική παρουσίαση των βασικών εννοιών της στατιστικής φυσικής, εποπτική παρουσίαση του μοντέλου Ising και εκτενής ανάλυση των αλγορίθμων και μεθόδων που χρησιμοποιήθηκαν για την ανάλυσή του.

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ:

Αρχικά, θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον επιβλέποντα καθηγητή αυτής της εργασίας, Δρ.Κωνσταντίνο Αναγνωστόπουλο, για την πολύτιμη βοήθειά του στην πραγματοποίηση αυτής της διπλωματικής, για το ενδιαφέρον που έδειξε ώστε να έχουμε το βέλτιστο αποτέλεσμα και για την παρότρυνσή του και τη δυνατότητα που μου έδωσε να μάθω πολλά και καινούρια πράγματα τόσο σε θεωρητικό όσο και σε εφαρμοσμένο επίπεδο, καθώς και για την τεράστια στηριξή του για τη συνέχιση των σπουδών μου στην Αμερική. Στη συνέχεια, θα ήθελα να ευχαριστήσω τους γονείς μου για την ατέρμονη ηθική τους υποστήριξη όλα αυτά τα χρόνια και για την στήριξή τους στο να σπουδάσω αυτό που αγαπώ και στο να πραγματοποιήσω τα μελλοντικά μου σχέδια και τις προσωπικές μου επιδιώξεις. Τέλος, ευχαριστώ όλους τους φίλους που ήταν πάντα στο πλευρό μου, πίστευαν σε μένα και με παρότρυναν σε δύσκολες στιγμές και περιόδους άγχους.

Την πτυχιακή μου εργασία την αφιερώνω στη Λυδία...

Κεφάλαιο 1

Βασικές έννοιες

Στο κεφάλαιο αυτό γίνεται μια επισκόπηση βασικών εννοιών της στατιστικής φυσικής καθώς είναι απαραίτητες για την κατανόηση της μελέτης του μοντέλου Ising.

1.1 Στατιστική μηχανική

Η στατιστική μηχανική κυρίως επικεντρώνεται στον προσδιορισμό των ιδιοτήτων συστημάτων συμπυκνωμένης ύλης. Η κύρια δυσκολία επίλυσης αυτών των συστημάτων είναι ότι αποτελούνται από τεράστιο αριθμό κομματιών, συνήθως άτομα ή μόρια, τα οποία παρόλο που συνήθως είναι παρομοίου ή και του ίδιου τύπου και υπακούνε σε απλές εξισώσεις κίνησης που μπορούν να εκφραστούν εύκολα, όταν πρόκειται για το σύστημα στην ολότητα του, τότε το μέγεθος του συνολικού προβλήματος το τρέπει αδύνατο να λυθεί μαθηματικά. Αρκούν μερικά σωστά ορισμένες χονδροειδείς ιδιότητες (bulk properties) του συστήματος για να μας δώσουν τις χρήσιμες φυσικές πληροφορίες για το σύστημα.

Στην περίπτωση μας θα κάνουμε τις, όχι ιδιαίτερα περιοριστικές, υποθέσεις ότι το σύστημά μας περιγράφεται από διακριτές καταστάσεις που μπορούν να απαριθμηθούν μέσα σε ένα σύνολο $\{\mu\}$ με αντίστοιχες ενέργειες $0 < 1 \dots < \mu < \dots$

Αντί να επικεντρωθούμε στην εύρεση της ακριβούς λύσης, χειριζόμαστε τις πιθανότητες του συστήματος όταν βρίσκεται σε μια, ή σε μια άλλη κατάσταση. Για μεγάλα συστήματα κάτι τέτοιο είναι πολύ χρήσιμο καθώς όλες οι πιθανές συμπεριφορές του συστήματος περιλαμβάνονται σε ένα μικρό εύρος πιθανοτήτων, στο οποίο με ασφάλεια μπορούμε να πούμε ότι και το πραγματικό σύστημα θα εμφανίσει ανάλογη συμπεριφορά.

1.1.1 Ένα πρώτο σύστημα

Αν θεωρήσουμε λοιπόν ένα θερμοδυναμικό σύστημα το οποίο μπορεί να αλληλεπιδρά με δεξαμενή θερμότητας και βρίσκεται σε μια κατάσταση μ , μπορούμε να ορίσουμε $R(\mu \rightarrow \nu)dt$ την πιθανότητα να βρεθεί στην κατάσταση ν dt αργότερα. Θεωρώντας ότι ο ρυθμός μετάβασης από τη μια κατάσταση στην άλλη είναι χρονοεξαρτώμενος, μπορούμε να τον προσδιορίσουμε για κάθε κατάσταση ν στην οποία μπορεί να φτάσει το σύστημα. Η θεμελιώδεις ποσότητες που μας ενδιαφέρουν είναι τα βάρη $w_\mu(t)$ που μας δίνουν την πιθανότητα το σύστημα να βρεθεί στην κατάσταση μ τη χρονική στιγμή t .

Τα παραπάνω μπορούμε να τα συνοψίσουμε σε μια γενική εξίσωση η οποία δείχνει ότι η μεταβολή του βάρους $w_\mu(t)$ είναι ίση με το ρυθμό που το σύστημα εισέρχεται στην κατάσταση μ από οποιαδήποτε άλλη κατάσταση ν , μείον τον ρυθμό με τον οποίο φεύγει από την κατάσταση μ .

$$\frac{dw_\mu(t)}{dt} = \sum_\nu \{w_\nu(t)R(\nu \rightarrow \mu) - w_\mu(t)R(\mu \rightarrow \nu)\} \quad (1.1)$$

Οι πιθανότητες $w_\mu(t)$ πρέπει να υπακούσουν και στο νόμο πιθανοτήτων για όλα τα t καθώς το σύστημα πρέπει να είναι σε κάποια κατάσταση πάντα.

$$\sum_\nu w_\nu(t) = 1. \quad (1.2)$$

Τα βάρη λοιπόν $w_\mu(t)$ σχετίζονται με τις μακροσκοπικές ιδιότητες ενός συστήματος καθώς όταν ενδιαφερόμαστε για μια ποσότητα Q η οποία παίρνει τιμή Q_μ στην κατάσταση μ , μπορούμε να εκτιμήσουμε το Q την στιγμή t για το σύστημα μας ως

$$\langle Q \rangle = \sum_\mu Q_\mu w_\mu(t). \quad (1.3)$$

Λαμβάνοντας υπ' όψη την εξίσωση (1.1), όταν το σύστημα μας φτάσει μια κατάσταση όπου οι δυο όροι στα δεξιά της εξίσωσης αλληλοαναιρούνται για όλα τα μ , τότε και ο ρυθμός μεταβολής του βάρους θα μηδενιστεί και τα βάρη θα πάρουν σταθερές τιμές. Αυτή χαρακτηρίζεται ως μια κατάσταση ισορροπίας. Τώρα η αναμενόμενη τιμή της ποσότητας Q για το σύστημα σε ισορροπία θα είναι

$$\langle Q \rangle = \sum_\mu Q_\mu p_\mu = \frac{1}{Z} \sum_\mu Q_\mu e^{-\beta E_\mu}, \quad (1.4)$$

όπου $p_\mu = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_\mu}$, οι πιθανότητες κατάληψης ισορροπίας για άπειρο χρόνο t , όπου τα βάρη συγκλίνουν γρήγορα στους αριθμούς αυτούς. Για σύστημα

σε θερμική ισορροπία μπορεί ναδειχθεί ότι αυτές οι πιθανότητες ακολουθούν κατανομή Boltzman όπου

$$Z = \sum_{\mu} e^{-E_{\mu}/kT} \quad (1.5)$$

η συνάρτηση επιμερισμού και k η σταθερά του Boltzman και άρα επιβεβαιώνεται ο τύπος (1.4).

Στη διενέργεια υπολογισμών Monte Carlo για τις ιδιότητες συστημάτων σε ισορροπία η συνάρτηση επιμερισμού (1.4) υπολογίζεται πρώτη και στη συνέχεια εκτιμώνται οι άλλες ποσότητες από αυτή. Κωδικοποιεί όλη την πληροφορία για το σύστημα και απαριθμεί με σχετικό βάρος τις δυνατές καταστάσεις του συστήματος.

1.1.2 Διακυμάνσεις-Συσχετισμοί

Ένα από τα πιο σημαντικά τμήματα της στατιστικής μηχανικής είναι οι ιδιότητες των διακυμάνσεων στις παρατηρούμενες ποσότητες. Εκτός από τον υπολογισμό λοιπόν της μέσης τιμής των μετρήσεων, είναι ιδιαίτερα χρήσιμος ο υπολογισμός της τυπικής απόκλισης, η οποία μας δίνει ένα μέτρο της διαφοροποίησης της ποσότητας που μας ενδιαφέρει ανά τον χρόνο. Κάθε παρατηρήσιμη ποσότητα Q έχει στοχαστική συμπεριφορά σύμφωνα με μια κατανομή πιθανότητας $p(Q)$ που προκύπτει από την κατανομή Boltzman. Μια τέτοια κατανομή χαρακτηρίζεται πλήρως από τη μέση τιμή Q και τις ροπές ανώτερης τάξης, δηλ. 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 $n = 2$

$$(\Delta Q)^2 \equiv \langle (Q - \langle Q \rangle)^2 \rangle = \langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2 \quad (1.6)$$

η οποία μας δίνει ένα μέτρο της απόκλισης της Q από τη μέση τιμή της $\langle Q \rangle$. Μπορούμε λοιπόν να υπολογίσουμε τις διακυμάνσεις για χρήσιμες θερμοδυναμικές ποσότητες από τη συνάρτηση επιμερισμού (1.4) και της (1.6).

Για την ενεργεία εύκολα καταλήγουμε στην σχέση

$$\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 k\beta^2 = C \quad (1.7)$$

όπου $\beta = \frac{1}{kT}$ και C η ειδική θερμότητα, που μας δίνει το μέγεθος της διακύμανσης σε σχέση με μια θερμότητα C .

Στην περίπτωση τώρα που εφαρμόσουμε στο σύστημα μας ένα μαγνητικό πεδίο B η Χαμιλτονιανή θα γίνει $H = E - BM$ και η συνάρτηση επιμερισμού

$Z = \sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu} + \beta B M_{\mu}}$ και από τις παραπάνω σχέσεις και για N τον αριθμό των σωματιδίων υπολογίζουμε τη μαγνητική επιδεκτικότητα

$$\chi = \frac{\beta}{N} \left((M - \langle M \rangle)^2 \right) \quad (1.8)$$

που σχετίζεται άμεσα με τις διακυμάνσεις της μαγνήτισης.

Αν προσπαθήσουμε να επεκτείνουμε αυτή την ιδέα, μπορούμε να τι θα γίνει αν αλλάξουμε την τιμή μιας παραμέτρου ή του πεδίου σε μια συγκεκριμένη θέση του συστήματος μας και να δούμε τι επίδραση θα έχει στις μεταβλητές σε άλλες θέσεις. Για λόγους απλότητας θεωρούμε ότι το σύστημά μας βρίσκεται σε χώρο όπου οι δυνατές θέσεις, είναι οι διακριτές θέσεις ενός πλέγματος τις οποίες τις αντιστοιχούμε σε φυσικούς αριθμούς $i = 1, 2, \dots, N$. Για μαγνητικό πεδίο λοιπόν που θα είναι συνάρτηση της θέσης στο πλέγμα B_i και αλληλεπιδρά με το σπιν s_i , η Χαμιλτονιανή γίνεται

$$H = E - \sum_i B_i s_i \quad (1.9)$$

ενώ η μαγνήτιση σε μια θέση πλέγματος θα είναι

$$\langle s_i \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial B_i} \quad (1.10)$$

το οποίο προκύπτει κάνοντας χρήση της συνάρτησης επιμερισμού για τη νέα Χαμιλτονιανή. Για μια διαφοροποίηση του πεδίου B_i σε ένα διαφορετικό σημείο του πλέγματος, μπορούμε να γράψουμε

$$s_{ij} = \frac{\partial \langle x_i \rangle}{\partial B_j} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial^2 \log Z}{\partial B_i \partial B_j} \quad (1.11)$$

Μπορούμε τώρα να ορίσουμε συνάρτηση συσχετισμού δυο σημείων ως

$$G_C^{(2)}(i, j) = \langle (s_i - \langle s_i \rangle)(s_j - \langle s_j \rangle) \rangle = \langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle = \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2 \log Z}{\partial B_i \partial B_j} \quad (1.12)$$

Για ένα σύστημα

$$G_C^{(2)}(i, j) \sim e^{-|x_{i,j}|/\xi} \quad (1.13)$$

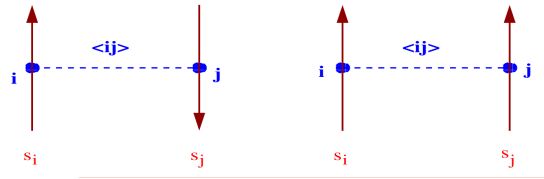
όπου $|x_{i,j}|$ η απόσταση των σημείων i, j , ξ είναι ένα χαρακτηριστικό μήκος για το σύστημα που δίνει ένα μέτρο σε πόση απόσταση υπάρχει ουσιαστικός συσχετισμός μεταξύ των τιμών της μαγνήτισης σε δύο πλεγματικές θέσεις. Στην μελέτη μας εμείς κυρίως θα ασχοληθούμε με σύστημα στο οποίο έχοντας ρυθμίσει τις παραμέτρους από τις οποίες εξαρτάται το ξ να ισχύει $\xi \rightarrow \infty$.

1.2 Μοντέλο Ising

Ένα από τα μοντέλα στατιστικής φυσικής που έχει δαπανηθεί τεράστιος χρόνος μελέτης είναι το μοντέλο Ising και παρόλο που έχει δοθεί μαθηματική λύση για το μονοδιάστατο και δισδιάστατο μοντέλο, το τρισδιάστατο παραμένει ακόμα άλυτο. Οι μέθοδοι επίλυσης του τρισδιάστατου προβλήματος είναι κυρίως υπολογιστικές προσομοιώσεις και επεκτάσεις.

Εμείς θα δώσουμε έμφαση στις τεχνικές Μόντε Κάρλο που χρησιμοποιήθηκαν. Το μοντέλο Ising είναι ένα μοντέλο ενός μαγνήτη. Η κυρία υπόθεση πίσω από το μοντέλο όπως και από πολλά μαγνητικά μοντέλα είναι ότι ο μαγνητισμός δημιουργείται από συνδυασμό μαγνητικών δίπολων πολλών ατομικών σπίν μέσα στο υλικό.

Το μοντέλο χρησιμοποιεί ένα πλέγμα το οποίο μπορεί να είναι οποιασδήποτε γεωμετρίας με ένα μαγνητικό δίπολο η σπίν σε κάθε του πλεγματοειδή θέση. Στο μοντέλο Ising τα σπίν παίρνουν την πιο απλή δυνατή μορφή (s_i) και μπορούν να παίρνουν τιμές ± 1 . Σε ένα πραγματικά μαγνητικό υλικό τα σπίν αλληλεπιδρούν



Σχήμα 1.1: Τα σπιν στο πρότυπο Ising παίρνουν μόνο τιμές 'πάνω' και 'κάτω' και η ενέργεια κάθε συστήματος προκύπτει από τη συνεισφορά κάθε συνδέσμου $\langle ij \rangle$. [20]

και το μοντέλο μας μιμείται κάτι τέτοιο καθώς συμπεριλαμβάνει ως όρους στη χαμιλτονιανή τα γινόμενα $s_i s_j$ των σπίν. Αν θεωρήσουμε και ένα εξωτερικό μαγνητικό πεδίο, η χαμιλτονιανή θα παίρνει τη μορφή

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - B \sum_i s_i \quad (1.14)$$

όπου οι πλεγματοειδείς θέσεις i, j είναι οι κοντινότεροι γείτονες. Οι καταστάσεις του συστήματος Ising είναι διαφορετικά σεντ τιμών που μπορούν να λάβουν τα σπίν. Καθώς κάθε σπίν μπορεί να λάβει δυο τιμές θα υπάρχουν 2^N πιθανές καταστάσεις που μπορεί να βρεθεί το σύστημά μας για ένα πλέγμα με N σπίν.

Η συνάρτηση επιμερισμού του μοντέλου γίνεται

$$Z = \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \dots \sum_{s_N=\pm 1} \exp[\beta J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j + \beta B \sum_i s_i] \quad (1.15)$$

η οποία έχει μια συντομότερη έκφραση

$$Z = \sum_{s_i} e^{-\beta H}. \quad (1.16)$$

με $\beta = \frac{1}{k_B T}$. Υπολογίζοντας λοιπόν αυτό το άθροισμα είναι δυνατόν να υπολογίσουμε όλες τις ποσότητες για τις οποίες μιλήσαμε παραπάνω. Είναι πολύ σημαντικός ο υπολογισμός της μέσης μαγνήτισης $\langle M \rangle$

$$\langle M \rangle = \left\langle \sum_i s_i \right\rangle \quad (1.17)$$

αλλά κυρίως ασχολούμαστε με την μέση μαγνήτιση ανά σπίν $\langle m \rangle$. Για το μοντέλο Ising μπορούν να προσδιοριστούν οι διακυμάνσεις μαγνήτισης και εσωτερικής ενέργειας υπολογίζοντας όπως δείξαμε και παραπάνω τα διαφορικά των συναρτήσεων επιμερισμού (1.10). Έτσι υπολογίζουμε την μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπίν και την ειδική θερμότητα ανά σπίν.

$$\chi = \beta N (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2) \quad (1.18)$$

$$c = \frac{\beta^2}{N} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (1.19)$$

Κεφάλαιο 2

Αριθμητικές μέθοδοι

Για την επίλυση ενός τέτοιου μοντέλου η πιο ξεκάθαρη μέθοδος στην στατιστική φυσική είναι να τοποθετήσουμε το μοντέλο σε ένα πλέγμα πεπερασμένου μεγέθους ώστε η συνάρτηση επιμερισμού να γίνει ένα άθροισμα πεπερασμένων όρων και στη συνέχεια να το υπολογίσουμε. Ας θεωρήσουμε λοιπόν ένα τέτοιο σύστημα 216 σπίν σε ένα κυβικό πλέγμα πλευράς L ($6 \times 6 \times 6$) με την επίδραση μηδενικού εξωτερικού μαγνητικού πεδίου.

Από σύμβαση θεωρούμε και εφαρμόζουμε περιοδικές συνοριακές συνθήκες ώστε να υπάρχουν αλληλεπιδράσεις μεταξύ των σπίν στο σύνορο της σειράς και των σπίν στην απέναντι πλευρά. Με τα σπίν μας να παίρνουν δυο πιθανές τιμές το σύστημα μας των 216 σπίν μπορεί να βρεθεί σε ένα σύνολο 2^N πιθανών καταστάσεων.

2.1 Monte Carlo προσομοιώσεις

Οι επικρατέστερες μέθοδοι για τον υπολογισμό της συνάρτησης επιμερισμού για ένα μοντέλο όπως το Ising για μεγάλα πλέγματα είναι οι προσομοιώσεις Monte Carlo. Η κύρια ιδέα πίσω από την προσομοίωση Monte Carlo είναι η προσομοίωση των τυχαίων θερμικών διαταραχών του συστήματος από τη μια κατάσταση στην άλλη κατά τη διάρκεια ενός πειράματος. Δημιουργούμε ένα μοντέλο στον υπολογιστή μας και το καθορίζουμε να περνάει από μια ποικιλία καταστάσεων ενός συστήματος με τέτοιο τρόπο ώστε η πιθανότητα να είναι σε μια κατάσταση μ για την στιγμή t να είναι ίση με το βάρος $w_\mu(t)$ το οποίο θα είχε αυτή η κατάσταση στο πραγματικό σύστημα. Για να το πετύχουμε αυτό πρέπει να καθορίσουμε τις προσομοιώσεις μας.

Παρόλα αυτά στη μέθοδο αυτή υπεισέρχονται αρκετά στατιστικά λάθη στους υπολογισμούς μας, καθώς δεν περιλαμβάνουμε σε αυτούς όλες τις πιθανές κα-

ταστάσεις (θόρυβος στην συνάρτηση επιμερισμού), ώστε κάθε κατάσταση να εμφανίζεται με την πιθανότητα που της αναλογεί. Διαλέγουμε ένα σετ ρυθμών P για τις μεταβάσεις από τη μια κατάσταση στην άλλη με τέτοιο τρόπο ώστε η λύση της μάλιστα συνάρτησης να ακολουθεί ακριβώς κατανομή Boltzman. Στη συνέχεια χρησιμοποιούμε αυτούς τους ρυθμούς ώστε να επιλέξουμε τις καταστάσεις από τις οποίες το προσομοιωμένο σύστημά μας, περνάει στο πέρας της και παίρνουμε τους υπολογισμούς για τις ποσότητες που μας αφορούν. Το ατού αυτής της μεθόδου είναι ότι χρειαζόμαστε μικρό μέρος των καταστάσεων του συστήματος για να λάβουμε ακριβείς εκτιμήσεις.

