

Διδιάστατο Πρότυπο Potts με Αριθμητικές Προσομοιώσεις Monte Carlo

Φίλιος Κωνσταντίνος

Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών & Φυσικών Επιστημών

ΕΜΠ

10 Νοεμβρίου 2010

Περίγραμμα

- 1 Θεωρητικά Στοιχεία
 - Πρότυπο Potts
 - Μεταβάσεις φάσης
 - Το τετραγωνικό πρότυπο Potts
- 2 Προσομοιώσεις
 - Αλγόριθμοι προσομοίωσης
 - Αριθμητικά αποτελέσματα
- 3 Συνεχείς μεταβάσεις
 - $q = 2$
 - $q = 3$
 - $q = 4$
- 4 Μεταβάσεις πρώτης τάξης
 - $q = 5$
 - $q \geq 6$

Θεμελιώδεις Έννοιες

Στατιστική Φυσική

- Μελετά τη **θερμοδυναμική** συμπεριφορά σωμάτων
- Αξιοποιεί τη θεωρία πιθανοτήτων σε **στατιστικά μοντέλα**
- Μακροσκοπικές ιδιότητες → μικροσκοπικές ιδιότητες σωματιδίων

Θεμελιώδεις Έννοιες

Στατιστική Φυσική

- Μελετά τη **θερμοδυναμική** συμπεριφορά σωμάτων
- Αξιοποιεί τη θεωρία πιθανοτήτων σε **στατιστικά μοντέλα**
- Μακροσκοπικές ιδιότητες → μικροσκοπικές ιδιότητες σωματιδίων

Προσομοιώσεις Monte Carlo

- 1 Εξαντλητικοί **υπολογισμοί** πρακτικά μη πραγματοποιήσιμοι
- 2 **Δειγματοληψία** → **Εκτίμηση** παρατηρήσιμων μεγεθών

Θεμελιώδεις Έννοιες

Στατιστική Φυσική

- Μελετά τη **θερμοδυναμική** συμπεριφορά σωμάτων
- Αξιοποιεί τη θεωρία πιθανοτήτων σε **στατιστικά μοντέλα**
- Μακροσκοπικές ιδιότητες → μικροσκοπικές ιδιότητες σωματιδίων

Προσομοιώσεις Monte Carlo

- 1 Εξαντλητικοί **υπολογισμοί** πρακτικά μη πραγματοποιήσιμοι
- 2 **Δειγματοληψία** → **Εκτίμηση** παρατηρήσιμων μεγεθών

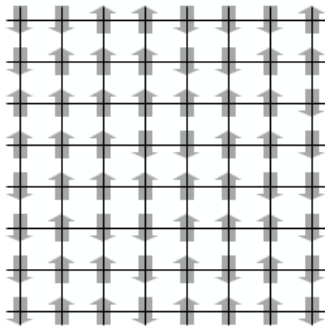
Πρότυπο Potts

- 1 Στερά σώματα αποτελούμενα από **πλέγματα σωματιδίων**
- 2 Αλληλεπιδράσεις σωματιδίων λόγω των spin τους
- 3 Μελέτη μαγνητικών ιδιοτήτων συναρτήσει θερμοκρασίας

Ιστορική αναδρομή

Πρότυπο Ising

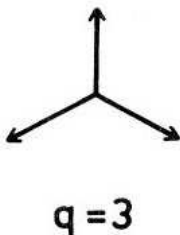
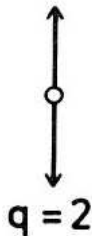
1. Επινοήθηκε το 1920 από τον Wilhelm Lenz
2. Η μονοδιάστατη εκδοχή επιλύθηκε από τον Ernst Ising
3. Προέβλεπε δυο καταστάσεις spin (πάνω και κάτω)



Ιστορική αναδρομή

Γενικεύσεις του Ising

- 1 Οι Ashkin-Teller το 1943 επεξέτειναν σε 4 καταστάσεις spin
- 2 Ο Cyril Domb γενίκευσε σε q καταστάσεις το 1952
- 3 Μελετήθηκε από τον Renfrey Potts ως **διανυσματικό μοντέλο Potts**
- 4 Στο όριο $q \rightarrow \infty$ ισοδυναμεί με το **XY model**

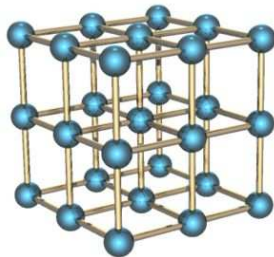


Αλληλεπιδράσεις spin

Χαμιλτονιανή

$$\mathcal{H} = -\mathcal{J} \sum_{\langle ij \rangle} \delta(s_i, s_j), \quad \delta(s_i, s_j) = \begin{cases} 1 & s_i = s_j \\ 0 & s_i \neq s_j \end{cases}$$

- q καταστάσεις spin
- $\mathcal{J} > 0$ σιδηρομαγνητικό, $\mathcal{J} < 0$ αντισιδηρομαγνητικό



Παράμετροι συστήματος

Επιλογή παραμέτρων προς μελέτη

- 1 $\mathcal{J} > 0$: Σιδηρομαγνητικό μοντέλο \rightarrow ενίσχυση ομόρροπων δεσμών
- 2 $D = 2$: Διδιάστατο πλέγμα
- 3 Τετραγωνική γεωμετρία
- 4 Ένα spin ανά πλεγματική θέση
- 5 $z = 4$: Αλληλεπίδραση με πλησιέστερους γείτονες

Μεταβάσεις φάσης

Φυσικές καταστάσεις ή φάσεις

- Μορφές της ύλης με διακριτές ιδιότητες (π.χ. στερεή, υγρή, αέρια)
- Σε μαγνητικά υλικά: παραμαγνητική, σιδηρομαγνητική
- Ενδεχόμενη **διαφορετική συμμετρία** (ή τάξη)

Μεταβάσεις φάσης

Φυσικές καταστάσεις ή φάσεις

- Μορφές της ύλης με διακριτές ιδιότητες (π.χ. στερεή, υγρή, αέρια)
- Σε μαγνητικά υλικά: παραμαγνητική, σιδηρομαγνητική
- Ενδεχόμενη **διαφορετική συμμετρία** (ή τάξη)

Παράμετρος τάξης/σταξίας

- **Μαγνήτιση** (m)
- Παραμαγνητική φάση: Αυθόρμητα αμαγνήτιστο σύστημα ($m = 0$)
- Σιδηρομαγνητική φάση: Μόνιμα μαγνητισμένο σύστημα ($m = 1$)

Μεταβάσεις φάσης

Φυσικές καταστάσεις ή φάσεις

- Μορφές της ύλης με διακριτές ιδιότητες (π.χ. στερεή, υγρή, αέρια)
- Σε μαγνητικά υλικά: παραμαγνητική, σιδηρομαγνητική
- Ενδεχόμενη **διαφορετική συμμετρία** (ή τάξη)

Παράμετρος τάξης/σταξίας

- **Μαγνήτιση** (m)
- Παραμαγνητική φάση: Αυθόρμητα αμαγνήτιστο σύστημα ($m = 0$)
- Σιδηρομαγνητική φάση: Μόνιμα μαγνητισμένο σύστημα ($m = 1$)

Μετάβαση φάσης

- **Κυρίαρχη μεταβλητή**: θερμοκρασία, μαγνητικό πεδίο, κλπ
- **Κρίσιμο σημείο**: θερμοκρασία μετάβασης φάσης
- **Τάξη**: Είτε **συνεχείς** είτε **πρώτης τάξης**

Μελέτη μεταβάσεων

Βήματα

- Τοποθετούμε το σώμα θερμοκρασία T (ή $\beta = 1/kT$)
- Μεταβάλλουμε τη θερμοκρασία και μετρούμε χαρακτηριστικές ποσότητες

Ενδιαφέροντα μεγέθη

- Μαγνήτιση (m) και μαγνητική επιδεκτικότητα (χ)
- Ενέργεια (e) και ειδική θερμότητα (c)
- Binder cumulant (bc) και Energy cumulant (bc)

Μεταβάσεις πρώτης τάξης

Ιδιότητες

- Ασυνέχεια στην καμπύλη της μαγνήτισης (m)
- Λανθάνουσα θερμότητα (e και e_c)
- Συνύπαρξη φάσεων (ιστόγραμμα m ή e)
- Υστέρηση μαγνήτισης (m)



Συνεχείς μεταβάσεις

Ιδιότητες

- Ομαλή καμπύλη μαγνήτισης (m)
- Ανωμαλία στην μαγνητική επιδεκτικότητα χ
- Παγκοσμιότητα

Συνεχείς μεταβάσεις

Ιδιότητες

- Ομαλή καμπύλη μαγνήτισης (m)
- Ανωμαλία στην μαγνητική επιδεκτικότητα χ
- Παγκοσμιότητα

Παγκοσμιότητα

- Κλάσεις μοντέλων με κριτήριο από **διάσταση πλέγματος, εύρος αλληλεπίδρασης, κατευθύνσεις spin**
- Νόμος δύναμης (power-law) στο κρίσιμο σημείο \rightarrow Κρίσιμοι εκθέτες

Κρίσιμοι εκθέτες

Ανηγγμένη θερμοκρασία

$$t = \frac{T - T_c}{T_c} = \frac{\beta_c}{\beta} - 1$$

Μήκος συσχέτισης

$$\xi = |t|^{-\nu}$$

Μαγνητική επιδεκτικότητα

$$\chi = |t|^{-\gamma}$$

Μαγνήτιση

$$m = |t|^\beta$$

Ειδική θερμότητα

$$c = |t|^{-\alpha}$$

Finite size scaling

Σκοπός

- Μπορούμε να προσομοιώσουμε πεπερασμένα L , όχι άπειρα
- Μεταβολή μεγεθών με τη γραμμική διάσταση L
- Με δεδομένο κρίσιμο σημείο βρίσκουμε εκθέτη ώστε να συμπίπτουν οι καμπύλες
- Με δεδομένους εκθέτες βρίσκουμε το κρίσιμο σημείο

Μαγνήτιση

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

Ειδική θερμότητα

$$c = L^{\frac{\alpha}{\nu}} \tilde{c}(L^{\frac{1}{\nu}} t)$$

Μαγνητική επιδεκτικότητα

$$\chi = L^{\frac{\gamma}{\nu}} \tilde{\chi}(L^{\frac{1}{\nu}} t)$$

Τετραγωνικό σιδηρομαγνητικό πρότυπο Potts

Κρίσιμο σημείο

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

Μετάβαση φάσης

- $q \leq 4$: Συνεχής
- $q > 4$: Πρώτης τάξης

Κρίσιμοι εκθέτες

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

Περιγραμματα

- 1 Θεωρητικά Στοιχεία
 - Πρότυπο Potts
 - Μεταβάσεις φάσης
 - Το τετραγωνικό πρότυπο Potts
- 2 Προσομοιώσεις
 - Αλγόριθμοι προσομοίωσης
 - Αριθμητικά αποτελέσματα
- 3 Συνεχείς μεταβάσεις
 - $q = 2$
 - $q = 3$
 - $q = 4$
- 4 Μεταβάσεις πρώτης τάξης
 - $q = 5$
 - $q \geq 6$

Αλγόριθμος Heat-bath

Χαρακτηριστικά

- Εναλλαγής μεμονωμένων spin (single-spin-flip)
- Πιθανότητα επιλογής νέου spin ανάλογη του βάρους Boltzmann

Αλγόριθμος Heat-bath

Χαρακτηριστικά

- Εναλλαγής μεμονωμένων spin (single-spin-flip)
- Πιθανότητα επιλογής νέου spin ανάλογη του βάρους Boltzmann

Βήματα αλγορίθμου

1. Επιλέγουμε μια τυχαία θέση στο πλέγμα, έστω k .
2. Θεωρούμε κατάσταση μ με ενέργεια E_μ όπου spin $s_k = \mu \in \mathcal{Q}$
3. Επιλέγουμε νέα κατάσταση ν με ενέργεια E_ν spin $s_k = \nu \in \mathcal{Q}$ με πιθανότητα Boltzmann

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

Αλγόριθμος Swendsen-Wang

Βήματα αλγορίθμου

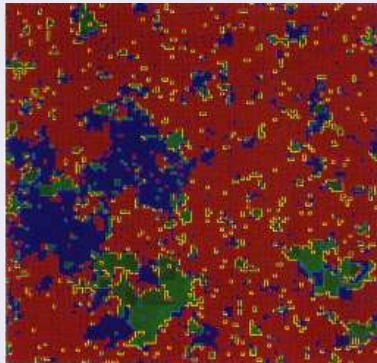
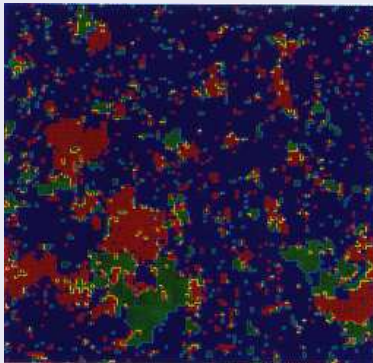
- 1 Θεωρούμε ομάδες ισάριθμες σημείων του πλέγματος
- 2 Επιλέγουμε όλα τα στοιχεία ένα προς ένα
- 3 Έστω στοιχείο s_k με γείτονες s_j
- 4 Αν $s_k = s_j$, τα τοποθετούμε στην ίδια ομάδα με πιθανότητα

$$p_{add} = 1 - e^{-\beta}$$

- 5 Τελικά κάθε πλεγματικά σημείο ανήκει σε κάποια ομάδα
- 6 Κάθε ομάδα παίρνει τυχαίο spin $n \in \mathcal{Q}$ με πιθανότητα $1/q$

Εναλλαγή spin clusters

Παράδειγμα 3 καταστάσεων



Πραγματοποίηση προσομοιώσεων

Βήματα εργασίας

- 1 Επιλέγουμε θερμοκρασία (β)
- 2 Τρέχουμε τον αλγόριθμο για αρκετά sweeps (τυπικά $10^4 - 10^7$)
- 3 Σε κάθε β μετρούμε E_s και M_s
- 4 Δεν είναι όλες οι μετρήσεις ανεξάρτητες μεταξύ τους
- 5 Κάνουμε στατιστική επεξεργασία όλων των ζευγών (M_s, E_s)
- 6 Παράγουμε τα ενδιαφέροντα μεγέθη (m, e, c, χ, bc, ec)
- 7 Προχωρούμε σε επόμενο β

Υπολογιστικά εργαλεία

Αλγόριθμοι Monte Carlo

- Αλγόριθμοι Metropolis, Heatbath, Swendsen-Wang
- Γλώσσα προγραμματισμού C
- Βασισμένα σε κώδικα Barkema και Swendsen-Wang
- Επέκταση στις D διαστάσεις
- Επιλογή ανάμεσα σε **ελικοειδείς** και **περιοδικές Σ.Σ.**

Υπολογιστικά εργαλεία

Αλγόριθμοι Monte Carlo

- Αλγόριθμοι Metropolis, Heatbath, Swendsen-Wang
- Γλώσσα προγραμματισμού C
- Βασισμένα σε κώδικα Barkema και Swendsen-Wang
- Επέκταση στις D διαστάσεις
- Επιλογή ανάμεσα σε **ελικοειδείς** και **περιοδικές Σ.Σ.**

Επεξεργασία & ανάλυση

- tcsh scripts για συντονισμό
- php, sed & awk scripts για στατιστική επεξεργασία
- gnuplot για τα γραφήματα
- latex για κείμενο και παρουσίαση

Ανάλυση αποτελεσμάτων

Συμπεράσματα

- Κυρίως ποιοτικά μέσω γραφημάτων
- Περιορισμένες ποσοτικές εκτιμήσεις

Κρίσιμο σημείο

- Σημείο τομής καμπυλών Binder Cumulant
- Προσαρμογή ψευδοκρίσιμων σημείων
 $\beta_{pc}(L^{-1/\nu}; q) = \beta_{num}(q) + c(q) \cdot L^{-1/\nu}$
- Κρίσιμοι εκθέτες & Finite Size Scaling

Τάξη μετάβασης

- Ιστογράμματα μαγνήτισης & ενέργειας (συνύπαρξη φάσεων)
- Λανθάνουσα θερμότητα στο Energy cumulant
- Υστέρηση μαγνήτισης

Επιλογή q για τις προσομοιώσεις

Συνεχείς μεταβάσεις

- $q = 2$. Σύγκριση με Ising, δοκιμή Heatbath
- $q = 3$. Πρώτη μη γνωστή περίπτωση.
- $q = 4$. Οριακά χαρακτηριστικά

Επιλογή q για τις προσομοιώσεις

Συνεχείς μεταβάσεις

- $q = 2$. Σύγκριση με Ising, δοκιμή Heatbath
- $q = 3$. Πρώτη μη γνωστή περίπτωση.
- $q = 4$. Οριακά χαρακτηριστικά

Μεταβάσεις πρώτης τάξης

- $q = 5$. Ασθενή χαρακτηριστικά πρώτης τάξης
- $q = 6$. Ευδιάκριτα χαρακτηριστικά πρώτης τάξης
- $q = 10$. Έντονες καμπύλες υστέρησης και διαχωρισμός φάσεων

Περιγραμματα

- 1 Θεωρητικά Στοιχεία
 - Πρότυπο Potts
 - Μεταβάσεις φάσης
 - Το τετραγωνικό πρότυπο Potts
- 2 Προσομοιώσεις
 - Αλγόριθμοι προσομοίωσης
 - Αριθμητικά αποτελέσματα
- 3 Συνεχείς μεταβάσεις
 - $q = 2$
 - $q = 3$
 - $q = 4$
- 4 Μεταβάσεις πρώτης τάξης
 - $q = 5$
 - $q \geq 6$

Δυο καταστάσεις

Ισοδυναμία με Ising

- Ίδιος αριθμός spin, κοινές συμμετρίες
- Ίδιο universality class, κοινοί κρίσιμοι εκθέτες
- Όμοιες καμπύλες μεγεθών

Χαμιλτονιανή

$$\mathcal{H}_{Potts} = \frac{1}{2} \mathcal{H}_{Ising} - \frac{\mathcal{J}N}{2}$$

Κρίσιμο σημείο

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

$$\beta_{c, Potts}(2) = \ln(1 + \sqrt{2}) \approx 0.8813$$

Προσομοιώσεις με Heatbath

Παράμετροι προσομοίωσης

- Ευρεία περιοχή γύρω από το αναμενόμενο β_c
- 96.000 sweeps
- Τετραγωνικά πλέγματα με $L = 32, 48, 64, 96, 128$
- Ελικοειδείς Σ.Σ.

Προσομοιώσεις με Heatbath

Παράμετροι προσομοίωσης

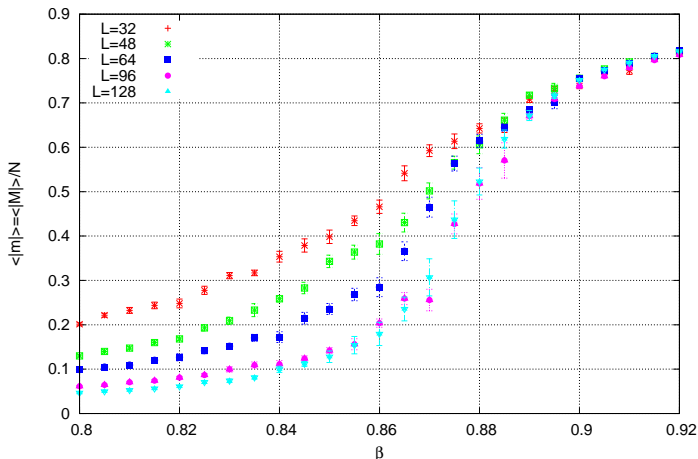
- Ευρεία περιοχή γύρω από το αναμενόμενο β_c
- 96.000 sweeps
- Τετραγωνικά πλέγματα με $L = 32, 48, 64, 96, 128$
- Ελικοειδείς Σ.Σ.