Ο κύριος στόχος στις Μόντε Κάρλο προσομοιώσεις ενός θερμικού συστήματος είναι ο υπολογισμός της εκτιμώμενης τιμής Q μιας παρατηρήσιμης ποσότητας Q , όπως αυτή της μαγνήτισης σε ένα μαγνητικό μοντέλο όπως το Ising. Όπως δείξαμε και προηγουμένως ο ιδανικός τρόπος είναι να βρούμε τη μέση τιμή όλων των καταστάσεων ενός συστήματος, ζυγίζοντας κάθε μια από αυτές με τη δική της πιθανότητα Boltzman άλλα μόνο για μικρά συστήματα.

$$\langle Q \rangle = \sum_{\mu} p_{\mu} Q_{\mu} = \frac{\sum_{\mu} Q_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}}{\sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}} \quad (2.1)$$

Σε μεγάλα συστήματα, η καλύτερη δυνατή προσέγγιση, είναι να υπολογίσουμε το μέσο όρο κάποιου υποσυνόλου των καταστάσεων. Οι Μόντε Κάρλο μέθοδοι δουλεύουν επιλέγοντας τυχαία ένα υποσύνολο καταστάσεων από μια κατανομή πιθανοτήτων p_m την οποία επιλέγουμε. Αν για παράδειγμα επιλέξουμε M , τέτοιες καταστάσεις ($\mu_1 \dots \mu_N$) η καλύτερη εκτίμηση της ποσότητας Q θα είναι

$$Q_M = \frac{\sum_{i=1}^M Q_{\mu_i} P_{\mu_i}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{i=1}^M P_{\mu_i}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_i}}} \quad (2.2)$$

όπου Q_M ονομάζεται ο εκτιμητής του Q . Η κύρια ιδιότητα του είναι ότι όσο μεγαλώνει ο αριθμός M των καταστάσεων τόσο πιο ακριβής γίνεται η εκτίμηση μας για το Q ($M \rightarrow \infty$) $Q_M = Q$). Το σημαντικό είναι πως θα επιλέξουμε την κατανομή p_m ώστε να γίνει κάτι τέτοιο. Μια εύκολη εκδοχή είναι να επιλέξουμε όλες τις καταστάσεις με ίση πιθανότητα, δηλαδή να έχουμε όλα τα p_m ίσα. Για κάτι τέτοιο η εξίσωση μας γίνεται

$$Q_M = \frac{\sum_{i=1}^M Q_{\mu_i} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{i=1}^M e^{-\beta E_{\mu_i}}}. \quad (2.3)$$

Κάτι τέτοιο όμως δεν είναι δυνατόν καθώς για ένα κυβικό σύστημα, από $6 \times 6 \times 6$ Ising σπίν μας δίνει $2^N \sim 10^{65}$ καταστάσεις ενώ ένας τυπικός αριθμητικός υπολογισμός σε υπολογιστή θα μπορούσε να προσομοιώσει περίπου 10^8 καταστάσεις που είναι πολύ μικρό τμήμα των δυνατών καταστάσεων του

συστήματος. Αντιθέτως αν γνωρίζαμε με κάποιο τρόπο ποιες καταστάσεις συνεισφέρουν σημαντικά στο άθροισμα της αρχικής εξίσωσης και μπορούσαμε να πάρουμε το δείγμα μας M μόνο από τέτοιες καταστάσεις και να αγνοήσουμε όλες τις υπόλοιπες θα μπορούσαμε να λάβουμε πολύ καλή εκτίμηση του Q ακόμα και με πολύ μικρό αριθμό όρων. Αυτή είναι και η βασική ιδέα πίσω από τις θερμικές προσομοιώσεις M.C, δηλαδή η τεχνική λήψης των σημαντικών καταστάσεων από ένα μεγάλο αριθμό πιθανοτήτων, κάτι που ονομάζεται σημαντική δειγματοληψία (Important Sampling).

2.1.1 Βασικές αρχές των αλγορίθμων M.C

Όπως είδαμε και παραπάνω ένα σύστημα, δεν κάνει επιλογή όλων των καταστάσεων με την ίδια πιθανότητα αλλά με βάση την κατανομή πιθανοτήτων Boltzman. Αν μπορούσαμε να μιμηθούμε αυτό στις προσομοιώσεις μας, μπορούμε να εκμεταλλευτούμε αυτά τα μικρά εύρη ενέργειας και άλλες ποσότητες ώστε να κάνουμε τις εκτιμήσεις τέτοιων ποσοτήτων πολύ ακριβείς.

Έτσι λοιπόν επιλέγουμε δείγμα καταστάσεων συστημάτων των οποίων η πιθανότητα να εμφανιστούν είναι αναλογική με το βάρος τους Boltzman. Αντί λοιπόν να πάρουμε κάθε κατάσταση N με τέτοιο τρόπο ώστε κάθε κατάσταση του συστήματος να είναι πιθανή να επιλεγεί όσο μια άλλη, τις επιλέγουμε ώστε η πιθανότητα για μια κατάσταση μ να επιλεγεί να είναι $p_\mu = Z^{-1}$. Τότε η εκτίμηση για το Q γίνεται η απλοποιημένη

$$Q_M = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M Q_{\mu_i}. \quad (2.4)$$

Το πιο σημαντικό μέρος της προσέγγισης μας τώρα είναι πως επιλέγουμε καταστάσεις έτσι ώστε κάθε μια να εμφανίζεται με τη σωστή πιθανότητα της Boltzman. Πρέπει να αναλυθεί λοιπόν πως οι M.C προσομοιώσεις δημιουργούν ένα ικανό τυχαίο σετ καταστάσεων με βάση την κατανομή πιθανοτήτων Boltzman.

Αλυσίδες Μαρκόβ και δομή των Μόντε Κάρλο

Σχεδόν όλοι οι αλγόριθμοι M.C χρησιμοποιούν διαδικασίες Μαρκόβ σαν την μηχανή δημιουργίας τέτοιων καταστάσεων. Μια διαδικασία Μαρκόβ για μας είναι ένας μηχανισμός κατά τον οποίο σε ένα δεδομένο σύστημα σε μια κατάσταση μ , δημιουργεί μια κατάσταση ν χωρίς να δημιουργεί την ίδια κατάσταση ν κάθε φορά. Η πιθανότητα δημιουργίας της κατάστασης ν λέγεται πιθανότητα μετάβασης ($P(\mu \rightarrow \nu)$) και για μία πραγματική διαδικασία Μαρκόβ όλες οι πιθανότητες μετάβασης είναι αναγκαίο να ικανοποιούν 3 συνθήκες.

1. Να μην διαφοροποιούνται με το πέρασμα του χρόνου
2. Να εξαρτώνται μόνο από τις ιδιότητες των τωρινών καταστάσεων μ και ν και όχι από άλλες καταστάσεις στις οποίες έρχεται το σύστημα
3. Οι πιθανότητες μετάβασης πρέπει να ικανοποιούν την $\sum_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu) = 1$

Στις Μ.Σ προσομοιώσεις χρησιμοποιούμε επανειλημμένα διαδικασίες Μαρκόβ ώστε να δημιουργήσουμε μια αλυσίδα Μαρκόβ καταστάσεων. Ξεκινώντας με μια κατάσταση μ , χρησιμοποιούμε αυτή τη διαδικασία για να δημιουργήσουμε μια κατάσταση ν την οποία χρησιμοποιούμε για να δημιουργήσουμε μια κατάσταση λ και ούτω καθ' εξής.

Αν λοιπόν μια διαδικασία Μαρκόβ τρέξει για αρκετό χρόνο $t \rightarrow \infty$ ξεκινώντας από οποιαδήποτε κατάσταση του συστήματος μπορεί να δημιουργήσει τελικά καταστάσεις που εμφανίζονται με πιθανότητα που ακολουθεί την κατανομή Boltzman. Για να βρεθεί το σύστημα σε κατάσταση ισορροπίας στην κατανομή p_m οι πιθανότητες μετάβασης πρέπει να ικανοποιούν τη σχέση

$$\sum_{\nu} p_{\mu} P(\mu \rightarrow \nu) = \sum_{\mu} p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu) \quad (2.5)$$

Αυτό σημαίνει ότι ο ρυθμός με τον οποίο το σύστημα μεταβαίνει από την κατάσταση μ σε κάποια άλλη είναι ίσος με το ρυθμό με τον οποίο το σύστημα μεταβαίνει στην κατάσταση μ από κάποια άλλη. Μια ικανή συνθήκη η οποία όταν ικανοποιείται από τις πιθανότητες μετάβασης, είναι δυνατόν να δείξει κανείς ότι το σύστημα αργά ή γρήγορα θα φτάσει σε θερμική ισορροπία είναι

$$p_{\mu} P(\mu \rightarrow \nu) = p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu) \quad (2.6)$$

από την οποία για την κατανομή κανονικής συλλογής (Boltzman) έχουμε

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{p_{\nu}}{p_{\mu}} = e^{-\beta(E_{\nu} - E_{\mu})} \quad (2.7)$$

Καθώς η εξίσωση (2.7) έχει πολλές λύσεις, η επιλογή εκείνης που μας χρειάζεται εξαρτάται από την αποδοτικότητα σε ένα συγκεκριμένο πρόβλημα. Μερικές λύσεις είναι οι παρακάτω:

$$P(\mu \rightarrow \nu) = A e^{-\frac{1}{2}\beta(E_{\nu} - E_{\mu})} \quad (2.8)$$

$$P(\mu \rightarrow \nu) = A \frac{e^{-\beta(E_{\nu} - E_{\mu})}}{1 + e^{-\beta(E_{\nu} - E_{\mu})}} \quad (2.9)$$

$$P(\mu \rightarrow \nu) = A \begin{cases} e^{-\beta(E_{\nu} - E_{\mu})} & (E_{\nu} - E_{\mu}) > 0 \\ 1 & (E_{\nu} - E_{\mu}) \leq 0 \end{cases} \quad (2.10)$$

Οι σταθερές A πρέπει να επιλέγονται κατάλληλα ώστε

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

η οποία μας δίνει μεγάλη ελευθερία στην επιλογή των πιθανοτήτων μετάβασης καθώς στην πράξη οι $P(\mu \rightarrow \nu)$ σπάνε σε δυο κομμάτια,

$$P(\mu \rightarrow \nu) = g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu) \quad (2.11)$$

τα οποία αντιστοιχούν σε διακριτά βήματα στον αλγόριθμό. Η πιθανότητα $g(\mu \rightarrow \nu)$ είναι η πιθανότητα επιλογής (transition probability) της κατάστασης ν όταν το σύστημα βρίσκεται στην κατάσταση μ . Το πρώτο βήμα δηλαδή είναι να επιλέξουμε μια κατάσταση $\nu = \mu$ με πιθανότητα $g(\mu \rightarrow \nu)$. Το δεύτερο βήμα είναι να επιλέξουμε με πιθανότητα $A(\mu \rightarrow \nu)$ αν το σύστημα θα μεταβεί στην κατάσταση ν . Αν η απάντηση είναι όχι, τότε παραμένουμε στην κατάσταση μ . Με τον τρόπο αυτό ικανοποιείται η σχέση $P(\nu \rightarrow \mu) = 1 - \sum_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu)$.

Οι πιθανότητες $A(\mu \rightarrow \nu)$ ονομάζονται λόγιοι αποδοχής. Ο στόχος μας επικεντρώνεται στην εύρεση αλγόριθμου τέτοιου ώστε οι πιθανότητες επιλογής να δίνουν τους μέγιστους δυνατούς λόγους αποδοχής για καταστάσεις ν ασυσχέτιστες κατά το μέγιστο δυνατόν από την κατάσταση μ . Ιδανική περίπτωση είναι να έχω $A(\mu \rightarrow \nu) = 1$ για όλα τα ν για τα οποία $g(\mu \rightarrow \nu) > 0$. Αυτό συμβαίνει για παράδειγμα στους cluster αλγόριθμους συστημάτων σπίν (λ.χ. πρότυπα Ising, Potts) όπως ο αλγόριθμος του Wolff που θα μελετήσουμε αργότερα. Έτσι λοιπόν ένα πρόγραμμα Μόντε Κάρλο συνιστάται από τα παρακάτω βήματα:

1. Δημιουργία λογισμικού το οποίο κωδικοποιεί κατάλληλα επιλεγμένες πιθανότητες μετάβασης που ικανοποιούν την (2.7)
2. Επιλογή αρχικής κατάστασης μ_0
3. Αφήνοντας το σύστημα. να εξελιχθεί προσεγγίζοντας την κατανομή Boltzman
4. Συλλέγουμε τα δεδομένα για τις παρατηρήσιμες ποσότητες Q και σταματάμε όταν πετύχουμε επιθυμητή ακρίβεια.

Κεφάλαιο 3

Metropolis και Wolff αλγόριθμοι

3.1 Metropolis Αλγόριθμος

Όπως αναπτύξαμε και σε προηγούμενη ενότητα το μοντέλο Ising είναι ένα απλό μοντέλο ενός μαγνήτη του οποίου τα δίπολα η σπίν τοποθετούνται στις i πλεγματικές θέσεις ενός πλέγματος. Κάθε σπίν παίρνει τιμές ± 1 .

Αν έχουμε λοιπόν N πλεγματικές θέσεις τότε το σύστημα μπορεί να παίρνει 2^N πιθανές καταστάσεις και η ενέργεια κάθε πιθανής κατάστασης δίνεται από τη χαμιλτονιανή

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - B \sum_i s_i, \quad (3.1)$$

όπου J , η αλληλεπίδραση μεταξύ των πλησιέστερων γειτονικών σπίν και B ένα εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Στα πλαίσια αυτής της διπλωματικής, μας ενδιαφέρει η προσομοίωση ενός συστήματος Ising πεπερασμένου μεγέθους χρησιμοποιώντας M.C μεθόδους ώστε να υπολογίσουμε τις τιμές ποσοτήτων όπως αυτές της μαγνήτισης M , ή της ενέργειας σε κάθε δεδομένη θερμοκρασία. Επίσης επισημαίνεται ότι χρησιμοποιήθηκε μηδενικό μαγνητικό πεδίο για τις προσομοιώσεις για τον προσδιορισμό των σημαντικών ποσοτήτων.

Αρχικά θα ασχοληθούμε με τον αλγόριθμο Metropolis και πως αυτός υλοποιεί τις διαδικασίες για την μελέτη του μοντέλου μας. Αρχικά επιλέγουμε ένα σετ πιθανοτήτων επιλογής $g(\mu \rightarrow \nu)$ μια για κάθε πιθανή μετάβαση από μια κατάσταση σε μια άλλη ($\mu \rightarrow \nu$) και στη συνέχεια επιλέγουμε ένα σετ πιθανοτήτων αποδοχής $A(\mu \rightarrow \nu)$ ώστε η $P(\nu \rightarrow \mu) = 1 - \sum_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu)$ να ικανοποιεί τις συνθήκες ισορροπίας (2.8). Ο αλγόριθμος λειτουργεί με το να

επιλεγεί συνεχώς μια νέα κατάσταση ν και να την δέχεται η να την απορρίπτει τυχαία για την πιθανότητα αποδοχής που έχουμε. Αν η κατάσταση γίνει δεκτή τότε ο υπολογιστής αλλάζει το σύστημα στη νέα κατάσταση ν ενώ αν όχι το αφήνει ως είχε.

Οι ενέργειες του συστήματος σε θερμική ισορροπία παραμένουν σε ένα πολύ μικρο εύρος, δηλαδή το σύστημα μας καταναλώνει την περισσότερη ώρα σε ένα στενού εύρους υποσύνολο καταστάσεων και σπάνια κάνει αλλαγές που αλλάζουν την ενέργεια του συστήματος σημαντικά. Άρα λοιπόν μας ενδιαφέρουν μεταβάσεις σε καταστάσεις των οποίων η ενέργεια δε διαφέρει πολύ από την ενέργεια της παρούσης κατάστασης. Ο πιο απλός τρόπος για το μοντέλο Ising είναι να θεωρήσουμε καταστάσεις οι οποίες διαφέρουν από την παρούσα κατάσταση κατά μια εναλλαγή ενός σπίν (single flip dynamics algorithm). Κάνοντας χρήση αυτής της τεχνικής είμαστε σίγουροι ότι η νέα κατάσταση ν θα έχει ενέργεια E_ν που θα διαφέρει από την κατάσταση μ με ενέργεια E_μ κατά $2J$ για κάθε δεσμό μεταξύ του σπίν που αλλάζουμε και τους γείτονές του.

Για παράδειγμα σε ένα κυβικό πλέγμα κάθε σπίν έχει 6 γείτονες άρα η μέγιστη διαφορά στην ενέργεια θα είναι $12J$. Στον αλγόριθμο Metropolis οι πιθανότητες εκλογής για κάθε πιθανή κατάσταση ν επιλέγονται να είναι ίσες και αρχικά θέτονται να είναι μηδέν. Αν θεωρήσουμε ένα σύστημα με N σπίν, για single flip dynamics υπάρχουν N σπίν που μπορούμε να αλλάξουμε και άρα ν πιθανές καταστάσεις που μπορούμε να φτάσουμε από την κατάσταση μ . Υπάρχουν δηλαδή N μη μηδενικές πιθανότητες εκλογής $g(\mu \rightarrow \nu)$ η κάθε μια εκ των οποίων παίρνει την τιμή

$$g(\mu \rightarrow \nu) = \frac{1}{N}. \quad (3.2)$$

Με βάση αυτές τις πιθανότητες εκλογής η συνθήκη ισορροπίας (2.14) παίρνει τη μορφή

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu)}{g(\nu \rightarrow \mu)A(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}. \quad (3.3)$$

Τώρα πρέπει να επιλέξουμε τους ρυθμούς αποδοχής $A(\mu \rightarrow \nu)$ ώστε να ικανοποιείται η εξίσωση. Μια λύση όπως είδαμε (2.8-2.10) είναι

$$A(\mu \rightarrow \nu) = A_0 e^{-\frac{1}{2}\beta(E_\nu - E_\mu)}. \quad (3.4)$$

Η σταθερά A_0 ακυρώνεται και μπορούμε να επιλέξουμε οποιαδήποτε τιμή με περιορισμό $A(\mu \rightarrow \nu)$ να μην ξεπερνάει το 1. Για ένα τρισδιάστατο πλέγμα λόγου χάρη η μέγιστη διαφορά ενέργειας ανάμεσα σε δυο καταστάσεις E_ν, E_μ

θα είναι $2 \times z \times J$ όπου $z = 6$ οι πλησιέστεροι γείτονες κάθε σπίν ανά πλεγματική θέση του πλέγματος. Άρα για να ικανοποιείται ότι $A(\mu \rightarrow \nu) < 1$ πρέπει

$$A_0 \leq e^{-\beta z J} \quad (3.5)$$

Για την μεγαλύτερη αποτελεσματικότητα του αλγορίθμου και επιτυχία του πρέπει η πιθανότητα αποδοχής να είναι όσο το δυνατόν μεγαλύτερη και άρα το A_0 να γίνει όσο το δυνατόν μεγαλύτερο, τότε θα έχουμε:

$$A(\mu \rightarrow \nu) = e^{-\frac{1}{2}\beta(E_\nu - E_\mu + 2zJ)}. \quad (3.6)$$

Αν χρησιμοποιούσαμε αυτή την πιθανότητα αποδοχής και κάνουμε προσομοιώσεις Μόντε Κάρλο θα είχαμε ένα δείγμα κατανομής Boltzman ικανοποιητικό. Όμως η προσομοίωση θα ήταν πολύ ανεπαρκής καθώς ο ρυθμός αποδοχής (3.6) θα είναι πολύ μικρός για όλες τις αλλαγές. Γι αυτό τον λόγο αν θεωρήσουμε 2 καταστάσεις μ, ν με την μ να έχει τη χαμηλότερη ενέργεια και την την υψηλότερη $E_\mu < E_\nu$ τότε μεγαλύτερος ρυθμός αποδοχής θα είναι $A(\nu \rightarrow \mu)$ και τον θέτουμε ίσο με 1.

Για να ικανοποιείται πρέπει η (3.3) $A(\nu \rightarrow \mu) = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}$.

Άρα ο πιο αποδοτικός αλγόριθμος θα είναι:

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} & \text{αν } E_\nu - E_\mu > 0 \\ 1 & \text{αλλιως} \end{cases} \quad (3.7)$$

Αν επιλέξουμε δηλαδή μια νέα κατάσταση η οποία έχει ενέργεια μικρότερη η ίση από την παρούσα, μπορούμε πάντοτε να δεχόμαστε τη μετάβαση σε αυτή την κατάσταση. Αν όμως έχει μεγαλύτερη ενέργεια τότε τη δεχόμαστε με πιθανότητα e^β . Αυτός είναι και ο αλγόριθμος Μετρόπολις από τον Μετρόπολις και εφαρμόζεται σε κάθε μοντέλο που χρησιμοποιεί πιθανότητες εκλογής όπως η (3.7).

3.2 Υλοποίηση

Για την υλοποίηση του κώδικα χρησιμοποιήθηκε ο κώδικας του Newman.M , G.Barkeman (Παράρτημα 1) και τροποποιήθηκε κατάλληλα για κυβικά πλέγματα για τις ανάγκες του τρισδιάστατου μοντέλου Ising . Αρχικά χρειαζόμαστε ένα πραγματικό πλέγμα σπίν και ορίζουμε ένα σετ N μεταβλητών (μια σειρά ακεραίων) που μπορεί να πάρουν τις τιμές ± 1 . Εφαρμόζουμε περιοδικές συνοριακές συνθήκες για τη σειρά ώστε να διασφαλίσουμε ότι όλα τα σπίν έχουν

τον ίδιο αριθμό γειτόνων και δεν υπάρχουν σπίν στις ακμές που να έχουν διαφορετικές ιδιότητες.

Στη συνέχεια είναι πολύ σημαντικό να αρχικοποιήσουμε την τιμή της θερμοκρασίας $\beta = \frac{1}{k_B T}$ για την οποία θέλουμε να κάνουμε την προσομοίωση και οι πιο συνηθισμένες καταστάσεις είναι για $\beta = 0$ ή $\beta = \infty$. Για $\beta = \infty$ το μοντέλο Ising θα είναι στη θεμελιώδη κατάστασή του και για μηδενικό μαγνητικό πεδίο υπάρχουν δυο θεμελιώδεις καταστάσεις όπου τα σπίν είναι όλα προσανατολισμένα πάνω ή όλα κάτω ("παγωμένη"). Κάθε ζεύγος σπίν τότε θα συνεισφέρει τη μικρότερη δυνατή ενέργεια $-J$ στη χαμιλτονιανή. Για κάθε άλλη περίπτωση θα υπάρχουν ζεύγη σπίν που συνεισφέρουν $+J$ και άρα η συνολική τιμή θα είναι μεγαλύτερη. Όταν $\beta = 0$ τα σπίν παίρνουν τις τιμές ± 1 με πιθανότητα $1/2$ και η θερμική ενέργεια που είναι διαθέσιμη για τον αναποδογύρισμα των σπίν είναι άπειρα μεγαλύτερη της ενέργεια λόγω αλληλεπίδρασης των σπίν J , και άρα τα σπίν έχουν τυχαίες κατευθύνσεις πάνω και κάτω σε ακαθόριστη μορφή ("Καυτή κατάσταση").

Δεν μας ενδιαφέρει όμως να τρέξουμε προσομοιώσεις για μια θερμοκρασία μόνο, αλλά ένα σετ προσομοιώσεων για ένα εύρος θερμοκρασιών. Σε αυτή την περίπτωση θέτουμε την αρχική και τελική κατάσταση του συστήματος μας για κοντινές θερμοκρασίες και χρησιμοποιούμε βήματα από την αρχική στην τελική. Σε κάθε βήμα μεταβολής της θερμοκρασίας χρησιμοποιούμε τη διάταξη σπίν από την προηγούμενη προσομοίωση έτσι ώστε να βρισκόμαστε γρήγορα στη νέα κατάσταση θερμικής ισορροπίας.

Το πρώτο βήμα της προσομοίωσης είναι να δημιουργήσουμε μια νέα κατάσταση ν . Η νέα κατάσταση πρέπει να διαφέρει από την προηγούμενη για την εναλλαγή διεύθυνσης ενός μόνο σπίν και πρέπει να είναι το ίδιο πιθανή να δημιουργηθεί όσο κάθε άλλη. Στη συνέχεια χρειαζόμαστε να υπολογίσουμε την ενέργεια $E_\nu - E_\mu$ ώστε να εφαρμόσουμε την (3.7). Ο πιο άμεσος τρόπος για να κάνουμε κάτι τέτοιο είναι να αντικαταστήσουμε τις τιμές των s_i (σπίν) στην κατάσταση μ στη χαμιλτονιανή και στη συνέχεια να αλλάξουμε τη διεύθυνση του σπίν και να υπολογίσουμε την E_ν υπολογίζοντας τη διαφορά της με την E_μ .

Από την (3.1) οι όροι που αλλάζουν είναι οι όροι που σχετίζονται με το αναποδογύρισμα του σπίν και άρα η ΔE θα είναι

$$E_\nu - E_\mu = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i^\nu s_j^\nu + J \sum_{\langle ij \rangle} s_i^\mu s_j^\mu = -J \sum_{\langle in, ntok \rangle} s_i^\mu (s_k^\nu - s_k^\mu) \quad (3.8)$$

Το άθροισμα είναι μόνο για τα σπίν i τα οποία έχουν κοντινότερο γείτονα το αναποδογυρισμένο σπίν και δεδομένου ότι αυτά τα σπίν δεν αναποδογυρίζουν μόνο τους έτσι ώστε $s_i^\nu = s_i^\mu$. Αν $s_k^\mu = +1$, αν αλλάξει το σπιν θα έχουμε $s_k^\nu = -1$ και η διαφορά τους $s_k^\nu - s_k^\mu = -2$. Αντιθέτως αν $s_k^\mu = -1$ θα είναι $s_k^\nu = +1$

$s_k^\mu = +2$. Άρα γράφουμε

$$s_k^\nu - s_k^\mu = -2s_k^\mu \quad (3.9)$$

και τελικά

$$E_\nu - E_\mu = 2J \sum_{\langle in.ntok \rangle} s_i^\mu s_k^\mu = 2J s_k^\mu \sum_{\langle in.ntok \rangle} s_i^\mu. \quad (3.10)$$

Ο αλγόριθμος λοιπόν περιλαμβάνει τον υπολογισμό της διαφορά $E_\nu - E_\mu$ η οποία αν είναι μικρότερη του μηδενός δεχόμαστε την αλλαγή του σπίν ενώ αν είναι μεγαλύτερη του μηδενός μπορεί να χρειαστεί να ξαναλλάξουμε το σπίν. Ο αλγόριθμος Μετρόπολις μας λέει να αλλάξουμε το σπίν με πιθανότητα $A(\mu \rightarrow \nu) = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}$ και κάτι τέτοιο γίνεται αρχικά, εκτιμώντας τον ρυθμό αποδοχής A χρησιμοποιώντας την τιμή $E_\mu - E_\nu$ από την εξίσωση (3.10) και στη συνέχεια επιλέγει ένα τυχαίο αριθμό r μεταξύ του μηδενός και του ένα. Αν αυτός ο αριθμός είναι μικρότερος από τον ρυθμό αποδοχής τότε αλλάζουμε το σπίν, αλλιώς το αφήνουμε ως έχει. Αυτός και είναι ο αλγόριθμος και για την υλοποίηση του επαναλαμβάνουμε τα παραπάνω βήματα ξανά και ξανά.

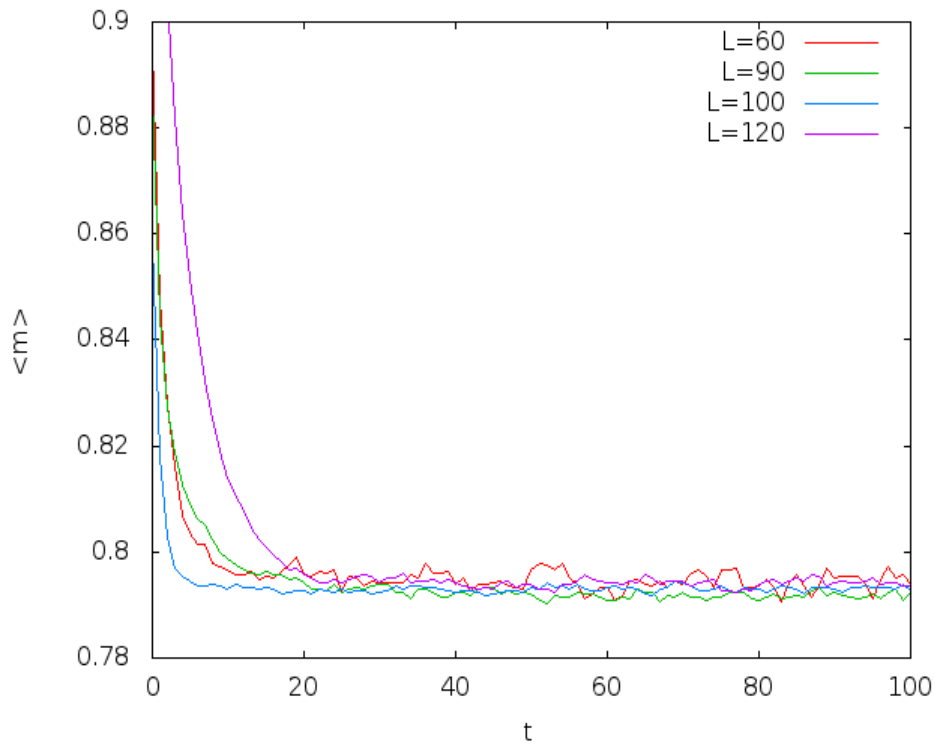
Θερμική ισορροπία

Αυτό που μας ενδιαφέρει αρχικά είναι να φέρουμε το σύστημά μας σε θερμική ισορροπία και για το λόγο αυτό αφήνουμε τον αλγόριθμο να τρέξει για μεγάλο διάστημα. Όπως είδαμε και παραπάνω ένα σύστημα περνάει τον μεγαλύτερο χρόνο σε ένα μικρο υποσύνολο καταστάσεων στον οποίο η εσωτερική ενέργεια και οι άλλες ιδιότητες παίρνουν ένα μικρο εύρος τιμών.

Για να βρούμε μια καλή εκτίμηση για την τιμή ισορροπίας οποιασδήποτε ιδιότητας του συστήματος πρέπει να περιμένουμε μέχρι να βρεθεί σε μια από αυτές τις καταστάσεις, οι οποίες βρίσκονται σε αυτό το μικρο εύρος και θεωρούμε ότι παραμένει στα πλαίσια αυτού του μικρού εύρους για τη συνέχεια των προσομοιώσεων. Ένας καλός τρόπος για να δούμε πότε το σύστημά μας έχει μπει στην θερμική ισορροπία είναι να κάνουμε το γράφημα μιας ποσότητας ενδιαφέροντος όπως για παράδειγμα της μαγνήτισης ανά πλεγματική θέση και να παρατηρήσουμε πότε η τιμή της σταθεροποιείται. Στο διάγραμμα θα φαίνεται στον x άξονα ο χρόνος σε Μόντε Κάρλο βήματα ανά πλεγματικές θέσεις και στον y η μαγνήτιση ανά πλεγματική θέση. Αυτό γιατί όταν έχουμε ολοκληρώσει N βήματα Μετρόπολις για κάθε σπίν στο σύστημα μας, έχουμε ολοκληρώσει ένα πέρασμα ολοκλήρου του πλέγματος.

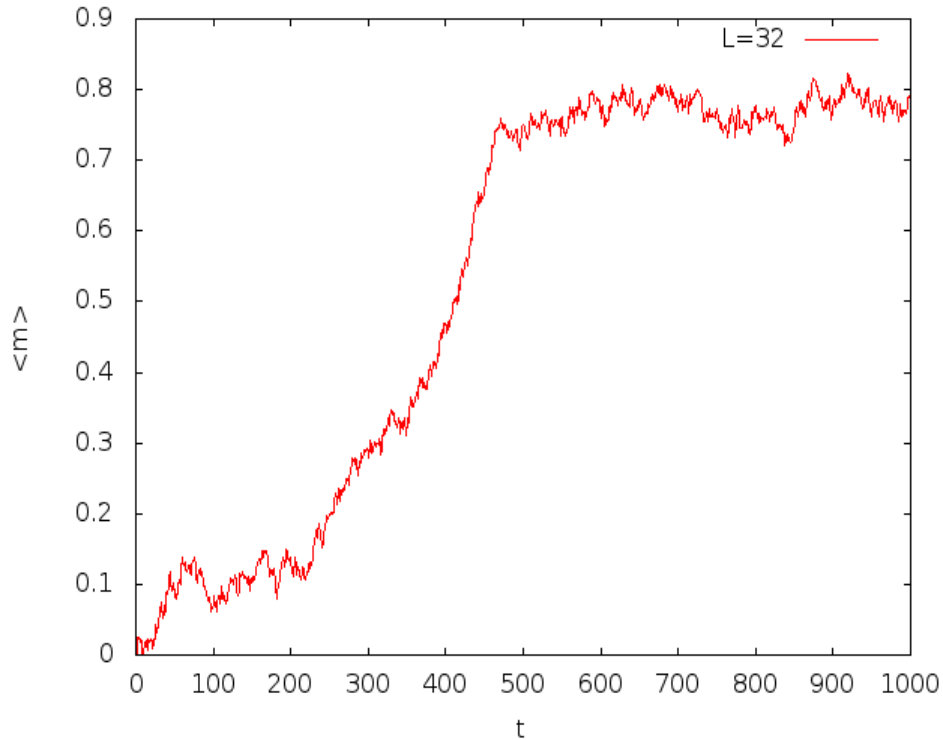
Για να είμαστε σίγουροι για το αποτέλεσμα μας είναι χρήσιμο να ξεκινήσουμε δυο διαφορετικές προσομοιώσεις ξεκινώντας από διαφορετικές καταστάσεις,

διαφορετικά μεγέθη συστημάτων αλλά και αλλάζοντας τη γεννήτρια του τυχαίου αριθμού εξασφαλίζοντας ότι ακολουθείται διαφορετικό μονοπάτι κάθε φορά για την επίτευξη ισορροπίας.



Σχήμα 3.1: Φαίνεται η μαγνήτιση ανά πλεγματική θέση για $\beta = \beta_c = 0.221654$ για $L = 60, 90, 100, 120$ και αρχική κατάσταση του συστήματός μας παγωμένη. Παρατηρούμε ότι η κατάσταση θερμικής ισορροπίας επέρχεται πολύ γρήγορα και ανεξαρτήτως του μεγέθους του συστήματος L .

Όταν πια το σύστημα φτάσει σε ισορροπία, μπορούμε να υπολογίσουμε τις ποσότητες που μας ενδιαφέρουν δηλαδή την ενέργεια και τη μαγνήτιση του συστήματός μας.



Σχήμα 3.2: Εύρεση θερμικής ισορροπίας για σύστημα μεγέθους $L = 32$, με αρχική κατάσταση καυτή. Παρατηρούμε ότι απαιτείται περισσότερος χρόνος για το σύστημα να βρεθεί σε κατάσταση θερμικής ισορροπίας σε σχέση με το χρόνο που χρειάζεται για αρχική κατάσταση παγωμένη. Ακόμα και αν το μέγεθος του συστήματος είναι μικρότερο με εκείνα στο (Σχ.3.1)

Η ενέργεια E_μ της κατάστασης μ μπορεί να υπολογιστεί κατ'ευθείαν από τη χαμιλτονιανή αντικαθιστώντας τις τιμές των σπίν στην σειρά ακεραίων μας. Όμως με τον αλγόριθμο Μετρόπολις υπολογίζουμε διαφορά ενέργειας ΔE για τη μετάβαση από κατάσταση μ στην ν και άρα αν γνωρίζουμε την ενέργεια της κατάστασης μ μπορούμε να υπολογίσουμε την καινούργια ενέργεια όταν αλλάξει το σπίν

$$E_\nu = E_\mu + \Delta E. \quad (3.11)$$

. Για την μαγνήτιση M τώρα όταν το σύστημα είναι στην κατάσταση μ έχει

ολική μαγνήτιση M_μ και υπολογίζεται από το άθροισμα

$$M_\mu = \sum_i s_i^\mu \quad (3.12)$$

. Όμως είναι πολύ καλύτερο να αναλογιστούμε ότι ένα σπίν αλλάζει στον αλγόριθμο μας και άρα η αλλαγή μαγνήτισης από τη μια κατάσταση στην άλλη θα είναι

$$\Delta M = M_\nu - M_\mu = \sum_i s_i^\nu - \sum_i s_i^\mu = s_k^\nu - s_k^\mu = 2s_k^\nu \quad (3.13)$$

. Όπως και με την ενέργεια λοιπόν υπολογίζουμε τη μαγνήτιση

$$M_\nu = M_\mu + \Delta M = M_\mu + 2s_k^\nu \quad (3.14)$$

κάθε φορά που αλλάζουμε ένα σπίν. Για να υπολογιστεί τώρα η εσωτερική ενέργεια και η μαγνητική επιδεκτικότητα αρκεί να βρεθεί η μέση μαγνήτιση και η εκτίμηση της ενέργειας και να διαιρεθούν με το πλήθος N των πλεγματικών θέσεων.

$$c = \frac{\beta^2}{N} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (3.15)$$

$$\chi = \beta N (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2) \quad (3.16)$$

Για να μπορέσουμε να βρούμε τις μέσες τιμές των ποσοτήτων E , M είναι σημαντικό για την αποφυγή λαθών να μετρήσουμε μια ποσότητα που ονομάζεται χρόνος συσχετισμού. Ο χρόνος συσχετισμού είναι με ένα μέσο υπολογισμού του χρόνου που χρειάζεται το σύστημα να μεταβεί από μια κατάσταση σε μια άλλη σημαντικά διαφορετική. Με τον αλγόριθμο που ακολουθούμε όμως η επόμενη από την προηγούμενη κατάσταση διαφέρει κατά το πολύ ένα σπίν και άρα οι καταστάσεις είναι πολύ ισχυρά συσχετισμένες μεταξύ τους. Άρα λοιπόν χρειάζεται μεγάλος αριθμός περασμάτων Μετρόπολις ανά πλεγματική θέση ώστε να πάρουμε μια στατιστική διάταξη ανεξάρτητη. Εδώ λοιπόν είναι αναγκαίος ο υπολογισμός του συσχετισμένου των διατάξεων και εύρεση του χρόνου συσχετισμού.

Στις προσομοιώσεις χρησιμοποιούμε την συνάρτηση συσχετισμού για την μελέτη των παραπάνω. Αν μια φυσική ποσότητα Q και Q_t η τιμή της μετά από t Μόντε Κάρλο χρόνο, η συνάρτηση συσχετισμού της Q ορίζεται για κάθε χρόνο και είναι

$$\rho_Q(t) = \frac{\langle (Q(t') - \langle Q \rangle)(Q(t' + t) - \langle Q \rangle) \rangle_{t'}}{\langle (Q - \langle Q \rangle)^2 \rangle} \quad (3.17)$$

. Όταν μια ποσότητα μετά από χρόνο τ είναι ισχυρά συσχετισμένη τότε το γινόμενο στον αριθμητή θα είναι θετικό ενώ όταν ο συσχετισμός είναι ασθενής το γινόμενο θα είναι είτε θετικό είτε αρνητικό, έτσι ο μέσος όρος να γίνεται πολύ μικρός. Η συνάρτηση ρ θα ελαττώνεται ασυμπτωτικά με εκθετικό τρόπο

$$\rho_Q(t) \sim e^{\frac{-t}{\tau_Q}} \quad (3.18)$$

όπου η κλίμακα χρόνου τ_Q χαρακτηρίζει τον αυτοσυσχετισμό των μετρήσεων της Q και ονομάζεται χρόνος συσχετισμένου. Κατά σύμβαση θεωρούμε ότι μετά από χρόνο $2t$ όταν και η τιμή της $\rho_Q(t)$ έχει πέσει κατά 14% της αρχικής έχουμε μια ανεξάρτητη μέτρηση της Q . Για t_{max} μετρήσεις, ο αριθμός των ανεξάρτητων μετρήσεων Q είναι

$$n_Q = \frac{t_{max}}{2\tau_Q} \quad (3.19)$$

. Εναλλακτικός τρόπος υπολογισμού είναι να υπολογίσουμε τον ολοκληρωμένο χρόνο συσχετισμένου

$$\tau_{int,Q} = \int_0^{+\infty} dt \rho_Q(t) \sim \int_0^{+\infty} dt e^{\frac{-t}{\tau_Q}} = \tau_Q \quad (3.20)$$

. Αν δεχτούμε ότι η (3.18) είναι ακριβής για όλα τα t τότε η χρήση της (3.20) είναι πολύ πιο βολική. Τα στατιστικά σφάλματα από τη συμπεριφορά του $\rho_Q(t)$ για μεγάλους χρόνους επιδρούν με διαφορετικό τρόπο στους δυο ορισμούς όπως και τα συστηματικά σφάλματα που υπεισέρχονται. Όταν θέλουμε λοιπόν μια γρήγορη εκτίμηση του χρόνου συσχετισμού, αγνοούμε τα συστηματικά σφάλματα για μικρούς χρόνους που είναι και μεγαλύτερα και υπολογίζουμε

$$\tau_{int,Q}(t_{max}) = \int_0^{t_{max}} dt \rho_Q(t) \quad (3.21)$$

. Από την γραφική παράσταση της τ και $Q(t_{max})$ παρατηρούμε που σταθεροποιείται και παίρνουμε αυτή την τιμή ως εκτίμηση του ολοκληρωτικού χρόνου συσχετισμού. Να τονίσουμε ότι για συστήματα που βρίσκονται μακριά από την κρίσιμη τους περιοχή θερμοκρασιών, ο χρόνος συσχετισμού, δεν είναι σοβαρό πρόβλημα, ενώ όταν πλησιάζουμε στην κρίσιμη περιοχή μεγαλώνει και η αύξηση αυτή παρουσιάζει βύθιση. Για τον αλγόριθμό μας για πλέγματα $L \times L \times L$ αυτό σημαίνει ότι για μεγάλα L έχουμε

$$\tau \sim L^z \quad (3.22)$$

με $z \simeq 2.02 \pm 0.04$ από την βιβλιογραφία [3]. Καθώς όμως στη μελέτη μας ενδιαφερόμαστε για την κρίσιμη περιοχή θερμοκρασιών του μοντέλου μας με τον αλγόριθμο Metropolis (Παράρτημα 5.1.1-5.1.7) υπεισέρχονται μεγάλες κρίσιμες διακυμάνσεις και μεγάλοι χρόνοι αυτοσυσχετισμού οι οποίοι δημιουργούν μεγάλα σφάλματα στις μετρούμενες ποσότητες. Έτσι λοιπόν αναγκαστήκαμε να χρησιμοποιήσουμε έναν άλλο αλγόριθμο ώστε να εξαλείψουμε αυτά τα φαινόμενα.

3.3 Δυσκολίες και στροφή σε άλλο αλγόριθμο

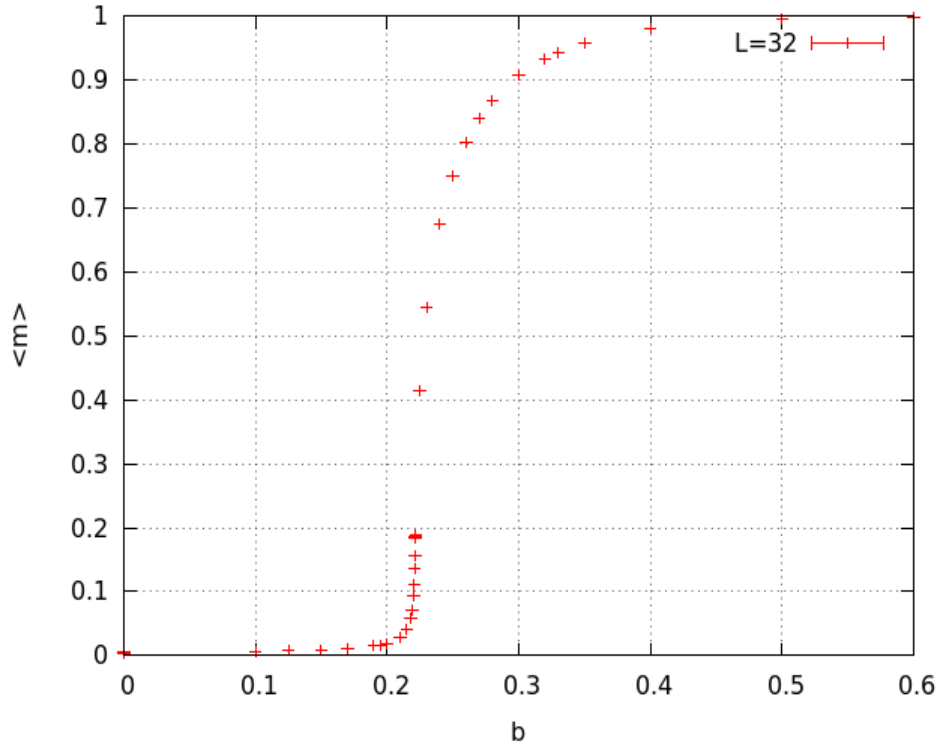
Τι μας οδήγησε όμως στην επιλογή του αλγορίθμου Wolff; Εστίασαμε την προσοχή μας στην περιοχή θερμοκρασιών γύρω από την κρίσιμη θερμοκρασία ($\beta = 0.221654[19]$) όπως αναφέρεται στην βιβλιογραφία και παρατηρήσαμε την συμπεριφορά του συστήματός μας γύρω από αυτή την τιμή. Για θερμοκρασίες μεγαλύτερες της κρίσιμης η τιμή της μαγνήτισης ανά πλεγματοειδή θέση παίρνει αρκετά μικρές τιμές ενώ για τιμές μικρότερες της κρίσιμης θερμοκρασίας παίρνει τιμές κοντά στο μέγιστο της.