Στόχος

- Αξιολόγηση αποδοτικότητας
- Σύγκριση με Swendsen-Wang
- Επιβεβαίωση κρίσιμου σημείου

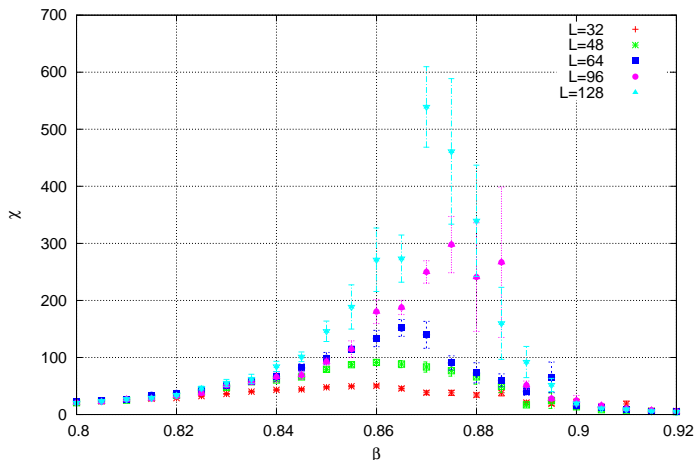
Μαγνήτιση

Ομαλή καμπύλη μαγνήτισης



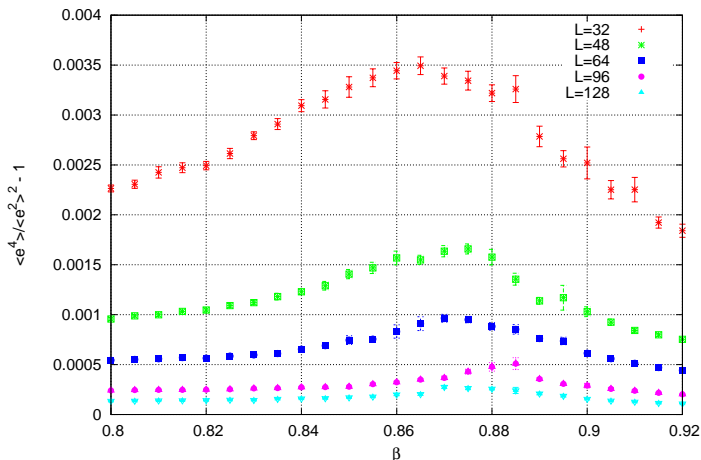
Μαγνητική επιδεκτικότητα

Πολύ μεγάλα σφάλματα



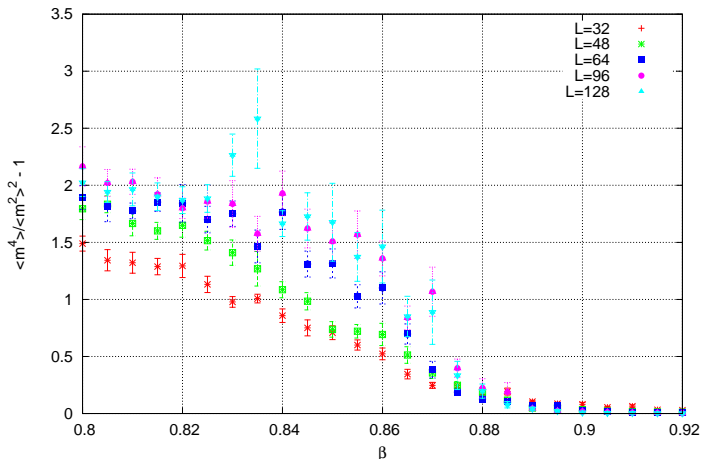
Energy Cumulant

Απουσία λανθάνουσας θερμότητας



Binder Cumulant

Επιβεβαίωση κρίσιμου σημείου - Μεγάλα σφάλματα



Προσομοιώσεις με Swendsen-Wang

Παράμετροι προσομοίωσης

- Στενότερη περιοχή γύρω από το αναμενόμενο β_c
- Και πάλι 96.000 sweeps
- Τετραγωνικά πλέγματα με $L = 32, 48, 64, 96, 128, 192, 256$
- Ελικοειδείς Σ.Σ.

Προσομοιώσεις με Swendsen-Wang

Παράμετροι προσομοίωσης

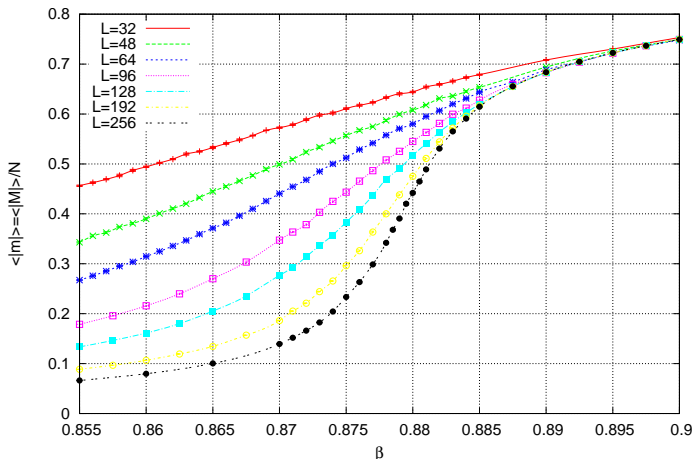
- Στενότερη περιοχή γύρω από το αναμενόμενο β_c
- Και πάλι 96.000 sweeps
- Τετραγωνικά πλέγματα με $L = 32, 48, 64, 96, 128, 192, 256$
- Ελικοειδείς Σ.Σ.