Στην περιοχή για $\beta = \beta_c$ παρατηρείται μια απότομη αλλαγή (σχεδόν κάθετη πτώση) για την μαγνήτιση, κάτι που ονομάζουμε αλλαγή φάσης η οποία λαμβάνει χώρα για την κρίσιμη θερμοκρασία. Για μεγαλύτερες θερμοκρασίες από την κρίσιμη το σύστημα βρίσκεται σε μία παραμαγνητική φάση στην οποία η μέση μαγνήτιση είναι μηδέν. Κάτω από την κρίσιμη θερμοκρασία το σύστημα βρίσκεται στην φερομαγνητική φάση, κατά την οποία το σύστημα αναπτύσσει στιγμιαία μαγνήτιση.

Αν κοιτάξουμε τώρα τα σπιν παρατηρούμε ότι για μεγάλες θερμοκρασίες είναι τυχαία και ασυσχέτιστα, αλλά καθώς η θερμοκρασία μειώνεται οι αλληλεπιδράσεις τους τα ωθούν να προσανατολιστούν στην ίδια κατεύθυνση, αυξάνοντας και το συσχετισμό στο σύστημα. Δηλαδή γειτονικά σπιν προσανατολισμένα κατά τον ίδιο τρόπο ομαδοποιούνται σε ένα σύμφωνο σύμπλεγμα(cluster).

Εδώ κρύβεται και η κύρια ιδέα πίσω από τον αλγόριθμο Wolff. Όσο πλησιάζουμε την κρίσιμη θερμοκρασία το μέγεθος ξ αυτών των clusters αποκλίνει έτσι ώστε όταν είμαστε στην περιοχή αλλαγής φάσης να συναντάμε μεγάλες περιοχές στις οποίες τα σπιν έχουν κυρίως κατεύθυνση προς τα πάνω η προς τα κάτω. Καθώς περνάμε σε θερμοκρασίες μικρότερες εκείνης της αλλαγής φάσης το σύστημα επιλεγεί να έχει την πλειοψηφία των σπιν με κατεύθυνση προς τα πάνω η προς τα κάτω και δημιουργεί μη μηδενική μαγνήτιση σε αυτή τη διεύθυνση. Όσο μειώνεται η θερμοκρασία όλο και περισσότερα σπιν προσανατολίζονται στην ίδια διεύθυνση και τελικά όταν $\beta \rightarrow \infty$ έχουμε $|m| = 1$.

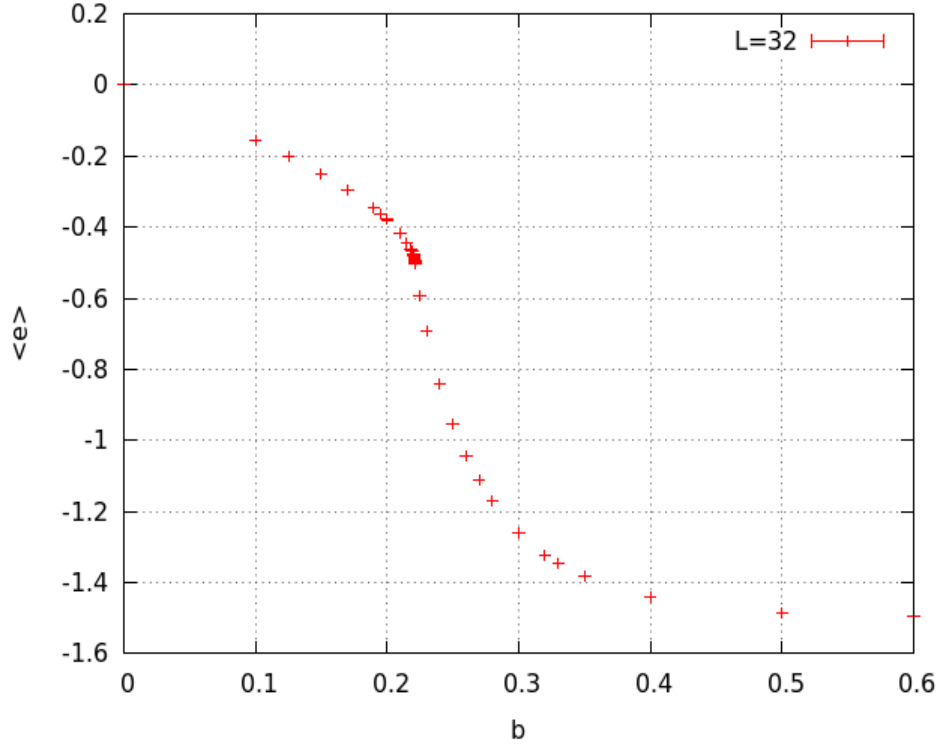
Στην κρίσιμη περιοχή που εστιάζεται και η μελέτη μας, τα clusters συνει-



Σχήμα 3.3: Παρατηρούμε για τη μαγνήτιση για ένα σύστημα μεγέθους $L = 32$ την απότομη μεταβολή της γύρω από την κρίσιμη θερμοκρασία

σφέρουν σημαντικά και στην ενέργεια και τη μαγνήτιση του συστήματός μας, τόσο ώστε όταν αλλάζουν προσανατολισμό να δημιουργούν μεγάλες διακυμάνσεις στην ενέργεια και τη μαγνήτιση αντιστοίχως (κρίσιμες διακυμάνσεις). Καθώς οι διακυμάνσεις σε M και E σχετίζονται με τη μαγνητική επιδεκτικότητα και την ειδική θερμότητα από τις (3.15),(3.16) αναμένουμε αποκλίσεις σε αυτές τις ποσότητες στην β_c . Αυτή είναι και η περιοχή που ο αλγόριθμος Μετροπολις γίνεται λιγότερο ακριβής.

Τα στατιστικά λάθη για τις μετρούμενες ποσότητες της μαγνήτισης και της εσωτερικής ενεργείας είναι συνάρτηση του μεγέθους αυτών των κρίσιμων διακυμάνσεων και μεγαλώνουν όσο πλησιάζουμε την β_c . Αν προσπαθούσαμε να μειώσουμε τις τιμές των λαθών που υπεισέρχονται στις μετρήσεις μας κοντά στην κρίσιμη θερμοκρασία πρέπει να αφήσουμε το πρόγραμμα μας να τρέξει για πολύ περισσότερο χρόνο και να πάρει μεγαλύτερο αριθμό μετρήσεων. Όμως



Σχήμα 3.4: Όπως και για τη μαγνήτιση, απότομη αλλαγή στην κρίσιμη περιοχή, βλέπουμε και για την ενέργεια.

για σύστημα finite-size όπως χρησιμοποιούμε εμείς, ο χρόνος συσχετισμού τ γίνεται πολύ μεγάλος, κάτι που σημαίνει όπως είδαμε ότι ο αριθμός των ανεξάρτητων μετρήσεων που μπορούμε να πάρουμε από μια προσομοίωση είναι αρκετά μικρός. Αυτό το φαινόμενο που είναι γνωστό και ως κρίσιμη επιβράδυνση μας οδήγησε στην χρησιμοποίηση ενός αλγορίθμου που υποφέρει λιγότερο από κρίσιμη επιβράδυνση στην κρίσιμη περιοχή θερμοκρασιών του συστήματός μας. Μπορούμε να ορίσουμε μια αδιάστατη παράμετρο t η οποία ονομάζεται μειωμένη θερμοκρασία και μετράει πόσο μακριά βρισκόμαστε από την κρίσιμη θερμοκρασία β_c

$$t = \frac{T - T_c}{T_c} \equiv \frac{\beta - \beta_c}{\beta_c}. \quad (3.23)$$

Εμφανώς για $\beta = 0$ βρισκόμαστε στην κρίσιμη θερμοκρασία. Τότε η απόκλιση

του μήκους συσχετισμού ξ κοντά στην αλλαγή φάσης συμπεριφέρεται συμφωνά με την

$$\xi \sim |t|^{-\nu} \quad (3.24)$$

και η συνάρτηση συσχετισμού σύμφωνα με την (1.13) για το μοντέλο ising.

Μπορούμε να πούμε λοιπόν ότι η ν είναι μια ανεξάρτητη παράμετρος και δεν εξαρτάται από το μέγεθος του πλέγματος που μελετάμε. Ακόμα υπάρχουν άλλοι τρεις κρίσιμοι έκθετες που συνοδεύουν τις αποκλίσεις για τη μαγνητική επιδεκτικότητα και της ειδικής θερμότητας και του χρόνου συσχετισμού

$$\chi \sim |t|^{-\gamma} \quad (3.25)$$

$$c \sim |t|^{-\alpha} \quad (3.26)$$

$$\tau \sim |t|^{-z\nu}. \quad (3.27)$$

Συνδυάζοντας την (3.22) με την (3.25) έχουμε

$$\tau \sim \xi^z \quad (3.28)$$

η οποία μας δείχνει πως ο χρόνος αυτοσυσχετισμού μεγαλώνει όσο το μήκος αυτοσυσχετισμού αποκλίνει κοντά στο κρίσιμο σημείο. Για ένα σύστημα όγκου L^d που στην προκειμένη περίπτωση $d = 3$ το μέγιστο cluster spin που μπορούμε να πάρουμε είναι L^d . Έτσι για θερμοκρασίες αρκετά κοντά στην κρίσιμη και κυρίως για αυτή η (3.28) γίνεται

$$\tau \sim L^z \quad (3.29)$$

Έτσι λοιπόν αν γνωρίζουμε την κρίσιμη θερμοκρασία για το μοντέλο μας μπορούμε να υπολογίσουμε και τον έκθετη z . Στα πλαίσια αυτής της διπλωματικής χρησιμοποιήσαμε κρίσιμες θερμοκρασίες και τιμές για τον έκθετη z από βιβλιογραφία και εργαστήκαμε με βάση αυτές για τον υπολογισμό των δικών μας [3].

3.4 Υλοποίηση αλγορίθμου Wolff

Ο χρόνος για τον επεξεργαστή μας για να τρέξουν μερικά Monte Carlo βήματα ανά πλεγματική θέση σε ένα σύστημα, αυξάνει ανάλογα με το μέγεθός του συστήματος L^d . Αυτό είναι και που τρέπει την λήψη μετρήσεων μεγάλων συστημάτων στην κρίσιμη περιοχή πολύ δύσκολη. Όπως είδαμε όταν τα μήκη αυτοσυσχετισμού γίνονται πολύ μεγάλα κοντά στην κρίσιμη θερμοκρασία σχηματίζονται μεγάλες περιοχές στις οποίες όλα τα spin δείχνουν στην ίδια κατεύθυνση. Είναι λοιπόν σχεδόν αδύνατο να αλλάξουμε ένα spin στο μέσο μιας

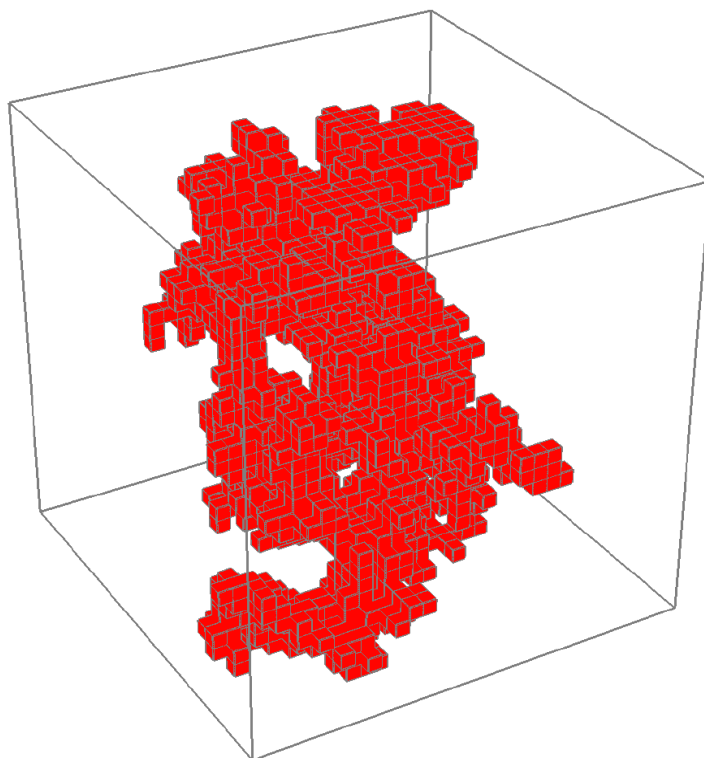
τέτοιας περιοχής, καθώς κάθε αλλαγή έχει μεγάλη πιθανότητα να μην γίνει αποδεκτή λόγω φερομαγνητικών αλληλεπιδράσεων με τα 6 γειτονικά σπιν. Η πιθανότητα να δεχτούμε μια τέτοια αλλαγή είναι

$$A(\mu \rightarrow \nu) \simeq e^{-\frac{12J}{T_c}} = 0.069 \dots \quad (3.30)$$

Εδώ έρχεται να δώσει λύση ο αλγόριθμος του Wolff (Παράρτημα 2) ως ένας cluster flipping algorithm. Ο πιο απλός τρόπος είναι να επιλέξουμε ένα σπιν τυχαία και να ελέγξουμε αν κάποιος από τους γείτονές του είναι προσανατολισμένος στην ίδια κατεύθυνση. Επαναλαμβάνουμε τη διαδικασία αυτή και για τους γείτονές του κ.ο.κ.

Γνωρίζουμε ότι για το μοντέλο Ising τα σπιν τείνουν να είναι ασυσχέτιστα με τους γείτονές για μεγάλες θερμοκρασίες $\beta \ll \beta_c$ και ότι πλησιάζοντας την κρίσιμη θερμοκρασία το μέγεθος των cluster μεγαλώνει και όταν περάσουμε κάτω από την κρίσιμη θερμοκρασία $\beta \gg \beta_c$ όλα τα σπιν προσανατολίζονται στην ίδια κατεύθυνση σχηματίζοντας ένα μεγάλο cluster.

Επιλέγουμε λοιπόν ένα σπιν γεννήτορα ή σπόρο (seed-spin) και δημιουργούμε ένα cluster γύρω από αυτό. Σε κάθε βήμα προσθέτουμε μέλη στο cluster με πιθανότητα $P_{add} = P_{add}(\beta)$. Με κατάλληλα επιλεγμένη $P_{add}(\beta)$ το cluster θα αναπτύσσεται με τον αναμενόμενο τρόπο και θα ικανοποιείται η συνθήκη λεπτομερούς ισοζύγισης (2.7). Πρέπει να βρούμε τον κατάλληλο ρυθμό αποδοχής ώστε ο αλγόριθμος να ικανοποιεί την (2.7) και να βρούμε την καλύτερη επιλογή για την P_{add} ώστε ο μέσος ρυθμός αποδοχής να είναι κοντά στο 1.



Σχήμα 3.5: Ένα τυπικό Cluster Wolff που δημιουργείται στην κρίσιμη περιοχή για $L = 32$ [10]

Θεωρούμε δυο διαφορετικές καταστάσεις μ , ν που διαφέρουν κατά ένα cluster όμοια προσανατολισμένων σπιν και μια μετάβαση η οποία θα μας πάει απο την κατάσταση μ στην ν και ένα σπιν από αυτά στο cluster ως το σπιν γεννήτορα (seed spin). Ξεκινάμε με αυτό το σπιν και προσθέτουμε τα άλλα σε αυτό με συγκεκριμένο τρόπο.

Αν θεωρήσουμε και την αντίθετη ακριβώς διαδικασία που μας πάει από την κατάσταση ν στην μ ξεκινώντας με το ίδιο σπιν γεννήτορα, έχουμε ότι οι πιθανότητες να επιλέξουμε το σπιν-σπόρο είναι οι ίδιες στις δυο κινήσεις. Η μόνη διαφορά είναι ότι σε κάθε μια από τις καταστάσεις του συστήματος, έξω από το cluster υπάρχουν κάποια σπιν που έχουν την ίδια κατεύθυνση με τα σπιν στο cluster. Οι δεσμοί μεταξύ αυτών των σπιν και των σπιν μέσα στο cluster πρέπει να σπάσουν και η πιθανότητα αυτή για να σπάσουν είναι διαφορετική στις δυο περιπτώσεις ($\mu \rightarrow \nu$) και ($\nu \rightarrow \mu$). Αυτοί οι σπασμένοι

δεσμοί αντιπροσωπεύουν ζεύγη όμοια προσανατολισμένων σπιν τα οποία δεν προσθέτονται στο cluster με τον αλγόριθμο. Η πιθανότητα να μην προστεθεί ένα τέτοιο σπιν είναι $1 - P_{add}$. Αν m δεσμοί πρέπει να σπάσουν κατά την μια κίνηση και n κατά την άλλη τότε η συνθήκη ισοζυγούς ισορροπίας γίνεται:

$$\frac{g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu)}{g(\nu \rightarrow \mu)A(\nu \rightarrow \mu)} = (1 - P_{add})^{m-n} \frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} \quad (3.31)$$

όπου $A(\mu \rightarrow \nu)$, $A(\nu \rightarrow \mu)$ είναι οι ρυθμοί αποδοχής για τις κινήσεις αυτές. Η αλλαγή στην ενέργεια θα είναι επίσης

$$E_\nu - E_\mu = 2J(m - n) \quad (3.32)$$

και άρα η (3.31) γίνεται

$$\frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = [e^{2\beta J}(1 - P_{add})]^{m-n}. \quad (3.33)$$

Αν τώρα επιλέξουμε

$$P_{add} = 1 - e^{-2\beta J}, \quad (3.34)$$

τότε το δεξί μέλος της εξίσωσης γίνεται 1 ανεξαρτήτως των ιδιοτήτων των καταστάσεων ν και μ , της θερμοκρασίας και οτιδήποτε άλλου. Έτσι ενοποιούμε τους ρυθμούς αποδοχής για τις δυο κινήσεις. Η πιθανότητα P_{add} είναι μικρή για μεγάλες θερμοκρασίες $\beta \ll \beta_c$ και σχεδόν 1 όταν η θερμοκρασία τείνει στο μηδέν $\beta \gg \beta_c$.

Στην πρώτη περίπτωση ο αλγόριθμος φτιάχνει μικρά cluster ενώ μεγάλα στη δεύτερη. Για τη μαγνήτιση μπορούμε να γράψουμε ότι

$$M = \sum_i S_i n_i \quad (3.35)$$

όπου n_i τα διαφορετικά cluster και $S_i = \pm 1$ ανάλογα με πως είναι προσανατολισμένο το i οστό cluster. Η μέση μαγνήτιση λοιπόν είναι

$$\langle M^2 \rangle = \left\langle \sum_i S_i n_i \sum_j S_j n_j \right\rangle = \left\langle \sum_{i \neq j} S_i S_j n_i n_j \right\rangle + \left\langle \sum_i S_i^2 n_i^2 \right\rangle \quad (3.36)$$

και η μέση μαγνήτιση ανά σπιν

$$\langle m^2 \rangle = \frac{1}{N^2} \left\langle \sum_i n_i^2 \right\rangle \quad (3.37)$$

Αν θεωρήσουμε τώρα $\langle n \rangle$ το μέσο μέγεθος των cluster τα οποία αλλάζουν κατεύθυνση στον αλγόριθμο μας η πιθανότητα του σπιν-σπόρου να είναι στο συγκεκριμένο cluster i είναι ανάλογη με το μέγεθός του cluster.

$$p_i = \frac{n_i}{N} \quad (3.38)$$

Έτσι λοιπόν το μέσο cluster μέγεθος δίνεται από τη μέση πιθανότητα να επιλεγεί πολλαπλασιασμένο με το μέγεθός του.

$$\langle n \rangle = \left\langle \sum_i p_i n_i \right\rangle = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i n_i^2 \right\rangle = N \langle m^2 \rangle \quad (3.39)$$

Από την (1.36) και για $\langle m \rangle = 0$ για $\beta \leq \beta_c$ προκύπτει η μαγνητική επιδεκτικότητα

$$\chi = \beta \langle n \rangle \quad (3.40)$$

Ο χρόνος για να τελειώσει ένα βήμα του αλγορίθμου Wolff είναι ανάλογος του αριθμού των σπιν n στο cluster τα οποία καταλαμβάνουν ένα κλάσμα $\frac{n}{L^d}$ του συνολικού πλέγματος. Έτσι χρειάζονται $\frac{\langle n \rangle}{L^d}$ βήματα για να αλλάξει ένα σπιν κατεύθυνση μία φορά. Αυτό είναι ανάλογο με ένα περασμα του πλεγματος για τον αλγοριθμο Metropolis και έχουμε την σχέση των χρόνων αυτοσυσχετισμών για τις δύο μεθόδους στην κρίσιμη περιοχή.

$$\tau_{\tau_{steps}}^{M,W} \frac{\langle n \rangle}{L^d} \quad (3.41)$$

Οι χρόνοι συσχετισμού για τον Wolff και Metropolis αλγόριθμο είναι ίσοι περίπου στα όρια υψηλών και χαμηλών θερμοκρασιών. Η τεράστια αλλαγή στην αποδοτικότητα εμφανίζεται κοντά στην αλλαγή φάσης όπου και οι κρίσιμοι εκθετες των συσχετισμών χρόνου παρουσιάζουν τεράστιες διαφοροποιήσεις μεταξύ των δύο αλγορίθμων.

3.4.1 Υπολογισμός Σφαλμάτων

Όπως αναπτύξαμε παραπάνω κατά την προσομοίωσή μας για τον υπολογισμό διαφόρων ποσοτήτων, υπεισέρχονται σε αυτές σφάλματα λόγω της διακριτοποίησης του πεπερασμένου μεγέθους του συστήματος. Αν έχουμε ένα δείγμα από n μετρήσεις Q_0, Q_1, \dots, Q_{n-1}

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} Q_i \quad (3.42)$$

τότε τα σφάλματα για σύστημα ανεξάρτητων μετρήσεων θα είναι

$$\begin{aligned} (\delta Q)^2 &\equiv \sigma_Q^2 = \frac{1}{n-1} \left\{ \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} (Q_i - \langle Q \rangle)^2 \right\} \\ &= \frac{1}{1-n} (\langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2) \end{aligned} \quad (3.43)$$

Όμως κατά τις προσομοιώσεις μας δεν έχουμε ανεξάρτητες μετρήσεις λόγω του αυτοσυσχετισμού των μετρήσεων. Έτσι αν έχουμε $n_Q = \frac{n}{2\tau_Q}$ ανεξάρτητες μετρήσεις τότε το πραγματικό στατιστικό σφάλμα θα είναι

$$(\delta Q)^2 = \frac{1 + 2\tau_Q}{n-1} (\langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2). \quad (3.44)$$

Για $\tau_Q \gg 1$ καταλήγουμε στην

$$(\delta Q)^2 \approx \frac{1}{n_Q - 1} (\langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2). \quad (3.45)$$

Τώρα λοιπόν, πρέπει να χωρίσουμε τις n μετρήσεις μας και τις βάζουμε σε n_b 'καλάθια' (bins) τα οποία περιέχουν από $b = n - \frac{n}{n_b}$ στοιχεία με τον εξής τρόπο. Οι ποσότητες που μετράμε υπολογίζονται σε κάθε καλάθι σαν να ήταν ένα ανεξάρτητο δείγμα και το σφάλμα μπορεί να υπολογιστεί από την

$$(\delta Q)^2 = \sum_{j=0}^{n_b-1} (Q_j^b - \langle Q^b \rangle)^2 = n_b (\langle (Q^b)^2 \rangle - \langle Q^b \rangle^2). \quad (3.46)$$

Ο αριθμός των bins καθορίζεται μεταβάλλοντάς τον και προσδιορίζοντας εκείνες τις τιμές για τις οποίες η τιμή του σφάλματος σταθεροποιείται. Αυτή η μέθοδος είναι γνωστή ως μέθοδος του 'σουγιά' (Jackknife) και είναι η κύρια μέθοδος υπολογισμού των σφαλμάτων μας κατά τη διεξαγωγή των προσομοιώσεων (Παράρτημα 5.2.1).

Κεφάλαιο 4

Μέθοδοι υπολογισμού

4.1 Μία πρώτη μέθοδος

Η πρώτη μέθοδος που ακολουθήσαμε προκειμένου να μελετηθεί το μοντέλο Ising στην περιοχή κρίσιμης θερμοκρασίας ήταν ο απευθείας υπολογισμός των κρίσιμων εκθετών. Έχουμε ορίσει την αδιάστατη ή ανοιγμένη θερμοκρασία

$$t = \frac{T - T_c}{T_c} \equiv \frac{\beta - \beta_c}{\beta_c}. \quad (4.1)$$

ως ένα μέτρο της απόστασής μας από την κρίσιμη θερμοκρασία και γνωρίζουμε ότι για $t \rightarrow 0$ τότε το μήκος συσχετισμού στο θερμοδυναμικό όριο γίνεται

$$\xi \sim |t|^{-\nu}. \quad (4.2)$$

Λόγω της παγκοσμιότητας που παρουσιάζουν οι κρίσιμοι εκθέτες, μπορούμε να μελετήσουμε ένα πολύπλοκο φυσικό σύστημα στην περιοχή της μετάβασης φάσης του με το απλούστερο φυσικό μοντέλο που ανήκει στην ίδια κλάση παγκοσμιότητας. Για παράδειγμα η μετάβαση φάσης υγρό-ατμός ανήκει στην ίδια κλάση παγκοσμιότητας με το μοντέλο Ising. Στο πεπερασμένο πλέγμα $1 \ll \xi \ll L$ το μοντέλο συμπεριφέρεται όπως το πεπερασμένο σύστημα καθώς τα $\beta \approx \beta_c$ και $\xi \sim L$ παρουσιάζουν φαινόμενα επίδρασης πεπερασμένου μεγέθους. Οι διακυμάνσεις στο πεπερασμένο πλέγμα λοιπόν, παρουσιάζουν μέγιστο για μια ψευδοκρίσιμη θερμοκρασία $\beta_c(L)$. Οι $\chi(\beta = \beta_c, L)$, $c(\beta = \beta_c, L)$ και $m(\beta = \beta_c, L)$, παρουσιάζουν βύθμιση ασυμπτωτικά καθώς το μέγεθος του συστήματος αυξάνεται. Για $\beta \approx \beta_c(L)$, έχουμε ότι $\xi(t, L) \sim L \implies |t| \sim L^{-\frac{1}{\nu}}$ στο θερμοδυναμικό όριο και έχουμε ότι:

$$\chi \sim L^{\frac{\gamma}{\nu}} \quad (4.3)$$

$$c \sim L^{\frac{\alpha}{\nu}} \quad (4.4)$$

$$m \sim L^{\frac{-\beta}{\nu}}. \quad (4.5)$$

Αυτό που χρειαζόμαστε λοιπόν είναι η γνώση της β_c , ώστε οι τιμές που θα επιλέξουμε για την βάρθρωση των παραπάνω σχέσεων να επιφέρουν γρήγορη σύγκλιση στην ασυμπτωτική συμπεριφορά και ελαχιστοποίηση των σφαλμάτων. Χρησιμοποιήσαμε την τιμή $\beta_c = 0.221654$ [4] που είναι μια πολύ καλή προσέγγιση της κρίσιμης θερμοκρασίας με βάση τη βιβλιογραφία. Η ψευδοκρίσιμη θερμοκρασία τώρα, ορίζεται από την τιμή που παρουσιάζεται το μέγιστο των διακυμάνσεων της παραμέτρου τάξης. Χρησιμοποιήσαμε τη μαγνητική επιδεκτικότητα $\langle m \rangle$ δηλαδή,

$$\chi(\beta_c(L), L) \equiv \chi_{max}(L) \quad (4.6)$$

Όταν είμαστε στην ψευδοκρίσιμη περιοχή έχουμε $\xi \sim L$, οπότε από την 4.1

$$\beta_c(L) = \beta_c - \frac{c}{L^{-\frac{1}{n}}} \quad (4.7)$$

Ξεκινήσαμε μετρώντας τη μαγνητική επιδεκτικότητα για διάφορα $L=6, 8, 10, 14, 20, 24, 32$ και για κάθε L προσδιορίζουμε την ψευδοκρίσιμη περιοχή για την τιμή χ_{max} . Στόχος μας είναι να προσαρμόσουμε τα δεδομένα μας σε μια συνάρτηση της μορφής $a - \frac{c}{L^b}$ και από τις τιμές που βρίσκουμε για τις τιμές α, β, c υπολογίζουμε την $\beta_c = \alpha, \nu = \frac{1}{b}$. Είναι αναγκαίο να κατανοήσουμε γιατί αυτή η μέθοδος δεν απέφερε αποτελέσματα για την β_c κοντά στην αναμενόμενη από την βιβλιογραφία. Ο λόγος που οδηγεί την ψευδοκρίσιμη συμπεριφορά ενός πεπερασμένου συστήματος που παρουσιάζει συνεχή μετάβαση φάσης στο θερμοδυναμικό όριο είναι η αύξηση του μήκους συσχετισμού ξ σε μέγεθος που συγκρίνεται με το μέγεθος του συστήματος L . Όσο μεγαλώνει το L λοιπόν παίρνουμε καλύτερες ασυμπτωτικές συμπεριφορές.

Προσομοιώσεις μεγάλων L αυξάνουν το υπολογιστικό κόστος κατά τεράστιο βαθμό. Η πεπερασμένη ακρίβεια στον υπολογισμό της β_c εισάγει μεγάλα συστηματικά σφάλματα. Το σημαντικότερο βεβαία μειονέκτημα είναι ότι κατά τον υπολογισμό των μεγίστων της μαγνητικής επιλεκτικότητας χρειάζεται μεγάλη ακρίβεια ώστε η προσαρμογή των ψευδοκρίσιμων θερμοκρασιών να είναι ικανοποιητική.

Για τον περιορισμό των σφαλμάτων στις μετρήσεις της μαγνητικής επιλεκτικότητας προϋποθέτει ότι ο αλγόριθμος μας θα κάνει πολλά περάσματα από κάθε κατάσταση, κάτι που αυξάνει σημαντικά το χρόνο που χρειάζεται να αφήσουμε το πρόγραμμα μας να τρέξει. Χρησιμοποιήσαμε 3 εκατομμύρια περάσματα(sweeps) τα οποία δεν κατάφεραν να δώσουν τα αναμενόμενα μικρά σφάλματα και γίνεται ορατό από τα διαγράμματα για τιμές του β κοντά στην κρίσιμη θερμοκρασία (Σχ. 4.9-4.10).

4.2 Finite-size scaling

Η μέθοδος Finite-size scaling είναι ένας τρόπος να παίρνουμε τις τιμές για τους κρίσιμους εκθέτες παρατηρώντας πως οι μετρούμενες ποσότητες διαφέρουν όσο το μέγεθος L του συστήματος αλλάζει. Χρησιμοποιούμε μια μέθοδο η οποία μας επιστρέφει την τιμή β_c και τις εκτιμήσεις των κρίσιμων εκθετών. Η ποσότητα ενδιαφέροντός μας είναι η μαγνητική επιδεκτικότητα και έτσι από την (4.2) και την (4.3) έχουμε την

$$\chi \sim \xi^{\frac{\gamma}{\nu}} \quad (4.8)$$

στην περιοχή γύρω από την αλλαγή φάσης. Καθώς στο πεπερασμένο σύστημα πλησιάζουμε την κρίσιμη θερμοκρασία τα φαινόμενα κυριαρχούνται από την “κατάπνιξη” (cut-off) των διακυμάνσεων που προκύπτουν όταν $\xi \sim L$. Άρα οι κλίμακες μήκους που καθορίζουν την κύρια συμπεριφορά των συναρτήσεων που περιγράφουν τη βάρθρωση $\chi \sim \xi^{\frac{\gamma}{\nu}}$ είναι οι ξ και L παράμετροι και άρα η αδιάστατη μεταβλητή $\frac{L}{\xi}$ είναι η μοναδική μεταβλητή που υπεισέρχεται στις συναρτήσεις βάρθρωσης. Αν θεωρήσουμε το ξ την τιμή που θα είχε το μήκος συσχετισμού σε ένα πεπερασμένο σύστημα σε θερμοκρασία t τότε αυτή η “κατάπνιξη” λαμβάνει χώρα για $\xi > L$. Όσο το $\xi \ll L$ η τιμή του χ θα είναι ίδια με εκείνη του με πεπερασμένου συστήματος. Αυτό μπορούμε να το εκφράσουμε ως:

$$\chi = \frac{\gamma}{\nu} F_0 \left(\frac{L}{\xi} \right), \quad (4.9)$$

όπου F , μια αδιάστατη συνάρτηση μια μεταβλητής που έχει τις εξής ιδιότητες

$$F_x^0(y) = \sigma t \alpha \nu \text{ για } x \gg 1 \quad (4.10)$$

$$F_x^0(x) \sim x^{\frac{\gamma}{\nu}} \text{ για } x \rightarrow 1. \quad (4.11)$$

Αυτός είναι ο ακριβής τρόπος με τον οποίο η επιδεκτικότητα καταπνίγεται κοντά στην κρίσιμη θερμοκρασία και περιλαμβάνεται στην έκφραση της F_0 . Όμως η μορφή της συνάρτησης (4.9) παραμένει όχι και τόσο χρήσιμη καθώς περιλαμβάνει ακόμα την μεταβλητή ξ για μια θερμοκρασία t στο μη άπειρο σύστημα την οποία δε γνωρίζουμε. Ορίζοντας μια νέα αδιάστατη συνάρτηση

$$x(x) = L^{\frac{1}{\nu} t} \quad (4.12)$$

και κάνοντας χρήση της (4.9) παίρνουμε την

$$\chi = L^{\frac{\gamma}{\nu}} F_x^0(L^{\frac{1}{\nu}} |t|). \quad (4.13)$$

Είναι αναγκαίες δυο συναρτήσεις σαν την (4.9) καθώς η συμπεριφορά του χ δεν είναι συμμετρική στα δυο μέρη της αλλαγής φάσης και το t παίρνει και θετικές και αρνητικές τιμές για διάφορες συναρτήσεις $\chi(x)$. Αν επεκτείνουμε την έκφραση και για αρνητικές τιμές του t έχουμε

$$\chi = L^{\frac{\gamma}{\nu}} F_x^0(L^{\frac{1}{\nu}})t \quad (4.14)$$

Αυτή η εξίσωση λοιπόν μας δίνει πληροφορίες για το πως η μαγνητική επιδεκτικότητα θα αλλάζει με βάση το μέγεθος του συστήματος L για άπειρα συστήματα κοντά στην κρίσιμη θερμοκρασία. Η συνάρτηση βάρθμισης δεν περιεχί κάποια επιπλέον εξάρτηση από το L παρά μόνο αυτή που υπάρχει για στην (4.14). Με άλλα λόγια αν μετρήσουμε την συνάρτηση βάρθμισης παίρνουμε τα ίδια αποτελέσματα ανεξαρτήτως το μέγεθος του συστήματος. Έτσι απο την (4.14) υπολογίζουμε την κρίσιμη θερμοκρασία και τους κρίσιμους εκθέτες.

Για κάθε σύστημα λοιπόν μετράμε την μαγνητική επιδεκτικότητα $\chi_L(t)$ για διάφορες θερμοκρασίες. Μπορούμε να επαναδιατυπώνουμε την (4.14)

$$F_\chi(L^{\frac{1}{\nu}}) = L^{-\frac{\gamma}{\nu}} \chi(\beta, L). \quad (4.15)$$

Καθώς η συνάρτηση βάρθμισης είναι ίδια για όλα τα συστήματα και οι $\chi_L(t)$ υπολογίζονται για θερμοκρασίες κοντά στην κρίσιμη όταν η (4.15) ισχύει τότε όλες οι μετρήσεις θα πέφτουν πάνω στην ίδια καμπύλη που δίνει τη συνάρτηση $F_\chi(x)$ ανεξαρτήτως του L .

Για να ισχύει η (4.15) πρέπει να προσδιορίσουμε την μεταβλητή $\chi = L^{\frac{1}{\nu}}t$ για την οποία είναι αναγκαίο να γνωρίζουμε την β_c ($t = (\beta_c - \beta)/\beta_c$) και τον εκθέτη ν . Για τον υπολογισμό της F_χ χρειάζεται να γνωρίζουμε τον εκθέτη γ/ν που παρουσιάζεται στο δεξί μέλος της (4.15). Η σχέση (4.15) βρίσκειται να είναι πολύ ευαίσθητα εξαρτημένη από τις παραμέτρους β_c , ν και γ/ν και έτσι έχουμε μια εξαίρετη και ακριβή μέθοδο για τον υπολογισμό τους. Ο υπολογισμός γίνεται εύκολα.

Θέτουμε δοκιμαστικές τιμές για τις παραμέτρους (β_c , ν , γ/ν). Από τα δεδομένα μας χρησιμοποιούμε τις τιμές L , β , β_c και ν για να υπολογίσουμε τη μεταβλητή βάρθμισης $\chi = L^{\frac{1}{\nu}}t = L^{\frac{1}{\nu}}(\beta_c - \beta)/\beta_c$. Αυτή την αντιστοιχούμε στην τιμή της μαγνητικής επιδεκτικότητας $\chi(\beta, L)$ από την οποία, μαζί με την τιμή του γ/ν , υπολογίζουμε την

$$F_\chi = \frac{\chi(\beta, L)}{L^{\frac{\gamma}{\nu}}}.$$

Κάνουμε τη γραφική παράσταση των σημείων χ , $F_\chi(x)$ και επικεντρωνόμαστε στο διάστημα κοντά στην κρίσιμη περιοχή ($t \approx 0$). Αλλάζουμε τις τιμές των παραμέτρων (β_c , ν , γ/ν) μέχρι να πετύχουμε βέλτιστη σύμπτωση των καμπύλων που προκύπτουν για τα διαφορετικά L που μελετάμε. Μόλις το πετύχουμε, οι

τιμές των $(\beta c, \nu, \gamma/\nu)$ που αντιστοιχούν στη βέλτιστη σύμπτωση είναι και οι ζητούμενες. Ανάλογη διαδικασία ακολουθούμε και για την μαγνήτιση και την ειδική θερμότητα, ποσότητες που παρουσιάζουν και αυτές βάρθρωση

$$\langle m \rangle(\beta, L) = L^{-\frac{\beta}{\nu}} F_m(L^{\frac{1}{\nu}} t) \quad (4.16)$$

$$c(\beta, L) = L^{\frac{\alpha}{\nu}} F_c(L^{\frac{1}{\nu}} t) \quad (4.17)$$

δίνοντας μας το πλεονέκτημα του υπολογισμού των κρίσιμων εκθετών α και β ακολουθώντας πανομοιότυπη διαδικασία με αυτή που χρησιμοποιήθηκε για τη μαγνητική επιδεκτικότητα.

4.3 Binder Cumulant

Σημαντική πληροφορία για τους κρίσιμους εκθέτες και για την κρίσιμη θερμοκρασία παίρνουμε από συσσωρευτές (cumulant) ανώτερης τάξης (4ης) ο οποίος ονομάστηκε έτσι από τον Kurt binder και δίνεται από τη σχέση

$$U = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3 \langle m^2 \rangle^2} \quad (4.18)$$

Με αυτή τη μέθοδο χρησιμοποιώντας βασικές ιδιότητες βάρθρωσης ενός συστήματος κοντά στην κρίσιμη θερμοκρασία θα υπολογίσουμε τις ιδιότητες βάρθρωσης της ποσότητας αυτής και των παραγώγων της. Αν υποθέσουμε ότι πλησιάζουμε από τις υψηλές θερμοκρασίες την κρίσιμη και η συνάρτηση κατανομής της μαγνήτισης είναι

$$P(L, s) = L^{\frac{d}{2}} \left(\frac{\beta}{2\pi\chi} \right) e^{-s^2 \frac{L^2 \beta}{2\chi}} \quad (4.19)$$

που είναι μια γκαουσιανή, τότε όταν πλησιάζουμε την κρίσιμη θερμοκρασία η βάρθρωση παρουσιάζεται συνάρτηση κατανομής $P(L, s)$ σύμφωνα με την

$$P(L, s) = L^x p_0 \tilde{P}(\alpha L^y s, \frac{L}{\xi}) \quad (4.20)$$

και κάνοντας κανονικοποίηση της πιθανότητας θέτοντας $z = \alpha L^y s$

$$\begin{aligned}
1 &= \int_{\infty}^{+\infty} ds P(L, s) \\
&= \mathbb{E}^x p_0 \int_{\infty}^{+\infty} ds \tilde{P}(\alpha L^y s, \frac{L}{\xi}) \\
&= \mathbb{E}^x p_0 \frac{1}{\alpha L^y} \int_{\infty}^{+\infty} dz \tilde{P}(z, \frac{L}{\xi}) \\
&= \mathbb{E}^{x-y} p_0 \frac{1}{\alpha} \int_{\infty}^{+\infty} dz \tilde{P}(z, \frac{L}{\xi})
\end{aligned} \tag{4.21}$$

Για $\chi = y$ το αριστερό μέλος γίνεται μονάδα

$$C_0 \equiv \int_{\infty}^{+\infty} dz \tilde{P}(z, \frac{L}{\xi}) < \infty \tag{4.22}$$

και τελικά έχουμε την

$$P(L, s) = \frac{\alpha}{C_0} L^y \tilde{P}(\alpha L^y s, \frac{L}{\xi}) \tag{4.23}$$

και οι ροπές της κατανομής των σπιν θα είναι

$$\begin{aligned}
\langle s^k \rangle &= \int_{\infty}^{+\infty} ds s^k P(L, s) \\
&= \frac{\alpha}{C_0} L^y \int_{\infty}^{+\infty} ds s^k \tilde{P}(\alpha L^y s, \frac{L}{\xi}) \\
&= \frac{\alpha}{C_0} L^y \frac{1}{\alpha^{k+1} L^{(k+1)y}} \int_{\infty}^{+\infty} dz z^k \tilde{P}(z, \frac{L}{\xi}) \\
&= \frac{1}{C_0 \alpha^k L^{ky}} F_k \left(\frac{L}{\xi} \right)
\end{aligned} \tag{4.24}$$

Στην περιοχή $\beta < \beta_c$ που βρισκόμαστε έχουμε $\chi = \beta L^d \langle s^2 \rangle$ για τα παγκόσμια πλάτη χ_+ , y_+ και από την σχέση

$$\left. \begin{aligned} \chi &= \chi + t^{-\gamma} \\ \xi &= \xi + t^{-\nu} \end{aligned} \right\} \implies \chi = \frac{\chi^+}{\xi_+^{\gamma/\nu}} \sim \xi^{\gamma/\nu} \tag{4.25}$$

έχουμε ότι

$$\langle s^2 \rangle = \beta^{-1} L^{-d} \chi = \frac{\chi_+}{d \xi_+^{\frac{\gamma}{\nu}}} \xi_+^{\frac{\gamma}{\nu}} \sim \xi_+^{\frac{\gamma}{\nu}} \quad (4.26)$$

Έτσι για $F(\frac{L}{\xi}) \sim \frac{L}{\xi}^{-\frac{\gamma}{\nu}}$ για $\frac{L}{\xi} \gg 1$ αντικαθιστώντας στην (4.22) παίρνουμε

$$\frac{\chi_+}{\beta L^d \chi_+^{\frac{\gamma}{\nu}}} \sim \frac{1}{C_0 a^2 L^{2y}} \left(\frac{L}{\chi}\right)^{\frac{\gamma}{\nu}} \quad (4.27)$$

Από τη γνωστή σχέση υπερβάθμισης $d\nu = \gamma + 2\beta$ καταλήγουμε σε σχέσεις που ισχύουν σε περιοχές αταξίας $\beta < \beta_c$

$$P(L, s) = \frac{a}{C_0} L^{\frac{\beta}{\nu}} P(aL\beta^{\frac{\beta}{\nu}} s, \frac{L}{\xi}) \quad (4.28)$$

$$\langle s^2 \rangle = \frac{L^{-\frac{2\beta}{\nu}}}{C_0 a^2} F_2 \frac{L}{\xi} \quad (4.29)$$

$$\langle s^4 \rangle = \frac{L^{-\frac{4\beta}{\nu}}}{C_0 a^4} F_4 \frac{L}{\xi} \quad (4.30)$$

έτσι λοιπόν από την (4.16) βρίσκουμε για την κρίσιμη συμπεριφορά του cumulant ότι

$$U \sim 1 - \frac{\frac{L^{-\frac{4\beta}{\nu}}}{C_0 a^4} F_4 \left(\frac{L}{\xi}\right)}{\frac{3L^{-\frac{4\beta}{\nu}}}{C_0 a^4} F_4 \left(\frac{L}{\xi}\right)^2} = 1 - \frac{C_0^2 F_4 \left(\frac{L}{\xi}\right)}{3 F_2 \left(\frac{L}{\xi}\right)^2} \quad (4.31)$$

Στην ψευδοκρίσιμη περιοχή $L \rightarrow \infty$ με $\xi \sim L$ και στο όριο αυτό πρέπει $F\left(\frac{L}{\xi}\right) \sim F(\infty) = \text{σταθερά}$

Άρα ο binder cumulant παίρνει σχεδόν σταθερή τιμή U^* για όλες τις τιμές του L .

$$U \sim U^* = 1 - \frac{C_0^2 F_4(\infty)}{3 F_2(\infty)^2} = \text{σταθ} \quad (4.32)$$

Συγγραφέας	έτος	α	β	γ	Αναφορά
Ferrenberg	1991		0.3258	1.239(7)	[14]
Guttman	1993	0.1010(5)	0.329(9)	1.239(3)	[15]
Oitmaa	1991	0.096(6)	0.318(4)	1.25(2)	[17]
Le Guilou	1987		0.325(15)	1.2341(20)	[16]
Bhanot	1994	0.207(4)	0.308(5)		[18]

Πίνακας 4.1: Σημαντικές τιμές για τους κρίσιμους εκθέτες που έχουν βρεθεί τα τελευταία 20 χρόνια.