Στόχος

- Αξιολόγηση αποδοτικότητας
- Σύγκριση με Heatbath

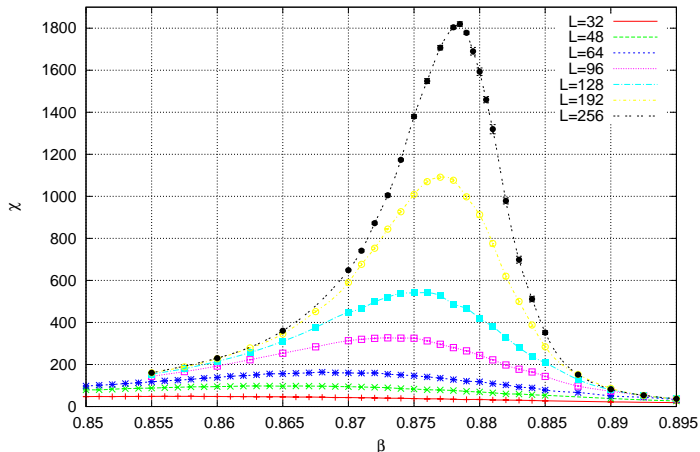
Μαγνήτιση

Ομαλή καμπύλη μαγνήτισης



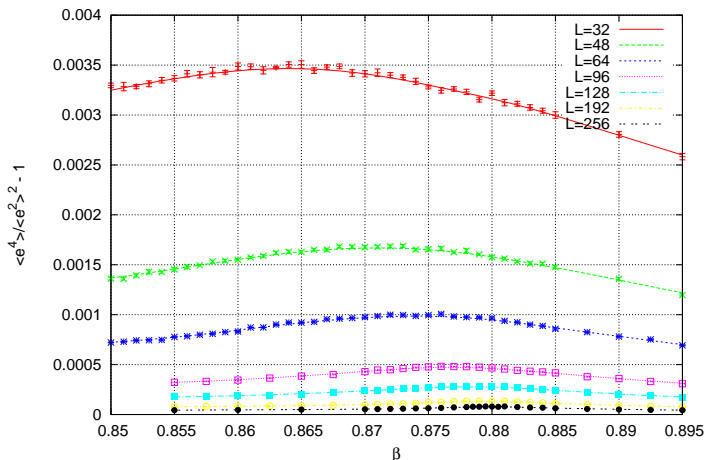
Μαγνητική επιδεκτικότητα

Ψευδοκρίσιμα σημεία - συρρίκνωση σφαλμάτων



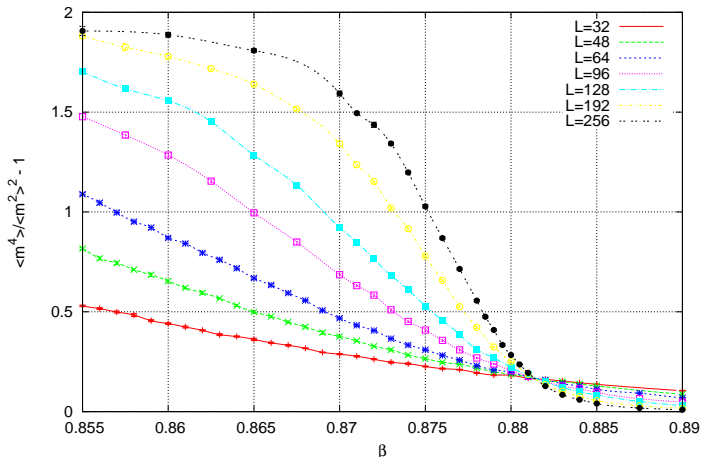
Energy Cumulant

Απουσία λανθάνουσας θερμότητας



Binder Cumulant

Σημείο τομής στο $\beta_{binder}(2) \in [0.8805, 0.8825]$



Κρίσιμοι εκθέτες

Κρίσιμο β

$$\beta_{fss}(2) \approx 0.8813$$

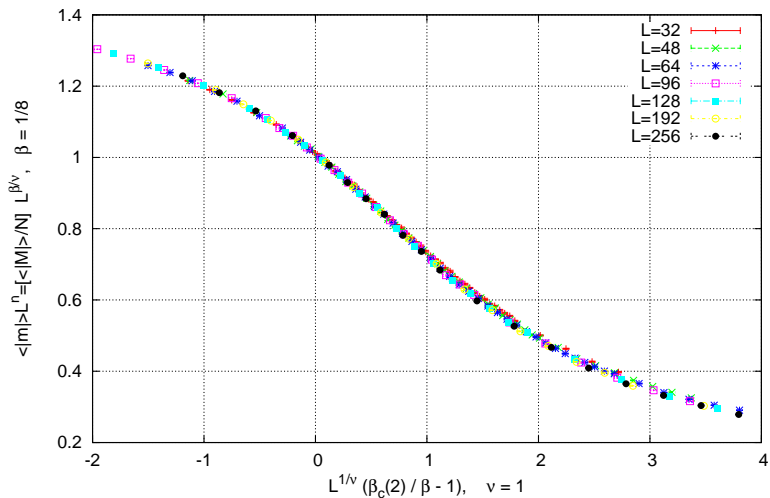
Εκθέτης μήκους συσχέτισης

$$\nu = 1$$

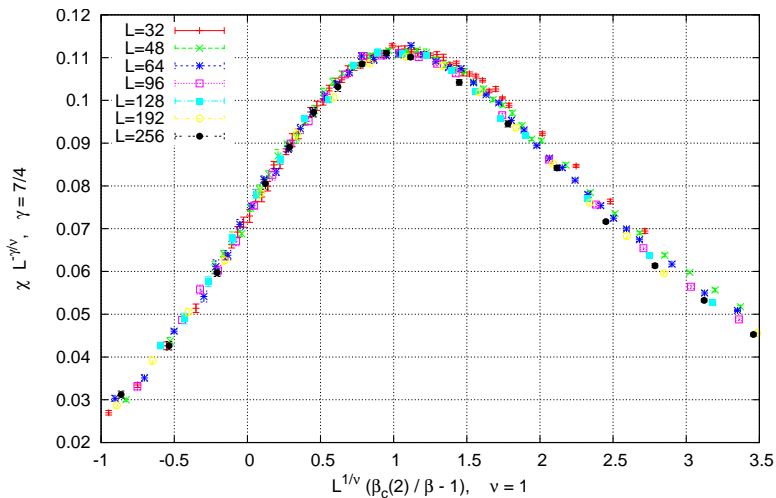
Τιμές εκθετών

Μέγεθος	Εκθέτης	Τιμή
Μαγνήτιση	β	1/8
Μαγνητική επιδεκτικότητα	γ	7/4
Binder Cumulant	ω	0

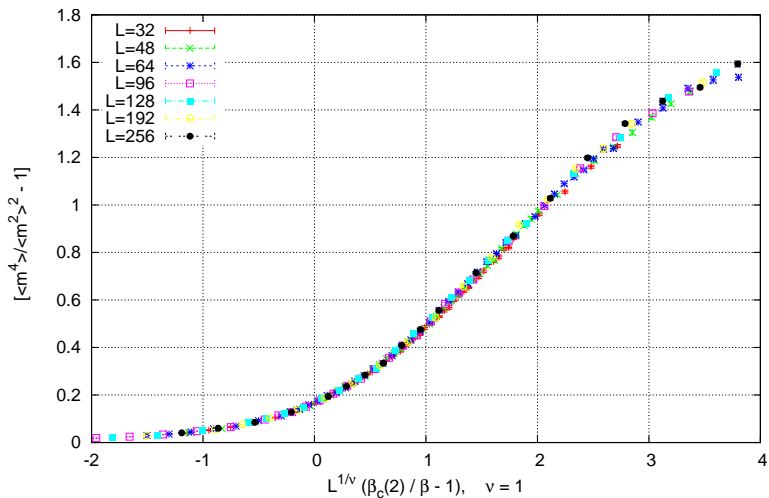
Μαγνήτιση



Μαγνητική επιδεκτικότητα



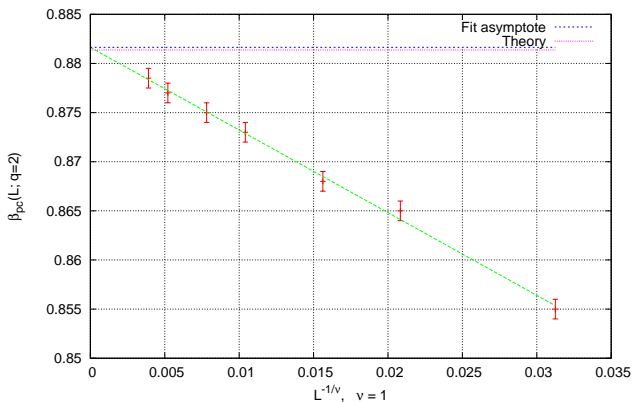
Binder Cumulant



Προσαρμογή ψευδοκρίσμων β

$$\beta_{pc}(L^{-1}; q := 2) = \beta_{num}(2) + c(2) \cdot L^{-1}$$

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



Προσομοιώσεις με Swendsen-Wang

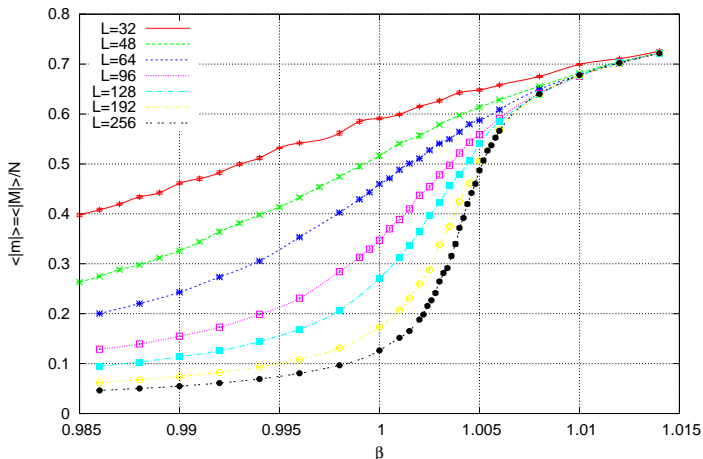
$$q = 3$$

Παράμετροι προσομοίωσης

- Στενότερη περιοχή γύρω από το αναμενόμενο
 $\beta_c(3) = \ln(1 + \sqrt{3}) \approx 1.0050$
- 120.000 sweeps
- Τετραγωνικά πλέγματα με $L = 32, 48, 64, 96, 128, 192, 256$

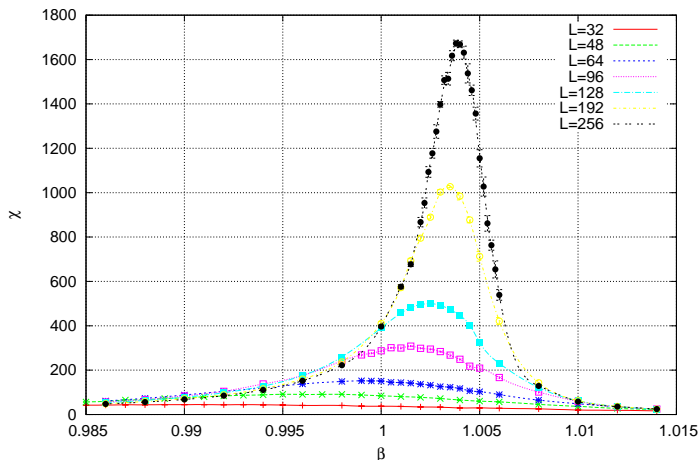
Μαγνήτιση

Ομαλή καμπύλη μαγνήτισης



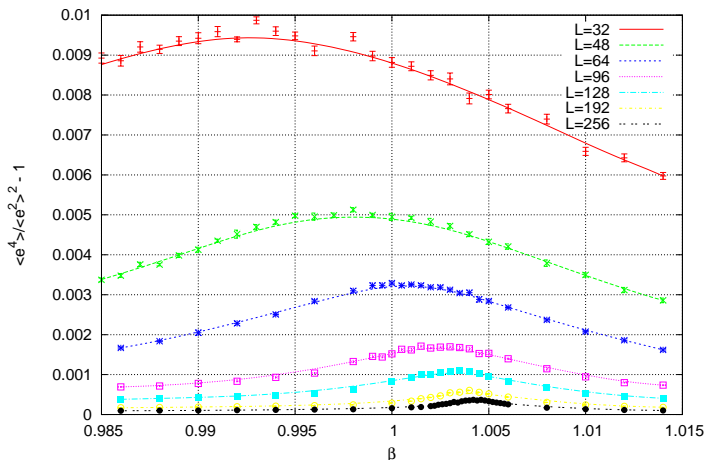
Μαγνητική επιδεκτικότητα

Ψευδοκρίσιμα σημεία



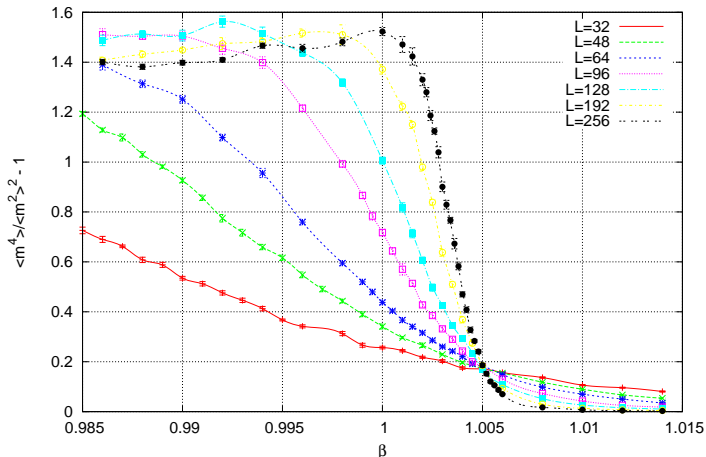
Energy Cumulant

Απουσία λανθάνουσας θερμότητας



Binder Cumulant

Σημείο τομής στο $\beta_{binder}(3) \in [1.0043, 1.0056]$



Κρίσιμοι εκθέτες

Κρίσιμο β

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

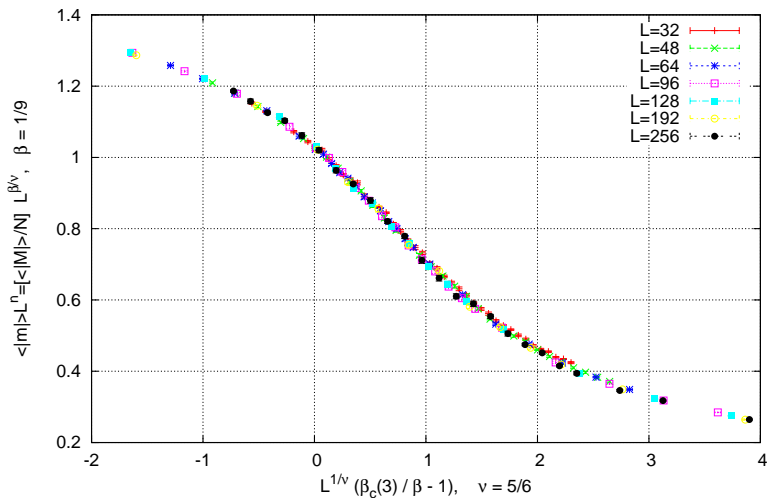
Εκθέτης μήκους συσχέτισης

$$\nu = 5/6$$

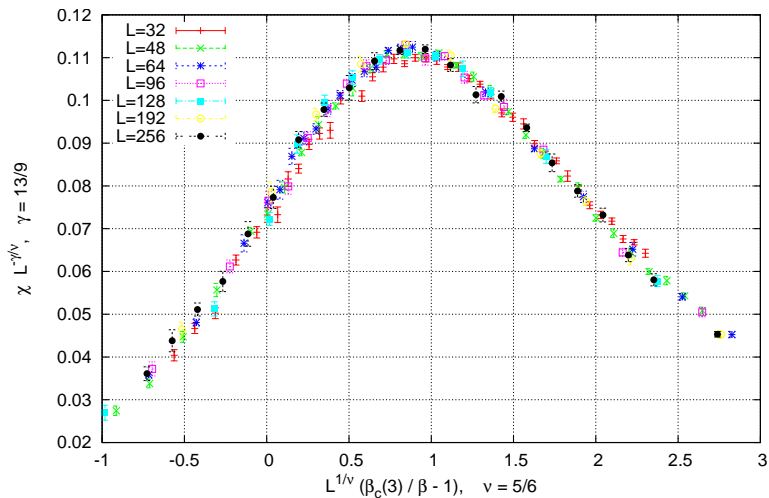
Τιμές εκθετών

Μέγεθος	Εκθέτης	Τιμή
Μαγνήτιση	β	1/9
Μαγνητική επιδεκτικότητα	γ	13/9
Binder Cumulant	ω	0

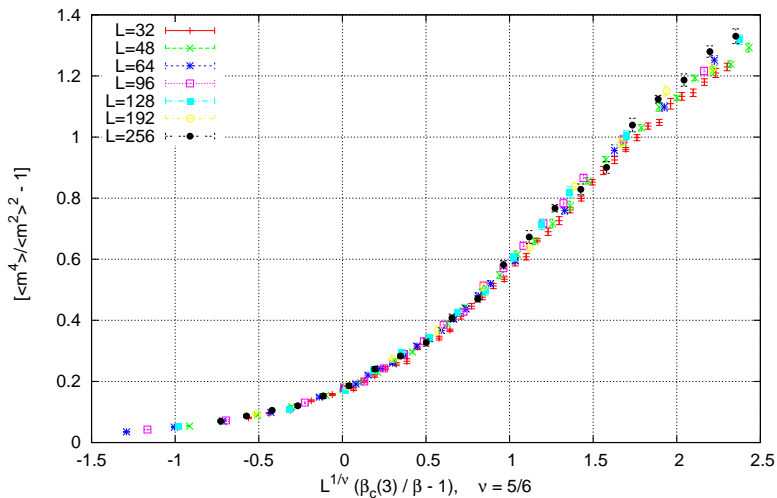
Μαγνήτιση



Μαγνητική επιδεκτικότητα



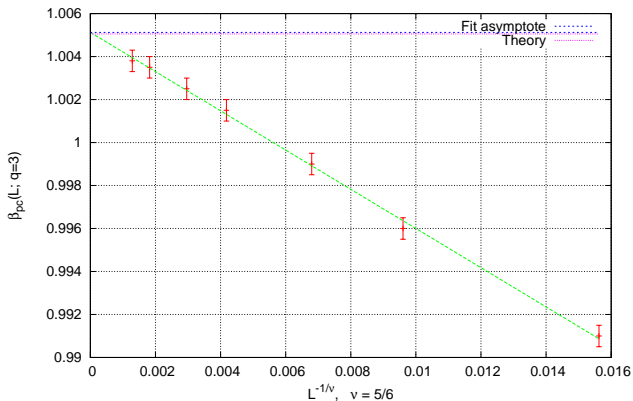
Binder Cumulant



Προσαρμογή ψευδοκρίσμων β

$$\beta_{pc}(L^{-6/5}; q := 3) = \beta_{num}(3) + c(3) \cdot L^{-6/5}$$

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



Προσομοιώσεις με Swendsen-Wang

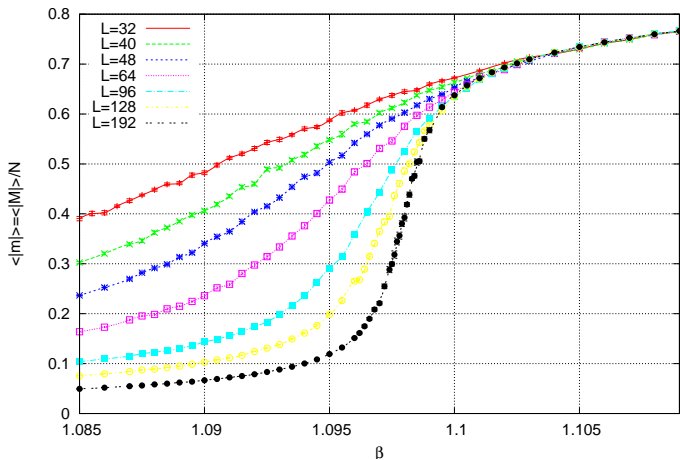
$$q = 4$$

Παράμετροι προσομοίωσης

- Στενότερη περιοχή γύρω από το αναμενόμενο
 $\beta_c(4) = \ln(1 + \sqrt{4}) \approx 1.0986$
- 320.000 sweeps
- Τετραγωνικά πλέγματα με $L = 32, 48, 64, 80, 96, 128, 192$