4.4 Αποτελέσματα

Από όλες τις αριθμητικές αναλύσεις που έχουν γίνει για το τρισδιάστατο μοντέλο Ισινγκ για κυβικό πλέγμα, υπάρχει σήμερα συμφωνία για την κρίσιμη θερμοκρασία και όλες οι εκτιμήσεις φαίνονται να σχετίζονται με τους εκθέτες που ικανοποιούν την υπερβάθμιση. Τα πρώτα αποτελέσματα για την κρίσιμη θερμοκρασία έρχονται από τη δεκαετία του ογδόντα για τιμή $\beta_c = 0.221654 \pm 0.000005$ από τις προσομοιώσεις Monte Carlo του Pawley και $\beta_c = 0.221655 \pm 0.000005$ από γραφικές αναλύσεις από τον Adler, ήταν και η τελευταία φορά που διαφορετικές αναλύσεις είχαν τόσο κοντινά αποτελέσματα.

Πιο πρόσφατα οι Liu, Fischer βρήκαν τιμή 0.22163. Οι Ferrenberg, Lann-dau βρήκαν 0.2216595 ± 0.0000026 από προσομοιώσεις. Πιο πρόσφατα ακόμα ο Blote βρήκε $\beta_c = 0.2216544 \pm 0.00000003$ σε συμφωνία με τις παλαιότερες προσεγγίσεις αλλά με διαφορετικές εκτιμήσεις για τα σφάλματα (Σχ 4.2). Για τους κρίσιμους εκθέτες μια πρώτη εκτίμηση δόθηκε από τον F.Y.Wu καθώς θεωρήθηκε το μοντέλο του Potts για $q = 3$ ανήκει στην ίδια κλάση παγκοσμιοτήτας με το εξάγωνο πλέγμα αερίου που έχει δοθεί λύση από τον Baxter 1980.

Θα παρουσιάσουμε τα δικά μας αποτελέσματα μετά από σειρά προσομοιώσεων για ένα κυβικό τρισδιάστατο πλέγμα για το μοντέλο Ισινγκ, χρησιμοποιώντας τις μεθόδους που αναπτύχθηκαν παραπάνω ώστε να παρουσιάσουμε τις δικές μας εκτιμήσεις για την κρίσιμη θερμοκρασία και τους κρίσιμους εκθέτες.

Εφόσον βεβαιωθήκαμε ότι το σύστημά μας είναι σε θερμική ισορροπία (βλ. κεφ 3.2) και ότι οι χρόνοι αυτοσυσχετισμού στην κρίσιμη περιοχή είναι αρκετά μικροί, για διαφορετικά συστήματα ($L = 6, 10, 14, 20, 24, 32$) αποθηκεύουμε τη μέση μαγνήτιση ανά σπιν τη μέση ενέργεια ανά σπιν και υπολογίζουμε την ειδική θερμότητα ανά σπιν και την ειδική επιδεκτικότητα μαζί με τα σφάλματά τους.

Συγγραφέας	έτος	α	β	γ	ν	Αναφορά
Kleinert	1998	0.122(9)	0.3470(4)	1.317(2)	0.6703(13)	[9]
A.Vicari	2002	0.110(1)	0.32365(3)	1.2372(5)	0.6301(4)	[19]

Πίνακας 4.2: Τιμές κρίσιμων εκθετών που χρησιμοποιήσαμε ως αναφορά στις αναλύσεις των δεδομένων μας.

Έχουμε λοιπόν τα δεδομένα μας συγκεντρωμένα ($\langle m \rangle, \delta \langle m \rangle, \chi, \delta \chi, \langle e \rangle, \delta \langle e \rangle, c, \delta c$) και μπορούμε να εργαστούμε με Finite size scaling στην περιοχή κατάρρευσης για εύρεση αποτελεσμάτων(βλ. 4.2) για τους κρίσιμους εκθέτες. Ο υπολογισμός γίνεται εύκολα θέτοντας δοκιμαστικές τιμές για τις παραμέτρους ($\beta_c, \nu, \frac{\gamma}{\nu}$) υπολογίζοντας την (4.15). Μικρές μεταβολές στις τιμές προκαλούν αποστασιοποίηση των καμπυλών μεταξύ διαφορετικών L και μπορούμε να λάβουμε εκτίμηση για την ελάχιστη ακρίβεια της μεθόδου (Σχ 4.1).

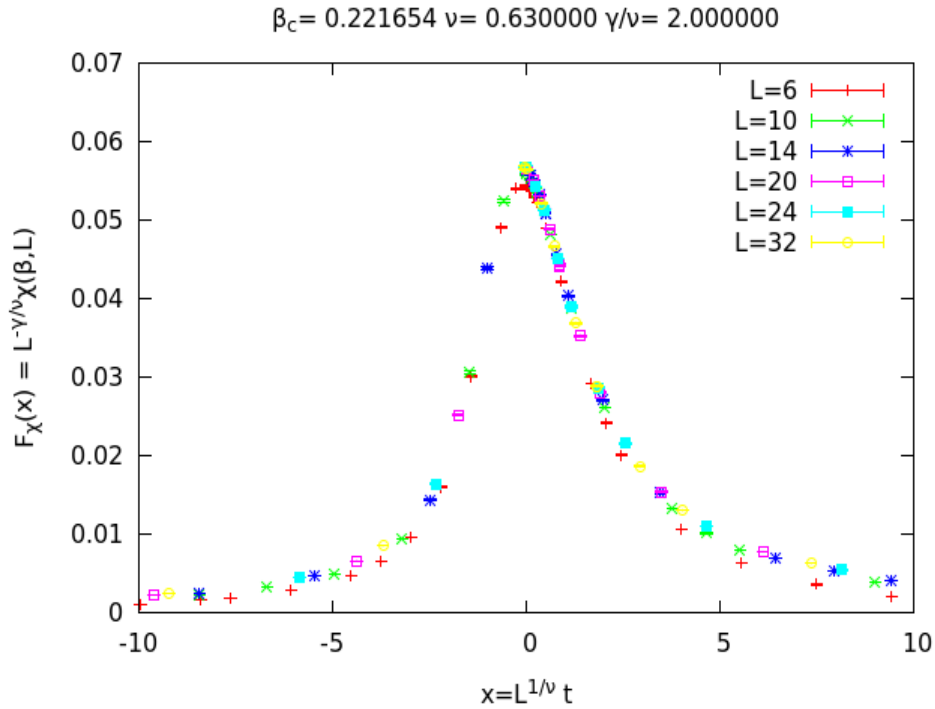
Για τον υπολογισμό των σφαλμάτων μιας ποσότητας εργαζόμαστε ως εξής: Κρατώντας όλες τις υπόλοιπες ποσότητες σταθερές και αλλάζοντας σταδιακά αυτή της οποίας μας ενδιαφέρει ο προσδιορισμός του σφάλματος, παρατηρούμε τη σύμπτωση των καμπυλών για διαφορετικά L .

Η αλλαγή της τιμής στην ποσότητά μας που προκαλεί απόκλιση στις γραφικές παραστάσεις είναι και το σφάλμα μας για την ποσότητα αυτή. Από τις εξισώσεις (4.16),(4.17) με ανάλογη διαδικασία, χρησιμοποιώντας δηλαδή δοκιμαστικές τιμές για τους κρίσιμους εκθέτες α, β ελέγχουμε πάλι τη συμπεριφορά της καμπύλης για διάφορα L και παρατηρούμε τότε πετυχαίνουμε την καλύτερη ταύτιση των καμπυλών.

Είναι σημαντικό να τονιστεί ότι οι αρχικές επιλογές των τιμών των κρίσιμων εκθετών έγινε με βάση τους υπολογισμούς των Pellisseto,Vicari[19]. Βρέθηκε λοιπόν η κρίσιμη θερμοκρασία $\beta_c = 0.221654 \pm 0.0003$ και οι κρίσιμοι εκθέτες $\frac{\alpha}{\nu} = 0.16 \pm 0.05, \frac{\beta}{\nu} = 0.51 \pm 0.02, \frac{\gamma}{\nu} = 2 \pm 0.02$ και $\nu = 0.63 \pm 0.03$.

Τα σφάλματα στην κρίσιμη θερμοκρασία είναι αρκετά μεγάλα σε σχέση με τα σφάλματα που έχουμε δει στη βιβλιογραφία. Αυτό κυρίως οφείλεται στη μέθοδο η οποία βασίζεται στην δοκιμή τιμών της β_c για την εύρεση της καλύτερης σύμπτωσης των καμπυλών τρέποντας την παρατήρηση απόκλισης των καμπυλών για μικρές αλλαγές της β_c σχεδόν αδύνατη.

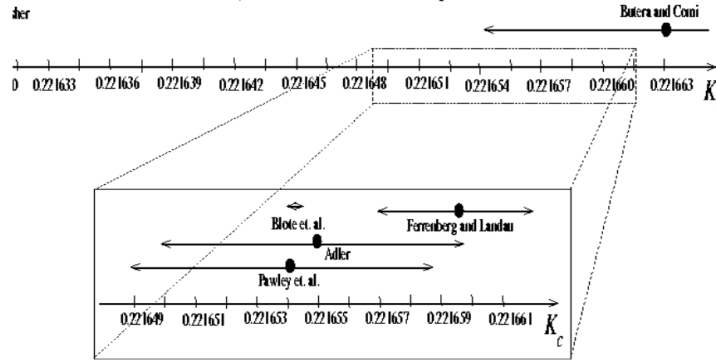
Για τον υπολογισμό της κρίσιμης θερμοκρασίας χρησιμοποιήσαμε επίσης τον binder cumulant(βλ. κεφ 4.3) που είναι τέταρτης τάξης και δίνεται από τον τύπο (4.16). Ο υπολογισμός του $U(\beta, L)$ δίνει με πολύ καλή ακρίβεια την κρίσιμη θερμοκρασία β_c . Το σημείο τομής των καμπυλών $U(\beta, L)$ για διαφορετικά L στο σημείο $U(\beta_c, U^*)$ θα δίνει μια πολύ καλή εκτίμηση για την β_c (Σχ 4.6). Από



Σχήμα 4.1: Βάθμιση της μαγνητικής επιδεκτικότητας για αρχικές τιμές $\nu = 0.6301$ και $\gamma = 1.2372$, ώστε να γίνει η σύμπτωση των καμπυλών μετά από δοκιμές [19]

τα αρχικά μας αρχεία λοιπόν υπολογίζουμε τις ποσότητες που υπεισέρχονται στην (4.16) έκφραση του cumulant και κάνουμε τη γραφική παράσταση για διαφορετικά L . Ο κώδικας που χρησιμοποιήθηκε για τον υπολογισμό καθώς και η οργάνωση του αρχείου στο οποίο αποθηκεύονται οι ποσότητες αυτές βρίσκεται στο Παράρτημα 3. Λόγω του πεπερασμένου του μεγέθους, όσο αυξάνεται το L έχουμε και μικρότερα σφάλματα και άρα καλύτερη συμφωνία του σημείου τομής. Επίσης για υψηλές θερμοκρασίες $\beta < \beta_c$ παρατηρούμε ότι οι τιμές των σφαλμάτων είναι αρκετά μεγαλύτερες από αυτές για $\beta \rightarrow \beta_c$.

Οι σχέσεις βάθμισης για πεπερασμένη ποσότητα μπορούν να χρησιμοποιηθούν και εδώ προκειμένου να προσαρμοστεί η κρίσιμη θερμοκρασία και ο κρίσι-



Σχήμα 4.2: Μία γραφική αναπαράσταση των υπολογισμών της κρίσιμης θερμοκρασίας από προηγούμενες μελέτες [8].

β_c	$\frac{\alpha}{\nu}$	$\frac{\beta}{\nu}$	$\frac{\gamma}{\nu}$	ν
0.221654 ± 0.0003	0.16 ± 0.05	0.51 ± 0.02	2 ± 0.02	0.63 ± 0.03

Πίνακας 4.3: Οι τιμές των δικών μας αποτελεσμάτων μετά τη διενέργεια των μεθόδων που αναπτύχθηκαν.

μος εκθέτης $\frac{1}{\nu}$ μέσω της σχέσης βάρθμισης

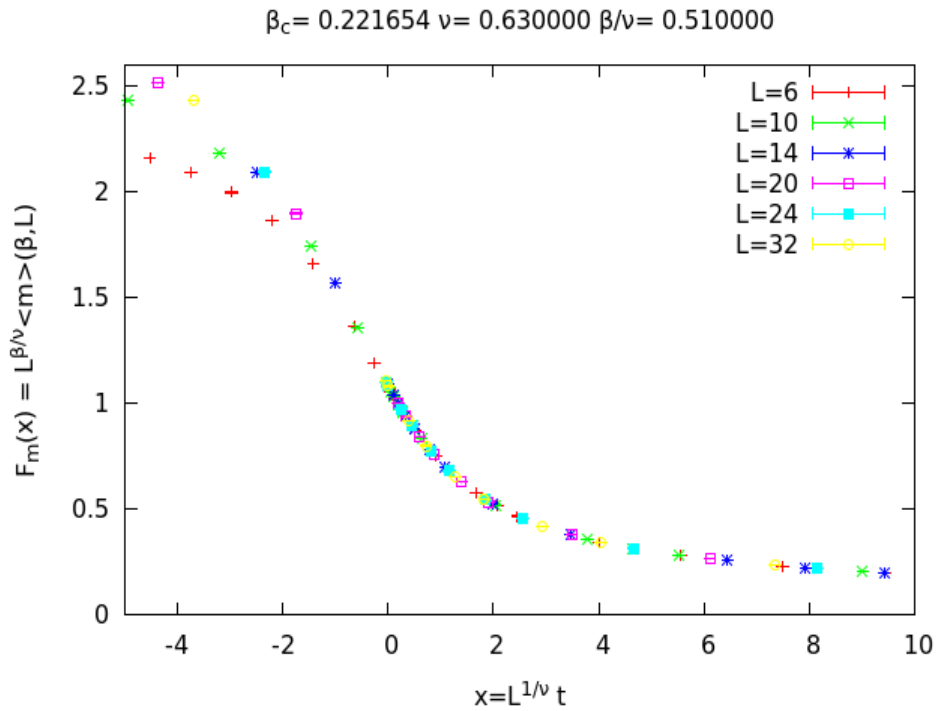
$$U = F_U(x) = F_U(L^{\frac{1}{\nu}}t) \quad (4.33)$$

(Σχ 4.8) Αντίστοιχα ορίζεται ο συσσωρευτής (cumulant) της ενέργειας

$$V = 1 - \frac{\langle e^4 \rangle}{3\langle e^2 \rangle^2} \quad (4.34)$$

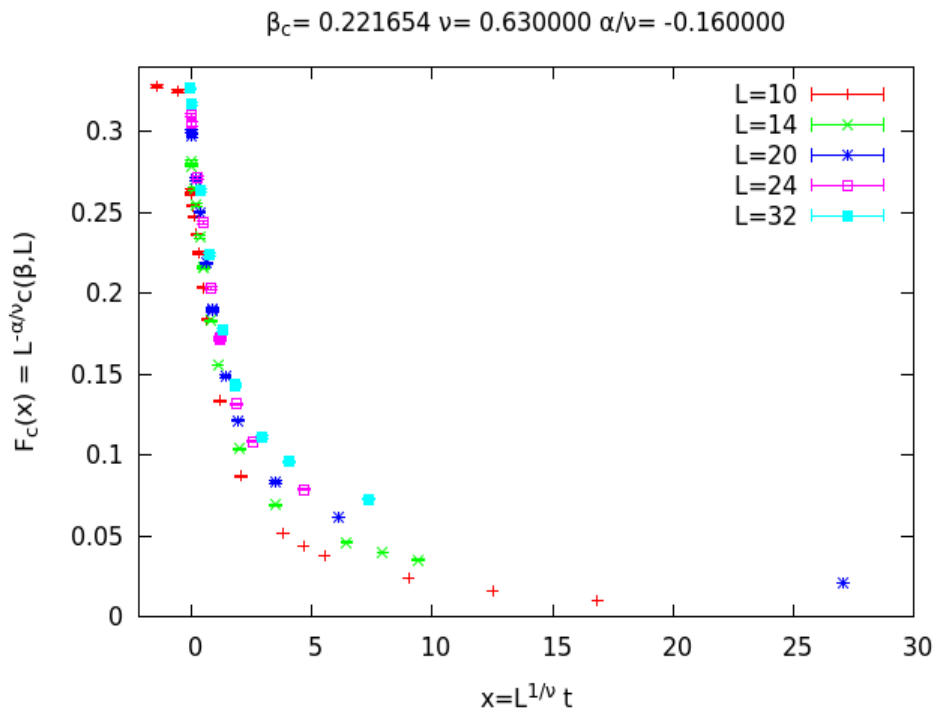
Σε μια μετάβαση δεύτερης τάξης το κρίσιμο σημείο για το V είναι $V^* = \frac{2}{3}$, [8] και όσο το σύστημά μας μεγαλώνει τείνει να πάρει αυτή την τιμή. Αν παραστήσουμε γραφικά τον cumulant της ενέργειας αυτό γίνεται ορατό και τα ελάχιστα των καμπυλών μας δίνουν την κρίσιμη θερμοκρασία (Σχ 4.5). Βαθμίζοντας τον cumulant της ενέργειας παρατηρείται συμπτωτική τάση των καμπυλών βάρθμισης κοντά στο μηδέν όπως αναμενόταν.

Η χαρακτηριστική παρατηρήσιμη ποσότητα που καταδεικνύει την αλλαγή φάσης (order parameter - παράμετρος τάξης) είναι η μαγνήτιση και όχι η ενέργεια. Η ενέργεια συσχετίζεται με τη μαγνήτιση, οπότε οι διακυμάνσεις της παρουσιάζουν και αυτές αύξηση κοντά στη μετάβαση φάσης μεγαλύτερες

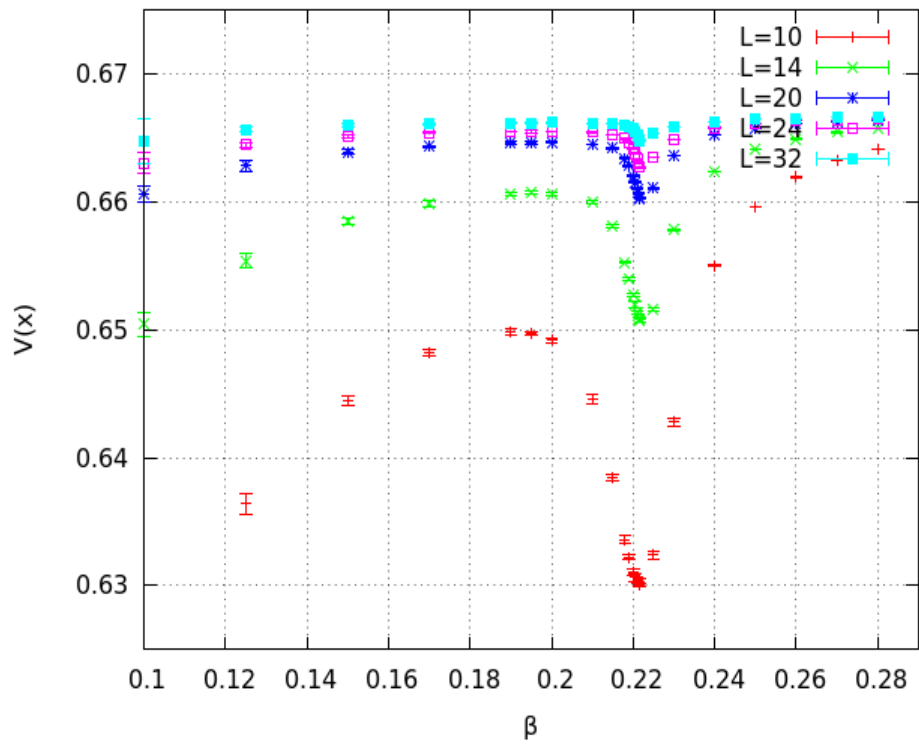


Σχήμα 4.3: Κατάρευση των καμπυλών $m(\beta, L)$ για διαφορετικά L . Οι αρχικές τιμές που χρησιμοποιήθηκαν ήταν $\nu = 0.6301$, $\beta = 0.3265$ [19]

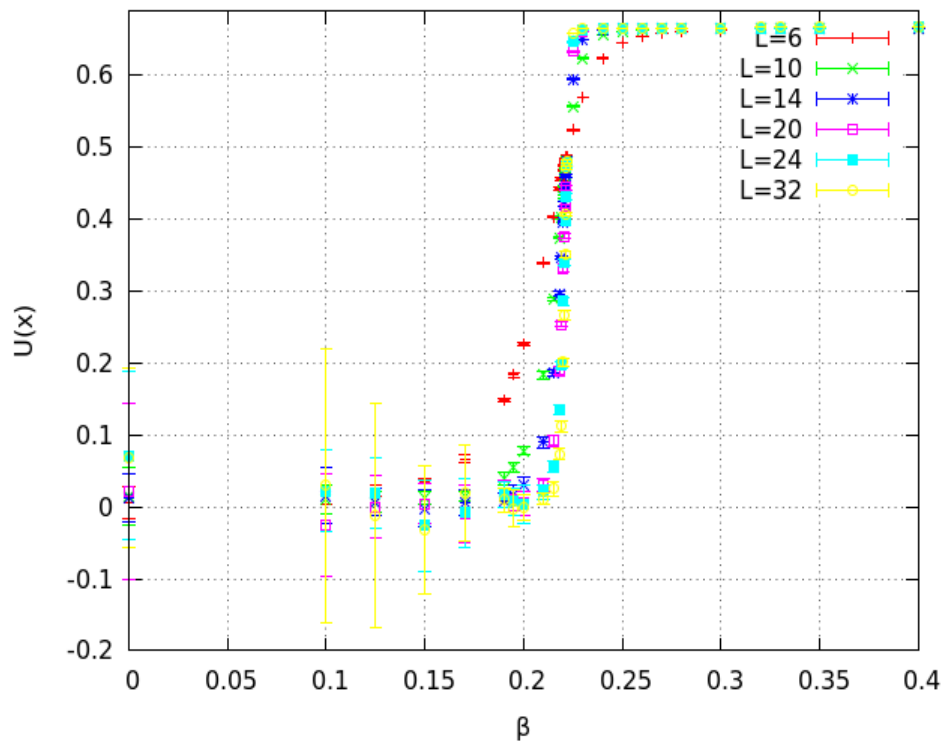
εκείνων της μαγνήτισης καθώς δεν είναι αυτή η παράμετρος τάξης. Τα αποτελέσματα για τον κρίσιμο εκθέτη ν που παίρνουμε από τη βύθιση του binder Cumumalant ταυτίζεται με αυτά από finite size scaling, όπως και η τιμή της κρίσιμης θερμοκρασίας.