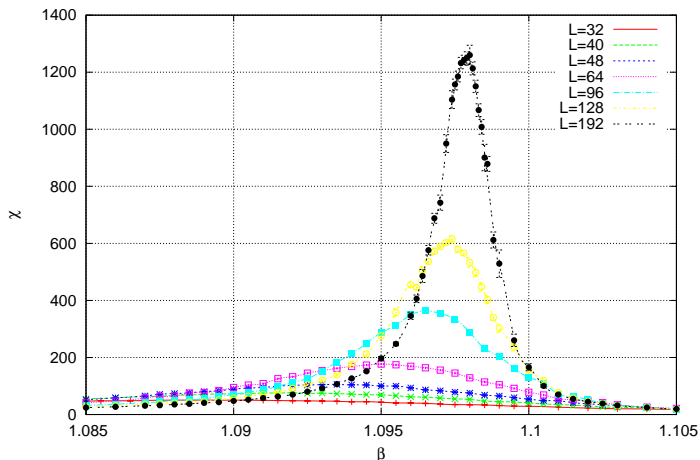
Μαγνήτιση

Ομαλή καμπύλη μαγνήτισης



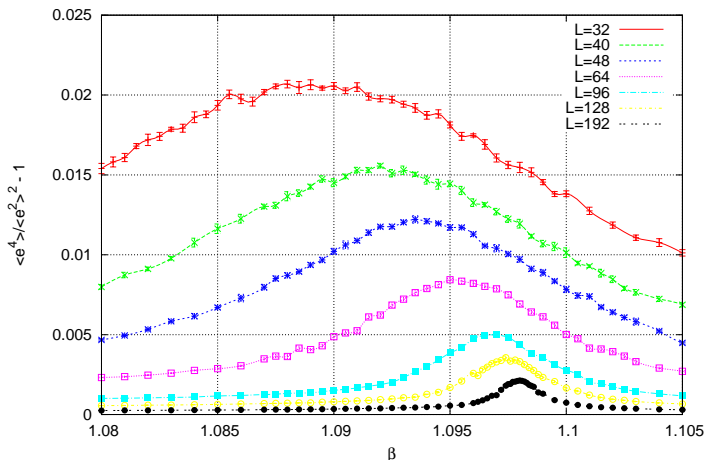
Μαγνητική επιδεκτικότητα

Ψευδοκρίσιμα σημεία



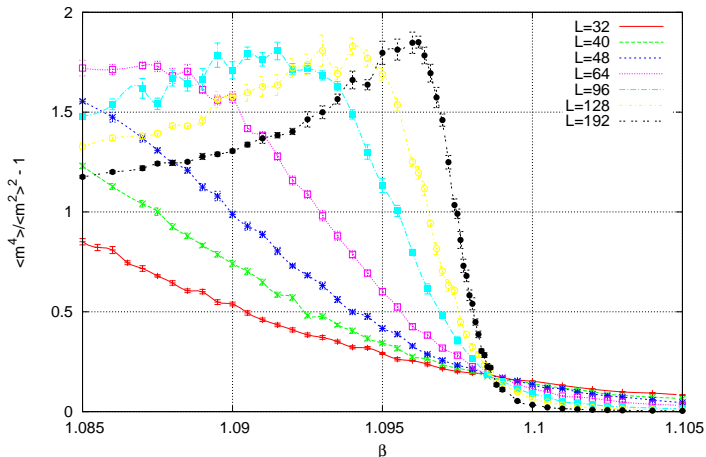
Energy Cumulant

Ίχνη λανθάνουσας θερμότητας



Binder Cumulant

Σημείο τομής στο $\beta_{binder}(4) \in [1.0983, 1.0992]$



Κρίσιμοι εκθέτες

Κρίσιμο β

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

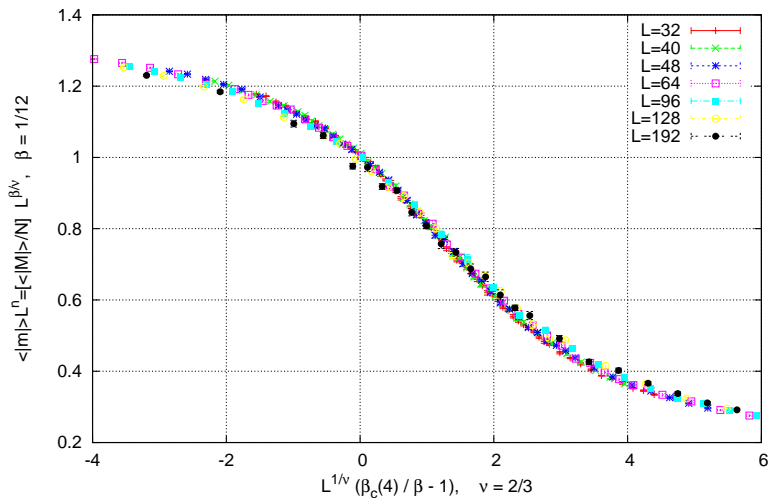
Εκθέτης μήκους συσχέτισης

$$\nu = 2/3$$

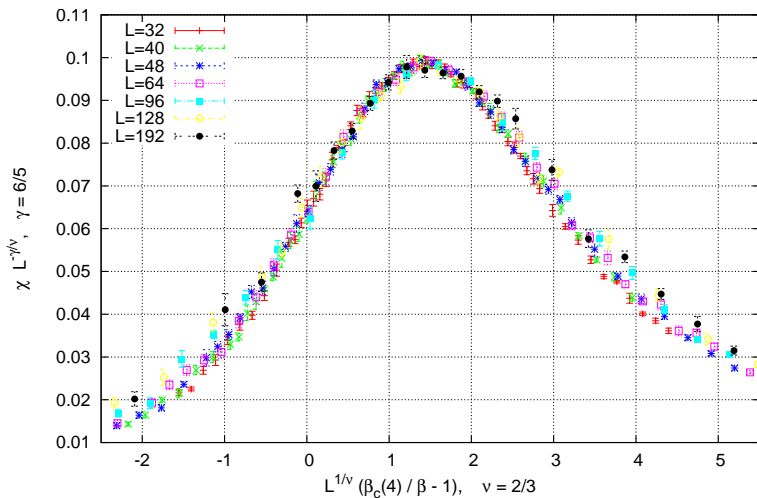
Τιμές εκθετών

Μέγεθος	Εκθέτης	Τιμή
Μαγνήτιση	β	1/2
Μαγνητική επιδεκτικότητα	γ	6/5
Binder Cumulant	ω	0

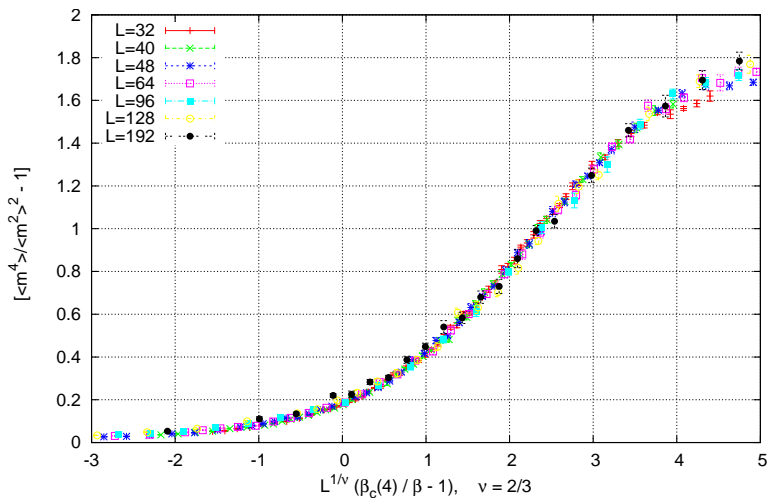
Μαγνήτιση



Μαγνητική επιδεκτικότητα



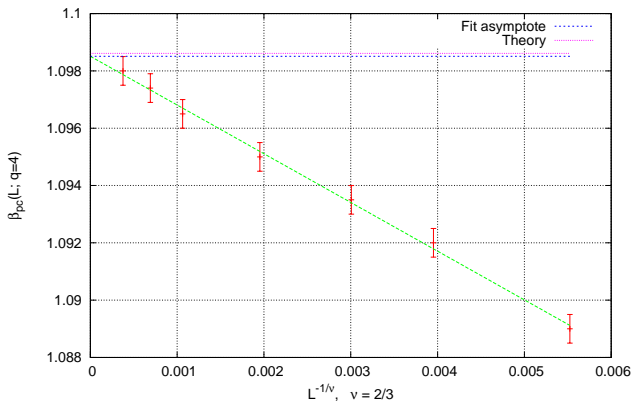
Binder Cumulant



Προσαρμογή ψευδοκρίσμων β

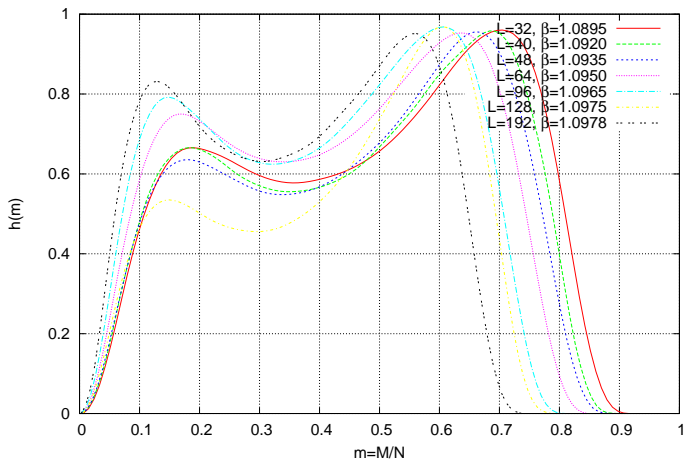
$$\beta_{pc}(L^{-3/2}; q := 4) = \beta_{num}(4) + c(4) \cdot L^{-3/2}$$

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



Ιστόγραμμα μαγνήτισης

Ένδειξη συνύπαρξης φάσεων



Περίγραμμα

- 1 Θεωρητικά Στοιχεία
 - Πρότυπο Potts
 - Μεταβάσεις φάσης
 - Το τετραγωνικό πρότυπο Potts
- 2 Προσομοιώσεις
 - Αλγόριθμοι προσομοίωσης
 - Αριθμητικά αποτελέσματα
- 3 Συνεχείς μεταβάσεις
 - $q = 2$
 - $q = 3$
 - $q = 4$
- 4 Μεταβάσεις πρώτης τάξης
 - $q = 5$
 - $q \geq 6$

Προσομοιώσεις με Swendsen-Wang

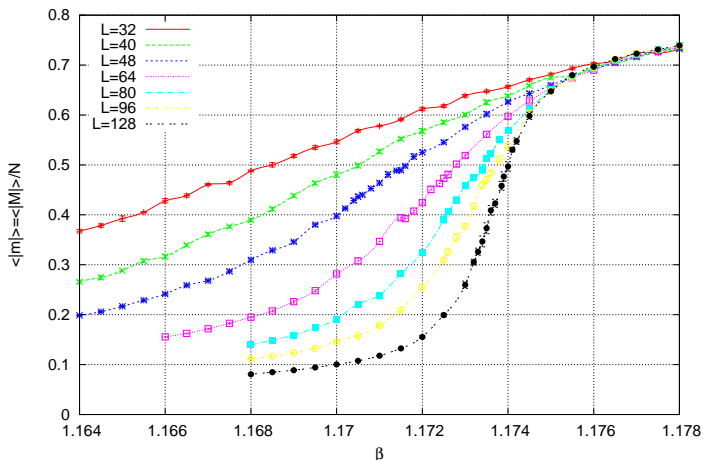
$$q = 5$$

Παράμετροι προσομοίωσης

- Στενότερη περιοχή γύρω από το αναμενόμενο
 $\beta_c(5) = \ln(1 + \sqrt{5}) \approx 1.1744$
- 1.000.000 sweeps
- Τετραγωνικά πλέγματα με $L = 32, 40, 48, 64, 80, 96, 128$