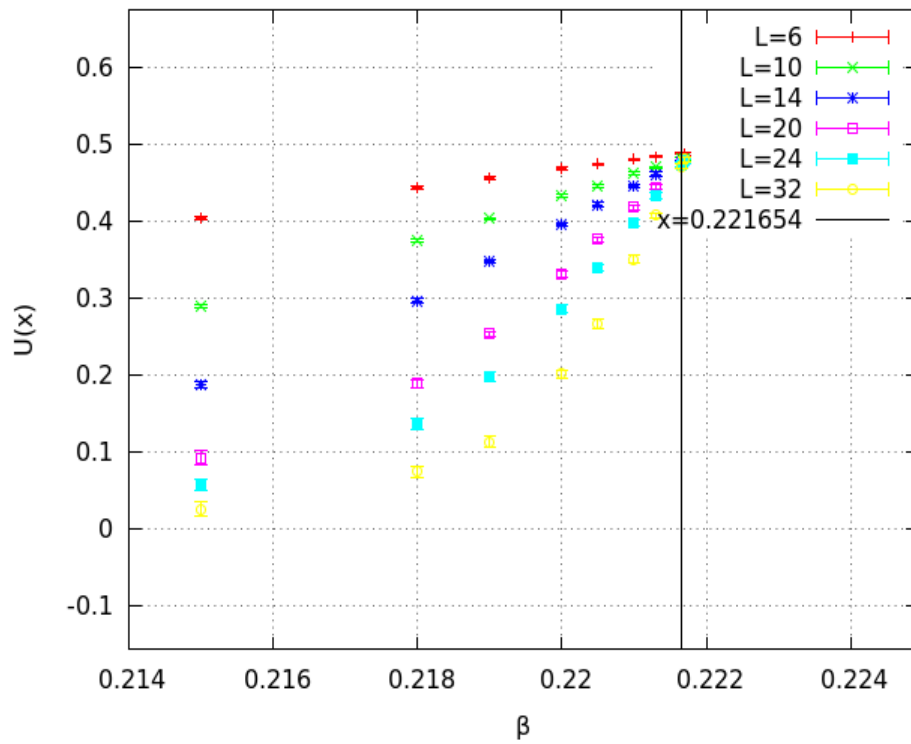
Σχήμα 4.4: Κατάρρευση των καμπυλών $c(\beta, L)$ για διαφορετικά L . Οι αρχικές τιμές που χρησιμοποιήθηκαν ήταν $\nu = 0.6301$, $\alpha = 0.101$. Εστιάζουμε στην περιοχή $t = 0$ όπου αντιστοιχεί στην κρίσιμη περιοχή θερμοκρασίας β_c . [19]



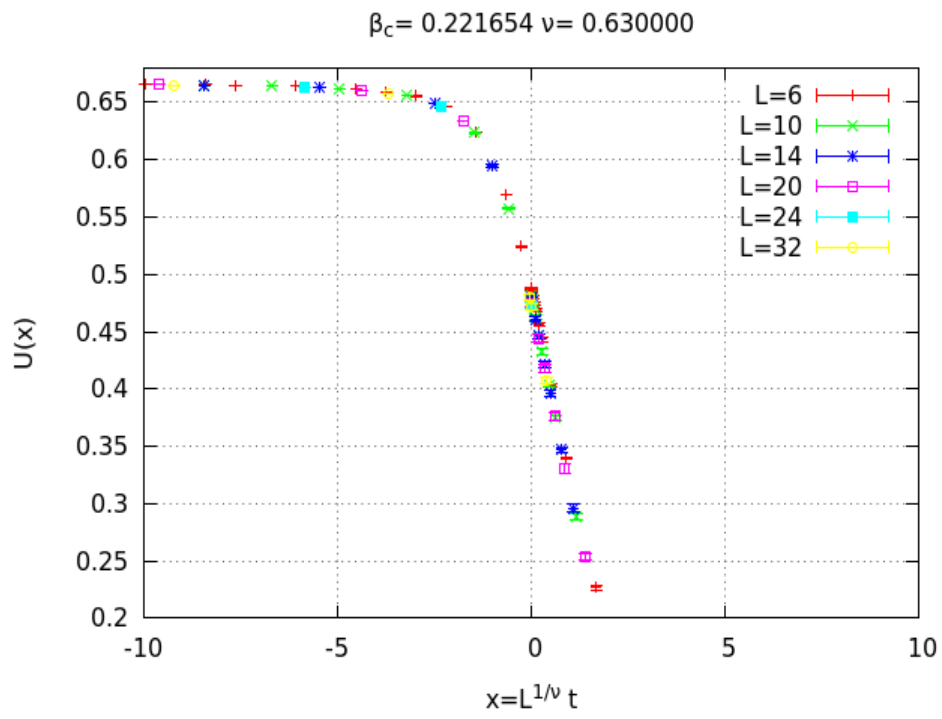
Σχήμα 4.5: Ο Energy Cumulant για διάφορα L . Όσο μεγαλώνει το σύστημα τείνει να πάρει την τιμή $2/3$, ενώ τα ελάχιστα των καμπυλών τείνουν στην κρίσιμη θερμοκρασία.



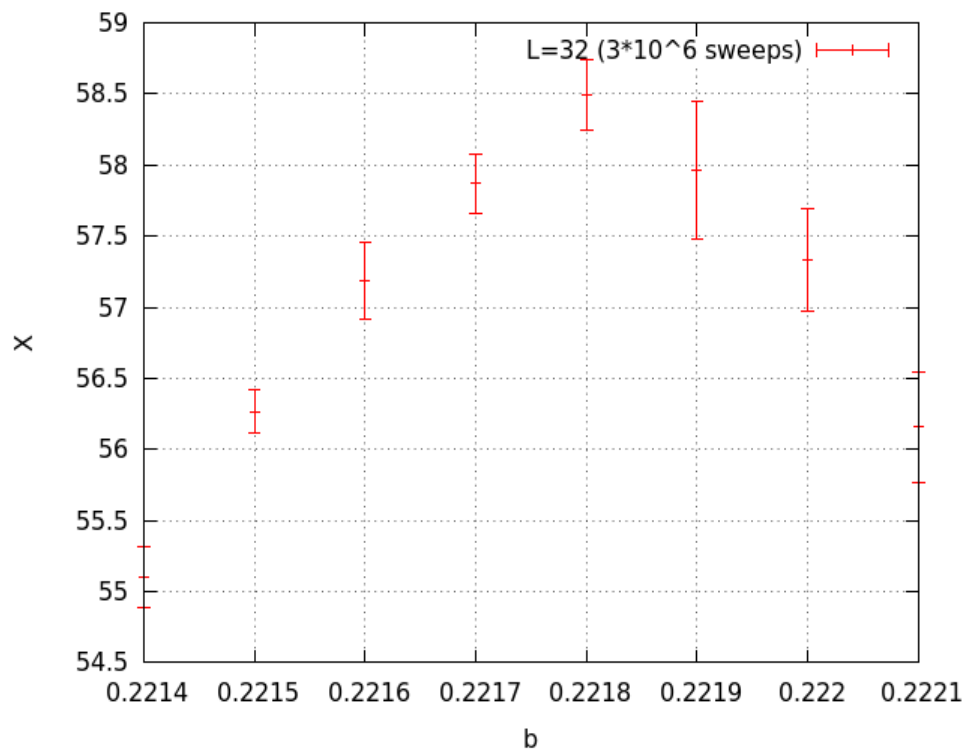
Σχήμα 4.6: Ο Binder Cumulant για διάφορα L και θερμοκρασίες. Παρατηρούμε την περιοχή που τέμνονται οι καμπύλες.



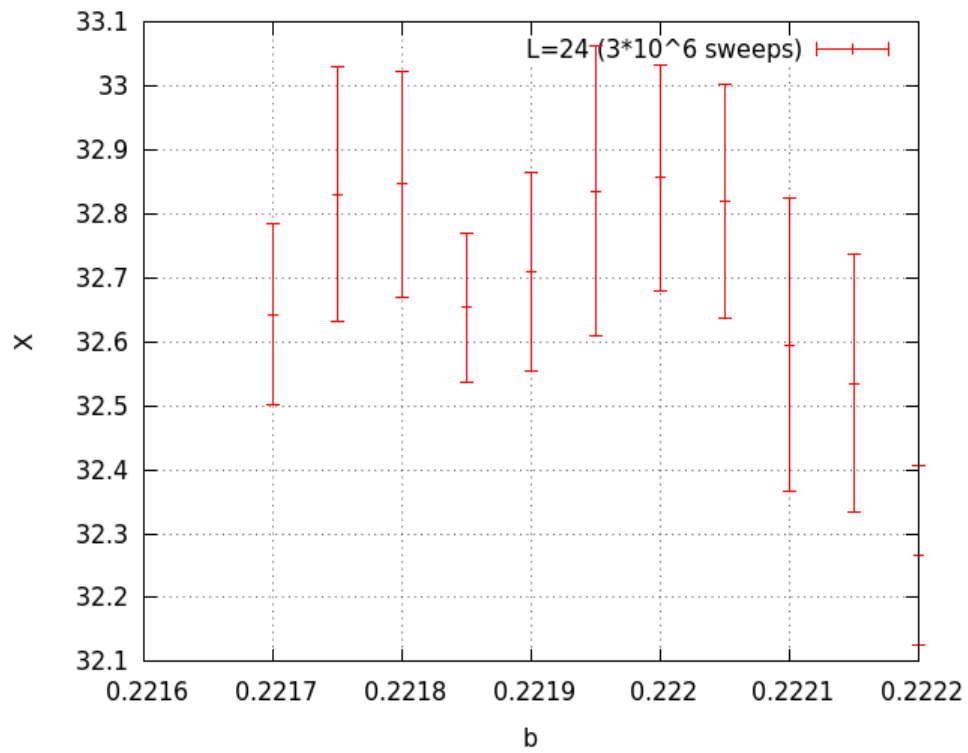
Σχήμα 4.7: Μεγεθύνουμε για $\beta = \beta_c = 0.221654$ και παρατηρούμε ότι η τομή των καμπυλών είναι για αυτή την τιμή. Βρίσκουμε $U \simeq 0.5$ για αυτή τη θερμοκρασία αναμενόμενο από βιβλιογραφία. [13]



Σχήμα 4.8: Βάθμιση του Binder Cumulant σύμφωνα με τη βάθμιση πεπερασμένου μεγέθους για τιμές $\nu = 0.63$ και $\beta_c = 0.221654$. Παρατηρούμε εξαιρετική βάθμιση για αυτές τις τιμές του κρίσιμου εκθέτη και θερμοκρασίας γύρω από το μηδέν.



Σχήμα 4.9: Για $L = 32$ κοντά στην κρίσιμη θερμοκρασία τα σφάλματα για τη μαγνητική επιδεκτικότητα είναι πολύ μεγάλα, καθιστώντας αυτή τη μέθοδο ανεπαρκή για τον προσδιορισμό του μεγίστου της $\chi(\beta)$.



Σχήμα 4.10: Περιοχή κοντά στην κρίσιμη για $L = 24$. Και εδώ τεράστια σφάλματα

Κεφάλαιο 5

Παραρτήματα

5.1 Παράρτημα 1

Στο Παράρτημα αυτό παραθέτουμε τον κώδικα που χρησιμοποιήθηκε για τις προσομοιώσεις για το τρισδιάστατο μοντέλο Ising σε κυβικό πλέγμα. (Ο πηγαίος κώδικας [1])

5.1.1 *init.c*

```
/****** init.c *****/
#include "include.h"
void init(int argc, char **argv){
    int i;
    size_t len =1024;
    char *buf;
    double obeta=-1.0;
    int OL=-1;
    long int oseed=-1;
    FILE *fin;
    L=-1;beta=-1.;nsweep=-1;start=-1;seed=-1;
    algorithm=0;//default is metropolis, 1 is wolff
    get_the_options(argc,argv);
    if( start == 0 || start == 1){
        if(L < 0 )locerr("L has not been set.");
        if(seed < 0 )locerr("seed has not been set.");
        if(beta < 0 )locerr("beta has not been set.");
        N=L*L*L; XNN=1; YNN = L; ZNN=L*L;
        s = (int *)malloc((size_t) (N*sizeof(int)));
    }
}
```

```

    if (!s) locerr("allocation failure in s[N]");
}
if(start < 0 )locerr("start has not been set.");
if(nswEEP < 0 )locerr("nswEEP has not been set");
/*Initialize probabilities*/
for(i=2;i<7;i+=2) prob[i] = exp(-2*beta*i);
/* wolff adding probability */
padd = 1.0 - exp(-2*beta);
switch(start){
case 0:/*cold start*/
    simmessage(stdout);
    for(i=0;i<N;i++) s[i]=1;
    break;
case 1:/*hot start*/
    simmessage(stdout);
    for(i=0;i<N;i++){
        if(drandom() < 0.5)
s[i] = 1;
        else
s[i] = -1;
    }
    break;
case 2:/*start from old configuration*/
    if(!(fin = fopen("conf","r")))locerr("Configuration file conf not found");
    buf=(char *)malloc((size_t) (len*sizeof(char)));/*allocate space for buf*/
    getline(&buf,&len,fin);
    fscanf(fin,"%*s %d %*s %d %*s %d %*s %lf %*s %ld",&OL,&OL,&OL,&obeta,&oseed);
    if( L < 0 )L=OL;
    if( L != OL )locerr("Given L different from the one read from conf");
    N=L*L*L; XNN=1; YNN = L; ZNN=L*L;
    if(seed < 0 ) seed = oseed;/*option overrides config*/
    if(beta < 0.) beta = obeta;
    s = (int *)malloc((size_t) (N*sizeof(int)));
    if (!s) locerr("allocation failure in s[N]");
    for(i=0;i<N;i++)
        if( fscanf(fin,"%d",&s[i]) != 1 || (s[i] != 1 && s[i] != -1))
locerr("conf ended before reading s[N]");
    fclose(fin);
    simmessage(stdout);
    break;

```



```

default:
    printf("start= %d not valid. Exiting...\n",start);
    exit(1);
    break;
}
}

```

Με την `init` αρχικοποιούνται όλα τα αναγκαία δεδομένα για την προσομοίωση.

5.1.2 *options.c*

```

/***** options.c *****/
#include "include.h"
char prog[1024];

/*Get the options function: See "man 3 getopt" for usage*/
/*Option letters are defined with this string*/
#define OPTARGS "?h1234567890.L:b:s:S:n:w"
void get_the_options(int argc,char **argv){
    int c,errflg = 0;

    strcpy(prog,(char *)basename(argv[0]));
    while (!errflg && (c = getopt(argc, argv, OPTARGS)) != -1){
        switch(c){
            case 'w':
                algorithm = 1;
                break;
            case 'L':
                L = atoi(optarg);
                break;
            case 'b':
                beta = atof(optarg);
                break;
            case 's':
                start = atoi(optarg);
                break;

```

```

    case 'S':
        seed = atol(optarg);
        break;
    case 'n':
        nsweep = atoi(optarg);
        break;
    case 'h':
        errflg++;/*call usage*/
        break;
    case '?':
        errflg++;/*call usage*/
        break;
    case '1':case '2':case '3':case '4':case '5':case '6':case '7':case '8':
    case '9':case '0':case '.':
        /*optind--;*//*it was not meant to be an option*/
        return;
    default:
        errflg++;
}/*switch*/
if(errflg) usage(argv);
}/*while...*/

}/*get_the_options()*/

void usage(char **argv){

    fprintf(stderr,"\
Usage: %s [options]                                \n\
    -L: Lattice length (N=L*L*L)                    \n\
    -b: beta (options beta overrides the one in config) \n\
    -s: start (0 cold, 1 hot, 2 old config.)          \n\
    -S: seed (options seed overrides the one in config) \n\
    -n: number of sweeps and measurements of E and M \n\
    -w: use wolff algorithm for the updates          \n\
Monte Carlo simulation of 2d Ising Model. Metropolis is used by \n\
default, cluster algorithms can be chosen with options. Using the \n\
options, the parameters of the simulations must be set for a new run\n\
(start=0,1). If start=2, a configuration is read from the file conf.\n",prog);

```

```

// printed usage message "
    exit(1);

}/*usage()*/

void locerr( char *errmes ){

    fprintf(stderr,"%s: %s Exiting...\n",prog,errmes);
    exit(1);

}

/*print a message about the simulation: */
#include <time.h>
void simmessage(FILE *fp){

    char USER[100],HOST[100],MACH[100];
    time_t t;

    time(&t);/* store time in seconds in *t. see: "man 2 time" */
    strcpy(USER,getenv("USER"));
    strcpy(MACH,getenv("HOSTTYPE"));
    strcpy(HOST,getenv("HOST"));

    fprintf(fp,"\
# #####\n\
#      3d Ising Model with Metropolis algorithm on square lattice      \n\
# Run on %s ( %s ) by %s on %s#                                       \n\
# L      = %d (Lattice linear dimension, N=L*L*L)                       \n\
# seed   = %ld (random number gener. seed)                             \n\
# nsweeps = %d (No. of sweeps)                                         \n\
# beta   = %f                                                            \n\
# start  = %d (0 cold, 1 hot, 2 old config)\n",
          HOST,MACH,USER,ctime(&t),
          L,seed,nsweep,beta,start);
    fflush(fp);
}/* message()*/

```

Τα Options είναι υπεύθυνα για τον καθορισμό των παραμέτρων για τις προσομοιώσεις από τον χρήστη και την επιλογή του αλγορίθμου για αυτές.

5.1.3 *include.h*

```
/****** include.h *****/
#define _GNU_SOURCE
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <unistd.h>
#include <math.h>
#include <string.h>

int L;
int N;
int XNN, YNN, ZNN;

int *s;
double beta;
int nsweep, start;
double prob[7];

int E(), M();
double drandom();
long seed;
void init(int, char **), met(), measure(), simmessage(FILE *), locerr(char*);
void usage(char **), get_the_options(int, char**), simend();
//wolff cluster: adding probability
double padd;
int algorithm;
```

Εδώ περιέχονται οι ορισμοί των μεταβλητών μας και οι βιβλιοθήκες που είναι αναγκαίες για το "κτήσιμο" του προγράμματος.

5.1.4 *end.c*

```
/****** end.c *****/
#include "include.h"

void simend(){
```

```

FILE *fout;
int i;

/* output the configuration */
rename("conf","conf.old");
fout = fopen("conf","w");
fprintf(fout,"# Configuration of 3d Ising model on square lattice. Parameters (N=Lx
fprintf(fout,"Lx= %d Ly= %d Lz= %d beta= %f seed= %ld\n",L,L,L,beta,seed);
for(i=0;i<N;i++){
    fprintf(fout,"%d\n",s[i]);
}
fclose(fout);
}

```

Στην end υπάρχει ο κώδικας της που καλείται στο τέλος της προσομοίωσης και μας δίνει τα αποτελέσματα.

5.1.5 *main.c*

```

/***** main.c *****/
#include "include.h"

int main(int argc, char **argv){

    int isweep;

    init(argc,argv);
    for(isweep=0;isweep<nsweep;isweep++){
        if(algorithm == 1){wolff();}
        else{met();}
        measure();
    }
    simend();
}

```

Η κύρια συνάρτηση του κώδικά μας που επιλέγει ανάμεσα στους αλγορίθμους Wolff, Metropolis.

5.1.6 *drandom.c*

```
/****** drandom.c *****/
#include "include.h"

#define a 16807
#define m 2147483647
#define q 127773
#define r 2836
#define conv (1.0/(m-1))

double drandom(){
    long l;

    l=seed/q;
    seed = a*(seed-q*l) - r*l;
    if(seed < 0) seed +=m;

    // printf("r= %f s= %d\n",conv*(seed-1),seed);
    return conv*(seed-1);
}
```

Η γεννήτρια του τυχαίου αριθμού r .

5.1.7 *measure.c*

```
/****** measure.c *****/
#include "include.h"

void measure(){
    printf ("%d %d\n",E(),M());
}

int E(){
    int e,sum,i,nn;
    e=0;
    for(i=0;i<N;i++){
        /*Sum of neighboring spins: only forward nn necessary in the sum*/
        if((nn=i+XNN)>= N) nn -= N; sum = s[nn];
        if((nn=i+YNN)>= N) nn -= N; sum += s[nn];
    }
}
```

```

        if((nn=i+ZNN)>= N) nn -= N; sum += s[nn];
        e += sum*s[i];
    }
    return -e;
}

```

```

int M(){
    int i,m;
    m=0;
    for(i=0;i<N;i++) m+=s[i];
    return m;
}

```

Η πιο σπουδαία συνάρτηση του προγράμματός μας καθώς είναι υπεύθυνη για τον υπολογισμό των ποσοτήτων της ενέργειας και μαγνήτισης.

5.2 Παράρτημα 2

***** Wolff Algorithm *****

```

/* padd = 1 - exp(-2*beta*J)
*/

```

```

#include "include.h"

```

```

void wolff(){

```

```

    int i,sp,oldspin,newspin,current,nn;
    int *stack;
    int ncluster;

```

```

    /*ask for the stack memory*/
    stack = (int *)malloc((size_t)(N*sizeof(int)));
    if(!stack)locerr("allocation failure for stack in wolff()");

```

```

    /*choose the seed spin for the cluster, put it on the stack and flip it */
    i=N*drandom();
    stack[0]=i;
    sp=1;

```

```

oldspin = s[i];
newspin = -s[i];
s[i]     = newspin;
ncluster = 1;
/*start loop on spins on the stack: */
while(sp){
    /*Pull a site off the stack */
    current = stack[--sp]; //value of --sp is **after** decrement
    /*check neighbours*/
    if((nn=current+XNN)>=N) nn -= N;
    if(s[nn] == oldspin)
        if(drandom()<padd){
stack[sp++] = nn; //value of sp++ is **before** increment
s[nn] = newspin; //flip the spin of cluster
ncluster++;
        }
    if((nn=current-XNN)<0) nn += N;
    if(s[nn] == oldspin)
        if(drandom()<padd){
stack[sp++] = nn; //value of sp++ is **before** increment
s[nn] = newspin; //flip the spin of cluster
ncluster++;
        }
    if((nn=current+YNN)>=N) nn -= N;
    if(s[nn] == oldspin)
        if(drandom()<padd){
stack[sp++] = nn; //value of sp++ is **before** increment
s[nn] = newspin; //flip the spin of cluster
ncluster++;
        }
    if((nn=current-YNN)<0) nn += N;
    if(s[nn] == oldspin)
        if(drandom()<padd){
stack[sp++] = nn; //value of sp++ is **before** increment
s[nn] = newspin; //flip the spin of cluster
ncluster++;
        }
    if((nn=current+ZNN)>=N) nn -= N;
    if(s[nn] == oldspin)
        if(drandom()<padd){

```



```

stack[sp++] = nn;//value of sp++ is **before** increment
s[nn] = newspin; //flip the spin of cluster
ncluster++;
    }
    if((nn=current-ZNN)<0) nn += N;
    if(s[nn] == oldspin)
        if(drandom(<padd){
stack[sp++] = nn;//value of sp++ is **before** increment
s[nn] = newspin; //flip the spin of cluster
ncluster++;
        }

    }/*while(sp)*/
    printf("#clu %d\n",ncluster);
    free(stack);
}/*wolff()*/

```

Αυτός είναι ο αλγόριθμος του Wolff που χρησιμοποιήθηκε για την εύρεση των αποτελεσμάτων μας.

5.2.1 *jack.c*

```

/*****                               jack .c                               *****/
Simple jackknife program for computation of jackknife errors of data.
The jackknife function can be incerted to any program.
*/
#include <stdlib.h>
#include <stdio.h>
#include <string.h>
#include <math.h>
#include <unistd.h>
#include <libgen.h>

#define MAXDAT 1000000
#define STRLEN 200
char prog[STRLEN];
int JACK,maxdat;

void jackknife(int,int,double *,double *,double *,double *,double *);
void get_the_options(int ,char **),usage(char **),locerr(char *);

```

```

int main(int argc, char **argv){
    int    ndat=0;
    double O,d0,chi,dchi;
    double *x;
    strcpy(prog, (char *)basename(argv[0]));
    maxdat=-1; JACK=10;
    get_the_options(argc,argv);
    if( maxdat <= 0 ) maxdat = MAXDAT;
    x  = (double *) calloc((size_t) maxdat, (size_t) sizeof(double));
    /*Read data from stdin as long as it fits the array x[] .
       ndat counts the number of data.*/
    while( scanf("%lg",&x[ndat])==1 ){
        ndat++;
        if(ndat == maxdat){//we give user a warning if we ignore some data
            fprintf(stderr, "# %s: Warning: Read ndat= %d. Reached the limit %d\n",
                prog, ndat, maxdat);
            break;          //break the while loop
        }
    }
    jackknife(ndat, JACK, x, &O, &d0, &chi, &dchi); //calculate...
    printf("# NDAT = %d data. JACK = %d groups\n", ndat, JACK); //...and print
    printf("# <o>, chi= (<o^2>-<o>^2)\n");
    printf("# <o> +/- err                chi +/- err\n");
    printf("%.15lg %.15lg %.15lg %.15lg\n", O, d0, chi, dchi);
}
/*****
/* jackknife routine: you can use it in any of your programs...*/
*****/
void jackknife(int ndat, int jack, double *x,
    double *av0, double *er0, double *avchi, double *erchi){

    int i,j,binw,bin;
    double *O,*chi;
    O  = (double *) calloc((size_t) jack , (size_t) sizeof(double));
    chi = (double *) calloc((size_t) jack , (size_t) sizeof(double));
    binw = ndat/jack;
    if(binw<1)locerr("jackknife: binw < 1");
    ndat = binw * jack; //only full bins considered
    /* average value */
    for(i=0;i<ndat;i++)

```

```

        for(j=0;j<jack;j++){
            if( (i/binw) != j ){ //then we add this data point to the bin
0 [j] += x[i];
            }
        }
        for(j=0;j<jack;j++){ 0 [j] /= (ndat-binw); //average in each bin
/* susceptibility: */
        for(i=0;i<ndat;i++){
            for(j=0;j<jack;j++){
                if( (i/binw) != j ){ //then we add this data point to the bin
chi[j] += (x[i]-0[j])*(x[i]-0[j]);
            }
        }
        for(j=0;j<jack;j++){ chi[j] /= (ndat-binw); //average in each bin
/* Compute averages: */
        *av0 = 0.0; *avchi = 0.0;
        for(j=0;j<jack;j++){
            *av0 += 0[j]; *avchi += chi[j];
        }
        *av0 /= jack; *avchi /= jack;
/* Compute errors: */
        *er0 = 0.0; *erchi = 0.0;
        for(j=0;j<jack;j++){
            *er0 += (0 [j]-*av0 )*(0 [j]-*av0 );
            *erchi += (chi[j]-*avchi)*(chi[j]-*avchi);
        }
        *er0 = sqrt(*er0); *erchi = sqrt(*erchi);
        free(0);free(chi); //release memory back to the system
    }
    /*****/
void locerr( char *errmes ){
    fprintf(stderr,"%s: %s Exiting...\n",prog,errmes);
    exit(1);
}

#define OPTARGS "?hj:d:"
void get_the_options(int argc,char **argv){

    int c,errflg = 0;
    while (!errflg && (c = getopt(argc, argv, OPTARGS)) != -1){

```

```

switch(c){
case 'j':
    JACK = atoi(optarg);
    break;
case 'd':
    maxdat = atoi(optarg);
    break;
case 'h':
    errflg++;/*call usage*/
    break;
default:
    errflg++;
}/*switch*/
if(errflg) usage(argv);
}/*while...*/
}/*get_the_options()*/

void usage(char **argv){
    fprintf(stderr,"\
Usage: %s  [options] <file>\n\
        -j  : No. jack groups Def. 10\n\
        -d  : Give the maximum number of data points read.Def. %d\n\
Computes <o>, chi= (<o^2>-<o>^2)\n\
Data is in one column from stdin.\n",prog,MAXDAT);
    exit(1);
}/*usage()*/

```

Παραθέτουμε των κώδικα που χρησιμοποιήθηκε για τον υπολογισμό σφαλμάτων των μετρούμενων ποσοτήτων.

5.3 Παράρτημα 3

```

\***** Binder Cumulant*****
#include <stdlib.h>
#include <stdio.h>
#include <string.h>
#include <math.h>
#include <unistd.h>
#include "nrutil.h"
#include "nrutil-ext.h"

```

```

#define TRUE 1
#define FALSE 0
#define STRLEN 200
#define MAXDAT 100000
char prog[STRLEN];
double N,M,NE,beta; /*Normalization*/
int JACK;
int VERBOSE;
int maxdat;
main(int argc, char **argv){

    int i,j;
    int ndat,binw,bin;
    double *O,*O2,*O4,a,b,avO,avO2,erO,erO2,avchi,erchi,avO4,erO4;
    double *OE,*O2E,*O4E;
    double *E,*E2,*E4;
    double avE,erE;
    double *chi,*cum,avcum,ercum;
    double *chie,*cume,*cumd,*lm,*lmd;
    double avchie,avcume,avcumd,avlm,avlmd;
    double erchie,ercume,ercumd,erlm,erlmd;
    double *cov,avcov,ercov;
    double *x,*y;
    FILE *fp;

    strcpy(prog,(char *)basename(argv[0]));
    maxdat=-1;N=1.0;JACK=10;M=-1.0;VERBOSE=FALSE;NE=1.0;beta=1.0;
    get_the_options(argc,argv);
    if( M <= 0.0 ) M=N;
    if( maxdat <= 0 ) maxdat = MAXDAT;

    if( optind == argc ) fp = stdin;
    if( optind == argc - 1 )
        if( !(fp=fopen(argv[optind],"r")) )
            locerr("Could not open data file");
    if( optind < argc - 1 )
        locerr("Supply only one data file");
    O = cdvector(1,JACK);O2 = cdvector(1,JACK);O4 = cdvector(1,JACK);
    OE = cdvector(1,JACK);O2E = cdvector(1,JACK);O4E = cdvector(1,JACK);

```

```

E   = cdvector(1,JACK);E2  = cdvector(1,JACK);E4  = cdvector(1,JACK);
chi = cdvector(1,JACK);cum = cdvector(1,JACK);chie= cdvector(1,JACK);
cume= cdvector(1,JACK);cumd= cdvector(1,JACK);lm  = cdvector(1,JACK);
lmd = cdvector(1,JACK);cov = cdvector(1,JACK);

x   = dvector(1,maxdat);y = dvector(1,maxdat);

ndat = 1;
while( fscanf(fp,"%lg%lg",&y[ndat],&x[ndat]) == 2){
    if(ndat == maxdat){
        fprintf(stderr,"%s: Only %d data read. Use -d option for more.\n",
            prog,ndat);
        ndat++;
        break;
    }
    ndat++;
}
ndat--;
binw = ndat/JACK;
if( binw < 1 ){
    fprintf(stderr,
        "%s: Only ndat= %d data read. JACK= %d, binw=ndat/JACK= %d\n",
        prog,ndat,JACK,binw);
    exit(1);
}
ndat = binw * JACK;/* Only full bins are considered*/
rewind(fp);

for(i=1;i<= ndat;i++){
    a = x[i]; b = y[i];
    for(j=1;j<=JACK;j++)
        if( (i-1)/binw != j -1 ){
0 [j] += a; 02[j] += a*a; 04[j] += a*a*a*a;
E [j] += b; E2[j] += b*b; E4[j] += b*b*b*b;
04E[j] += a*a*a*a*b;
02E[j] += a*a*b;
0E [j] += a*b;
        }
    }
}

```

```

/*ndat now is the number of data elements in each bin*/
ndat -= binw;
av0   = 0.0; er0   = 0.0; avE   = 0.0; erE = 0.0;
avchi = 0.0; erchi = 0.0; avchie = 0.0; erchie = 0.0;
avcum = 0.0; ercum = 0.0; avcume = 0.0; ercume = 0.0;
avcumd = 0.0; ercumd = 0.0; avlm  = 0.0; erlm  = 0.0;
avlmd = 0.0; erlmd = 0.0; avcov  = 0.0; ercov  = 0.0;
for(j=1;j<=JACK;j++){
  O  [j] /= N*ndat; O2[j] /= N*N*ndat; /*We put normalization here*/
  O4  [j] /= N*N*N*N*ndat;
  E  [j] /= NE*ndat; E2[j] /= NE*NE*ndat; /*We put normalization here*/
  E4  [j] /= NE*NE*NE*NE*ndat;
  OE  [j] /= N      *NE*ndat;
  O2E [j] /= N*N    *NE*ndat;
  O4E [j] /= N*N*N*N *NE*ndat;
  chi [j] = O2[j] - O[j]*O[j]; /*Fluctuations here*/
  chie[j] = E2[j] - E[j]*E[j];
  cum [j] = O4[j]/(O2[j]*O2[j]);
  cume[j] = E4[j]/(E2[j]*E2[j]);
  cumd[j] = (O2[j]*O4E[j]+O4[j]*(O2[j]*E[j]-2.0 * O2E[j]))/
    (O2[j]*O2[j]*O2[j]);
  lm  [j] = E[j] - OE [j]/O [j];
  lmd [j] = E[j] - O2E[j]/O2[j];
  cov [j] = (OE[j]-E[j]*O[j])/sqrt(chie[j]*chi[j]);
  av0   += O  [j];
  avchi += chi [j];
  avcum += cum [j];
  avcumd += cumd [j];
  avcume += cume [j];
  avE   += E   [j];
  avchie += chie [j];
  avlm  += lm  [j];
  avlmd += lmd [j];
  avcov += cov [j];
}
av0   /= JACK; avchi   /= JACK; avcum /= JACK; avE   /= JACK; avchie /= JACK;
avcume /= JACK; avcumd /= JACK; avlm /= JACK; avlmd /= JACK; avcov /= JACK;
for(j=1;j<=JACK;j++){
  er0   += (O  [j]-av0   )*(O  [j]-av0   );
  erchi += (chi [j]-avchi )*(chi [j]-avchi );
}

```

```

ercum += (cum [j]-avcum )*(cum [j]-avcum );
erE   += (E   [j]-avE   )*(E   [j]-avE   );
erchie += (chie[j]-avchie)*(chie[j]-erchie);
ercume += (cume[j]-avcume)*(cume[j]-avcume);
ercumd += (cumd[j]-avcumd)*(cumd[j]-avcumd);
erlm   += (lm   [j]-avlm   )*(lm   [j]-avlm   );
erlmd  += (lmd  [j]-avlmd  )*(lmd  [j]-avlmd  );
ercov  += (cov  [j]-avcov  )*(cov  [j]-avcov  );
}
er0    = sqrt(er0    );
erchi  = sqrt(erchi );
ercum  = sqrt(ercum );
erchie = sqrt(erchie);
erE    = sqrt(erE    );
ercume = sqrt(ercume);
ercumd = sqrt(ercumd);
erlm   = sqrt(erlm  );
erlmd  = sqrt(erlmd );
ercov  = sqrt(ercov );
avchi  *= M; erchi *= M;/*normalization of susceptibility*/
avchie *= NE*beta*beta; erchie *= NE*beta*beta;
printf("# N = %d data. JACK = % d groups\n",ndat+binw,JACK);
printf("# Normalizations: NE= %lg beta= %lg NM= %lg M= %lg\n",NE,beta,N,M );
printf("# MONTE CARLO VALUES OF OBSERVABLES\n");
printf("# E   = <E>/NE\n");
printf("# CV  = beta*2*(<E^2>-<E>^2)/NE\n");
printf("# O   = <|O|>/NM\n");
printf("# CHI = (<O^2>-<|O|^2)*M\n");
printf("# BC  = <O^4>/<O^2>^2 = cumulant\n");
printf("# BCD = (<O^2><O^4 E>+<O^4>(<O^2><E>-2*<O^2 E>))/(<O^2>^3*NE)=d/d beta BC
printf("# LO  = (<E>-<O E>/<O >)/NE = log of |O|\n");
printf("# LOD = (<E>-<O^2 E>/<O^2>)/NE = log of O^2\n");
printf("# EC  = <E^4>/<E^2>^2 = Energy cumulant\n");
printf("# COV = (<EO>-<E><O>)/sqrt((<E^2>-<E>^2)(<O^2>-<O>^2))\n");
printf("# beta  E dE  CV dCV  O dO  CHI dCHI  BC dBC  BCD dBCD  LO dLO  LOD dLOD
if(VERBOSE)
    printf("          NDAT NDATinBIN  BINWIDTH JACKGRPS\n");
else
    printf("\n");
printf("# =====\n");

```



```

    printf("%lg %.15lg %.15lg %.15lg %.15lg %.15lg %.15lg %.15lg %.15lg %.20lg %.2
beta, avE,erE, avchie,erchie, av0,er0, avchi,erchi, avcum,ercum,
avcumd,ercumd, avlm,erlm, avlmd,erlmd, avcume,ercume, avcov,ercov);
    if(VERBOSE)
        printf(" %d %d %d %d\n",ndat+binw,ndat,binw,JACK);
    else
        printf("\n");
}/*main*/

```

```

locerr( char *errmes ){

    fprintf(stderr,"%s: %s Exiting....\n",prog,errmes);
    exit(1);

}

```

```

#define OPTARGS "?hn:N:m:M:j:vd:e:b:"
get_the_options(int argc,char **argv){

```

```

    int c,errflg = 0;

```

```

    while (!errflg && (c = getopt(argc, argv, OPTARGS)) != -1){
        switch(c){
            case 'e':
                NE= atof(optarg);
                break;
            case 'b':
                beta = atof(optarg);
                break;
            case 'v':
                VERBOSE = TRUE;
                break;
            case 'M':
            case 'm':
                M = atof(optarg);
                break;
            case 'N':

```

```

    case 'n':
        N = atof(optarg);
        break;
    case 'j':
        JACK = atoi(optarg);
        break;
    case 'd':
        maxdat = atoi(optarg);
        break;
    case 'h':
        errflg++;/*call usage*/
        break;
    case '?':
        errflg++;/*call usage*/
        break;
    default:
        errflg++;
}/*switch*/
if(errflg) usage(argv);
}/*while...*/

}/*get_the_options()*/

usage(char **argv){

    fprintf(stderr,"\n
Usage: %s [options] <file>\n\
    -j : No. jack groups Def. 10\n\
    -n,N: Normalization N of observable Def. 1.0\n\
    -m,M: Normalization M of fluctuations Def. N\n\
    -v : Prints more information on the results line.\n\
    -d : Give the maximum number of data points read.Def. %d\n\
    -e : Normalization NE for energy.\n\
    -b : beta for specific heat.\n\
Computes:\n\
=====
E = <E>/NE\n\
CV = beta*2*(<E^2>-<E>^2)/NE\n\
O = <|O|>/N\n\

```

```

CHI = (<O^2>-<|O|>^2)*M\n\
BC = <O^4>/<O^2>^2 = cumulant\n\
BCD = (<O^2><O^4 E>+<O^4>(<O^2><E>-2*<O^2 E>))/(<O^2>^3*NE)=d/d beta BC \n\
LO = (<E>-<O E>/<O >)/NE = log of |O|\n\
LOD = (<E>-<O^2 E>/<O^2>)/NE = log of O^2\n\
EC = <E^4>/<E^2>^2 = Energy cumulant\n\
Example:\n\
-----\n\
If O=M/N then in order to obtain chi_M you should use -m N\n\
If O=M                                     -n N\n\
-----\n\
Data is in two columns in <file> or stdin, total energy and observable.\n\
K.Anagnostopoulos, NBI Sep 97.\n",prog,MAXDAT);

    exit(1);

}/*usage()*/

```

Τέλος παραθέτουμε των κώδικα για τον υπολογισμό των ποσοτήτων του Binder
Cumulant για την ενέργεια και τη μαγνήτιση.

Κεφάλαιο 6

Βιβλιογραφία

- [1] M.J.Newman, G.T.Barkeman, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*
- [2] Wu.F, *The Potts Model Rev.1982*
- [3] S.Wanslebern, D.P.Landau, *Investigation of critical dynamics in the three-dimensional Ising Model, 1991*
- [4] K. A. Hawick and A. Leist and D. P. Playne, *Cluster and Fast Update Lattice Simulations Using Graphical Processing Units, 1996*
- [5] A. L. Talapov and H. W. J. Blote, *The Magnetization of the 3D Ising Model, 2010*
- [6] A. K. Murtazaev,I. K. Kamilov,A. B. Babaev , *Critical behavior of a cubic-lattice 3D Ising model,2004*
- [7] Pablo Tamayo, Rayan Gupta, *Critical Exponents for the 3D Ising Model, 1996*
- [8] Nikos Drakos, *High and Low Temperature Series Estimates for the Critical Temperature of the 3D Ising Model, 1996*
- [9] Hagen Kleinert, *Critical exponents from seven-loop strong-coupling ϕ^4 theory in three dimensions, 1998*
- [10] Miroslav Kolesik, Masuo Suzuki, *Accurate estimates of 3D Ising critical exponents using the Coherent-Anomaly Method, 2008*

- [11] Heiko Rieger and Peter Young, *Critical exponents for the three-dimensional Ising*
- [12] Christian Holm and Wolfhard Janke, *Critical exponents of the classical three-dimensional Heisenberg model: A single-cluster Monte Carlo study, 1991*
- [13] S.V.Isakov,P.Fendley,A.W.W.Ludwig, *Dynamics at and near conformal quantum critical points, 2010*
- [14] G. Bhanot, M. Creutz and J. Lack, *Phys. Rev. Lett. 69, (1992)*
- [15] A. J. Guttmann and I. G. Enting, . *Phys. A 26, (1993)*
- [16] J. C. Le Guillou and J. Zinn Justin, *J. Phys. (Paris) 48, (1987)*
- [17] J. Oitmaa, C. J. Hamer and W. Zheng, *J. Phys. A 24 (1991)*
- [18] G. Bhanot, M. Creutz, U. Glassner and K. Schilling, *Phys. Rev. B 49, (1994)*
- [19] Pelissetto, Andrea Vicari, *Critical phenomena and renormalization-group theory, Phys.R 2002*
- [20] Konstantinos Anagnostopoulos, *Introduction to Monte Carlo simulations and Statistical physics, 2011*