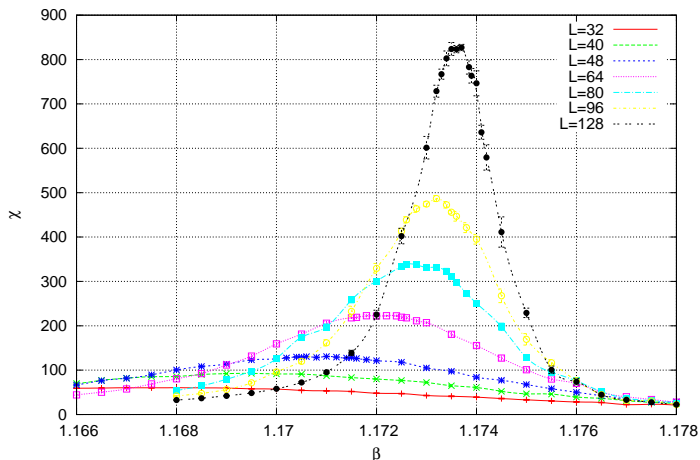
Μαγνήτιση

Απότομη μεταβολή μαγνήτισης



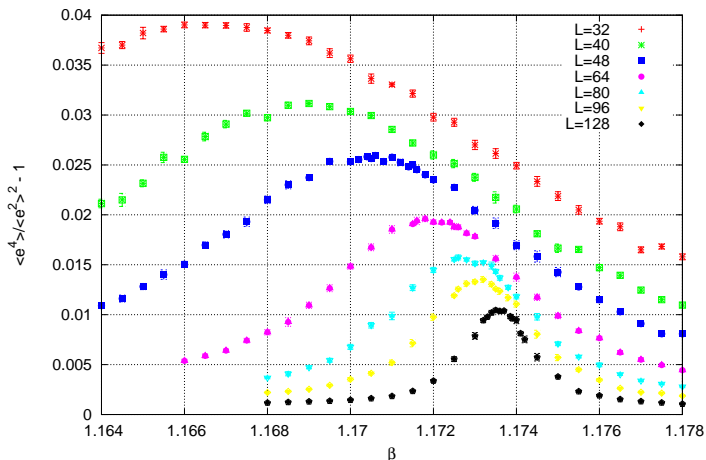
Μαγνητική επιδεκτικότητα

Ψευδοκρίσιμα σημεία



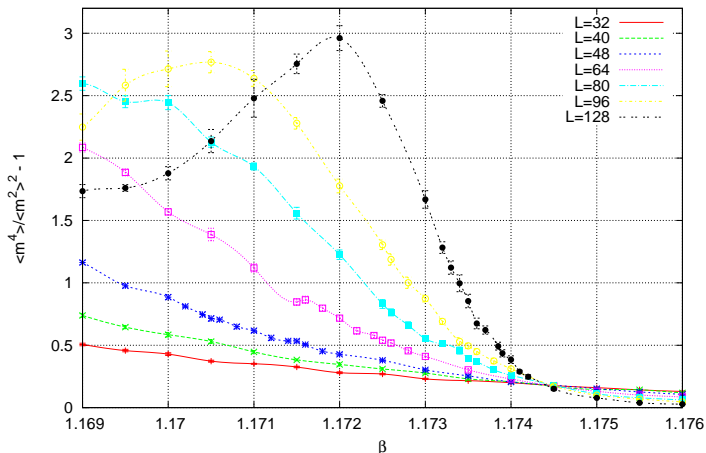
Energy Cumulant

Παρουσία λανθάνουσας θερμότητας



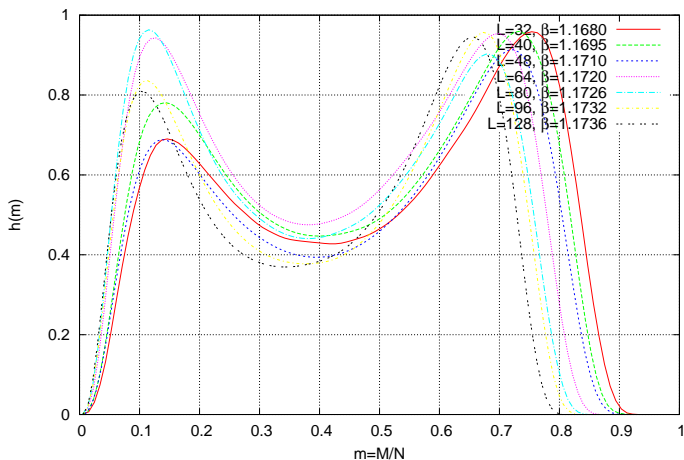
Binder Cumulant

Σημείο τομής στο $\beta_{binder}(5) \in [1.1742, 1.1746]$



Ιστόγραμμα μαγνήτισης

Συνύπαρξη φάσεων



Υστέρηση μαγνήτισης

Παρατηρήσεις

- Εκτέλεση προσομοιώσεων με διαφορά έναρξης (hot/cold)
- Εμφάνιση πρώτη φορά για $q = 5$
- Ένδειξη μετάβασης πρώτης τάξης

Υστέρηση μαγνήτισης

Παρατηρήσεις

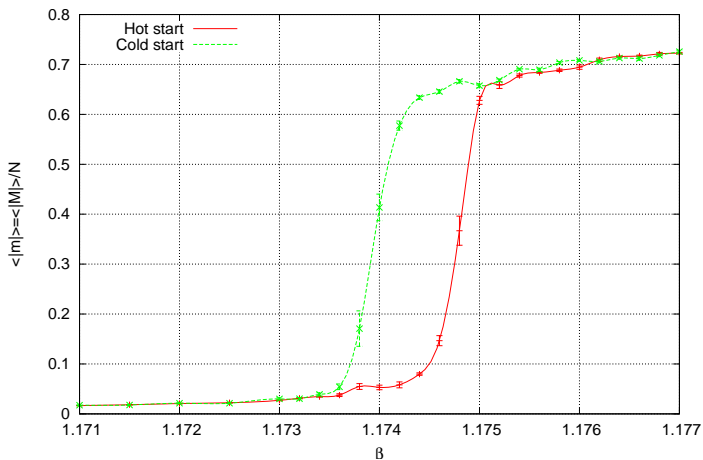
- Εκτέλεση προσομοιώσεων με διαφορά έναρξης (hot/cold)
- Εμφάνιση πρώτη φορά για $q = 5$
- Ένδειξη μετάβασης πρώτης τάξης

Παράμετροι

- Μεγάλο $L = 768$
- Λίγα sweeps (1.000-8.000)
- Μείωση πλάτους μαγνήτισης με την αύξηση των sweeps

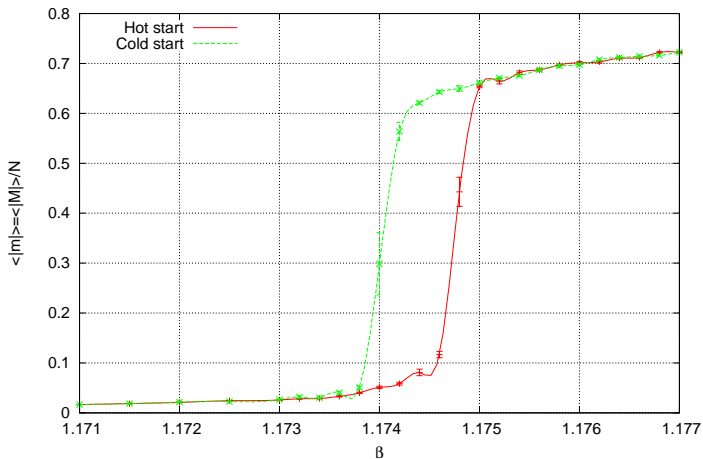
Υστέρηση μαγνήτισης

$L = 768, 1000$ sweeps



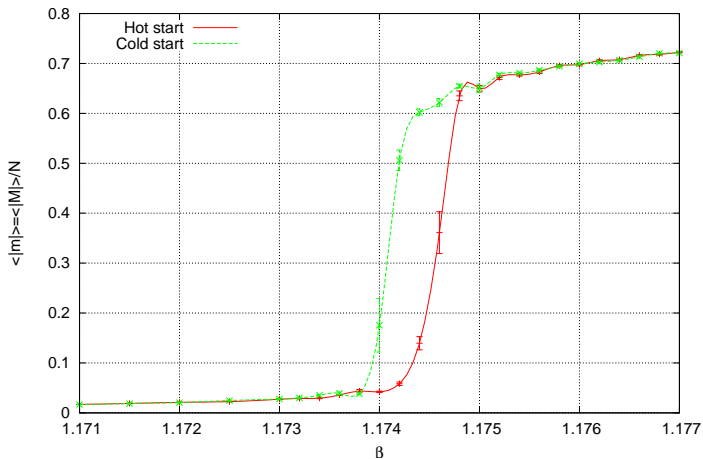
Υστέρηση μαγνήτισης

$L = 768, 2000$ sweeps



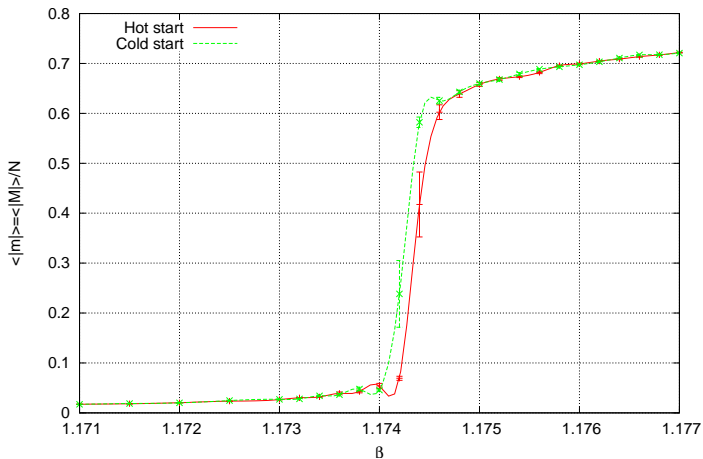
Υστέρηση μαγνήτισης

$L = 768, 4000$ sweeps



Υστέρηση μαγνήτισης

$L = 768, 8000$ sweeps



Προσομοιώσεις με Swendsen-Wang

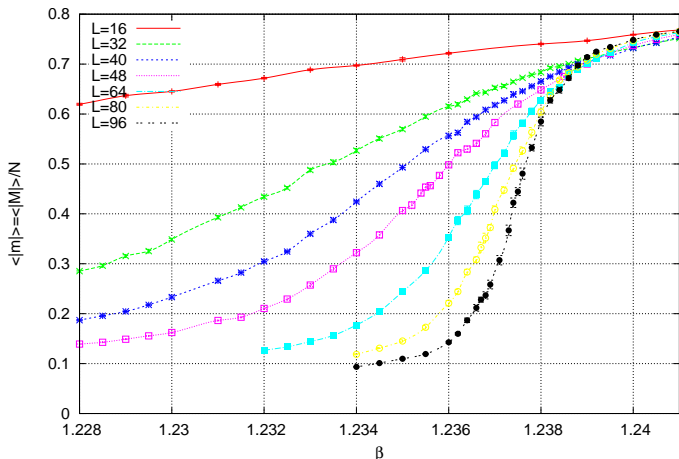
$$q = 6$$

Παράμετροι προσομοίωσης

- Στενή περιοχή γύρω από το αναμενόμενο $\beta_c(6) = \ln(1 + \sqrt{6}) \approx 1.2382$
- 3.000.000 sweeps
- Τετραγωνικά πλέγματα με $L = 16, 32, 40, 48, 64, 80, 96$

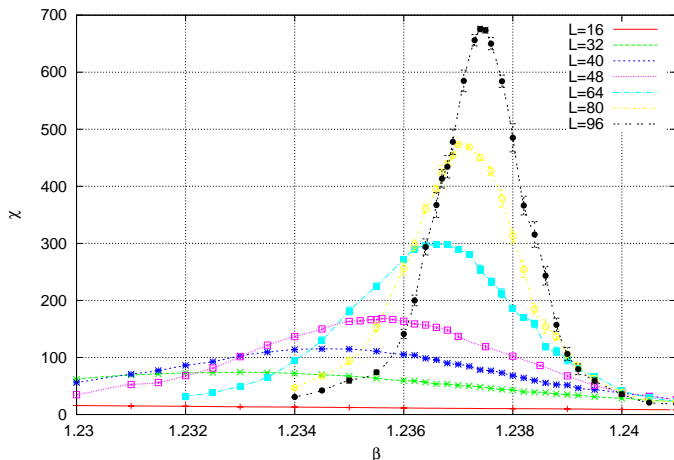
Μαγνήτιση

Απότομη μεταβολή μαγνήτισης



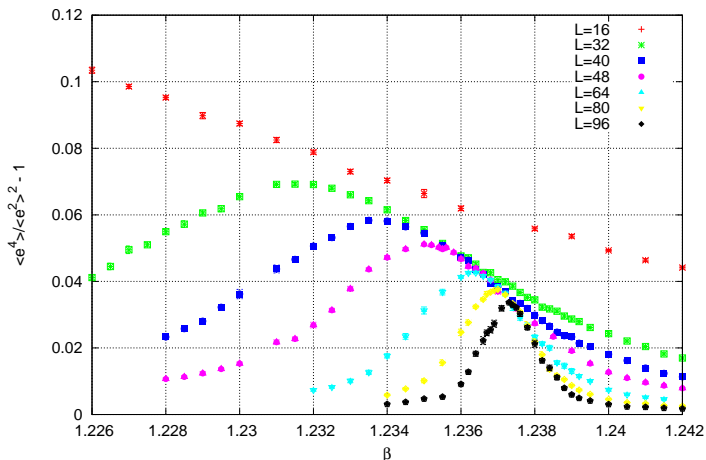
Μαγνητική επιδεκτικότητα

Ψευδοκρίσιμα σημεία



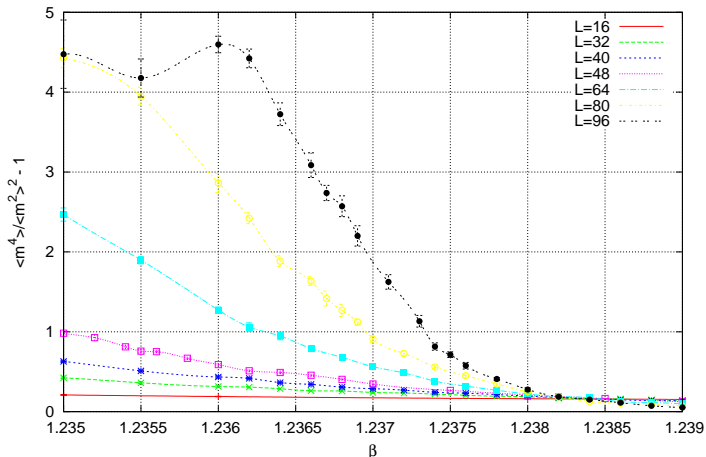
Energy Cumulant

Παρουσία λανθάνουσας θερμότητας



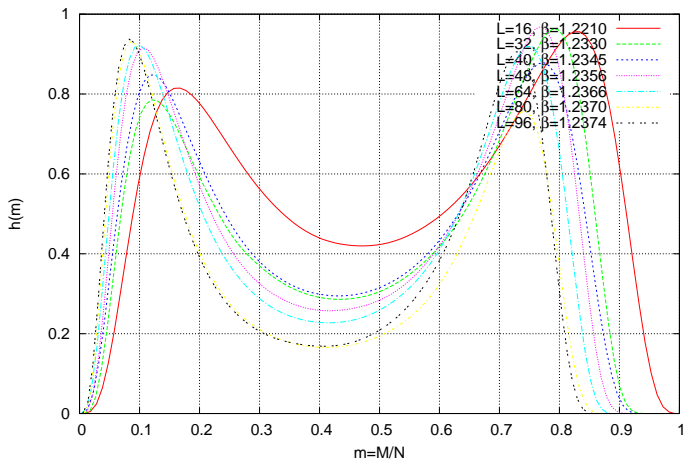
Binder Cumulant

Σημείο τομής στο $\beta_{binder}(\delta) \in [1.2381, 1.2385]$



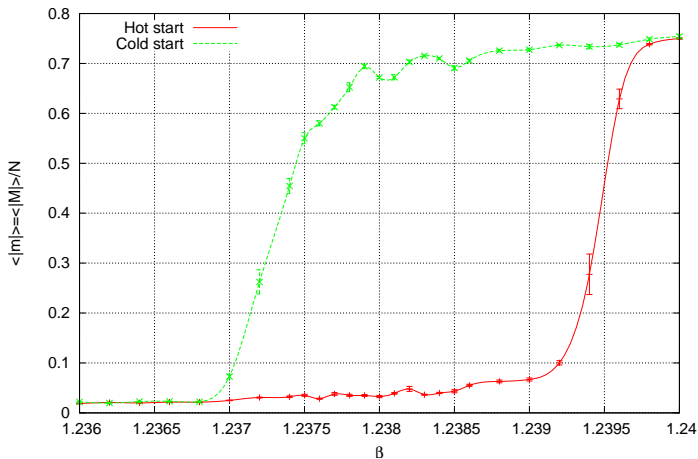
Ιστόγραμμα μαγνήτισης

Συνύπαρξη φάσεων



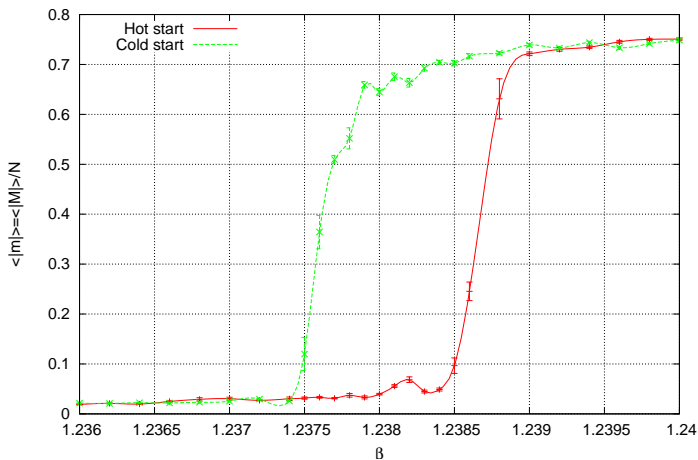
Υστέρηση μαγνήτισης

$L = 512, 1000$ sweeps



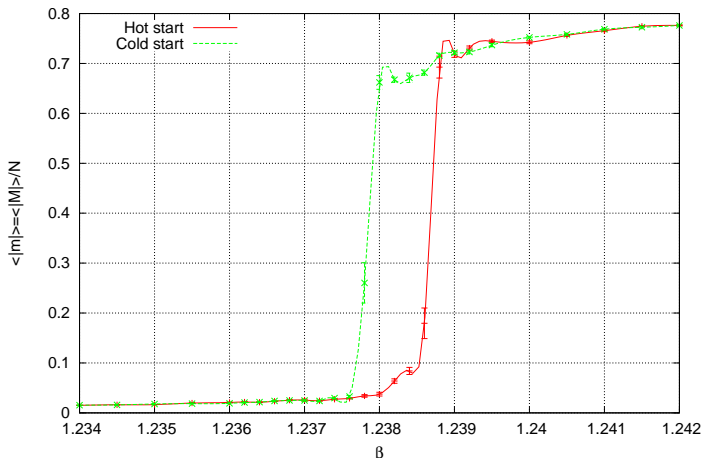
Υστέρηση μαγνήτισης

$L = 512, 2000$ sweeps



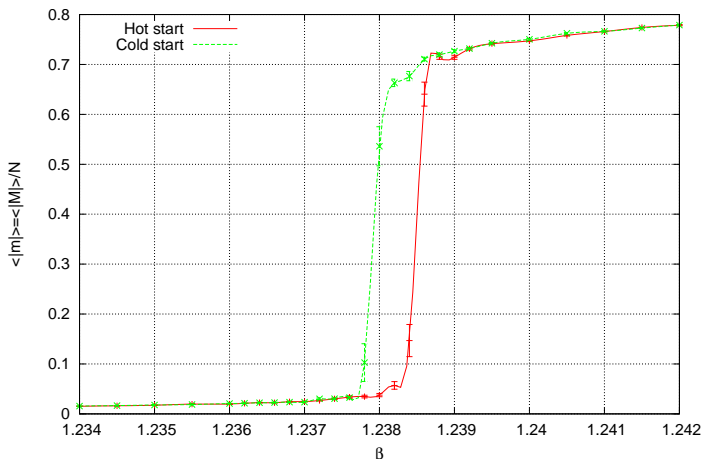
Υστέρηση μαγνήτισης

$L = 512, 4000$ sweeps



Υστέρηση μαγνήτισης

$L = 512, 8000$ sweeps



$$q = 10$$

$$q = 10$$

Παράμετροι προσομοίωσης

- Πολύ μεγάλος χρόνος αυτοσυσχέτισης
- Πολύ μεγάλος χρόνος προσομοίωσης
- Περιορισμένες προσομοιώσεις

$$q = 10$$

$$q = 10$$

Παράμετροι προσομοίωσης

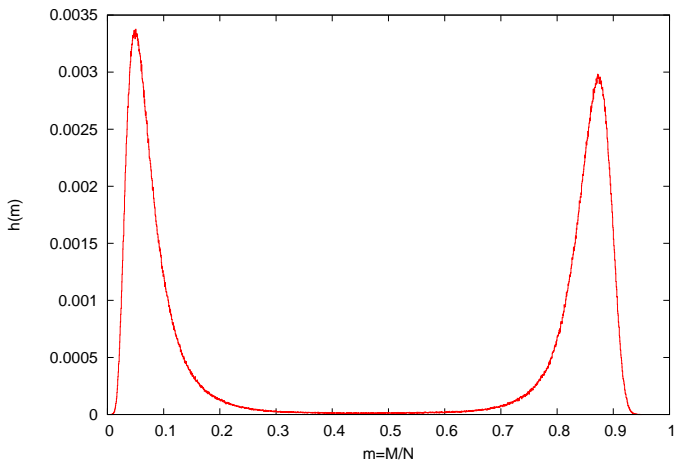
- Πολύ μεγάλος χρόνος αυτοσυσχέτισης
- Πολύ μεγάλος χρόνος προσομοίωσης
- Περιορισμένες προσομοιώσεις

Ιστογράμματα ενέργειας και μαγνήτισης

- Για $L = 64$, $15 \times 10^6 \text{ sweeps}$, $\beta = 1.4246$
- Μεγάλος λόγος μεγίστου-ελαχίστου
- Έντονος διαχωρισμός φάσεων

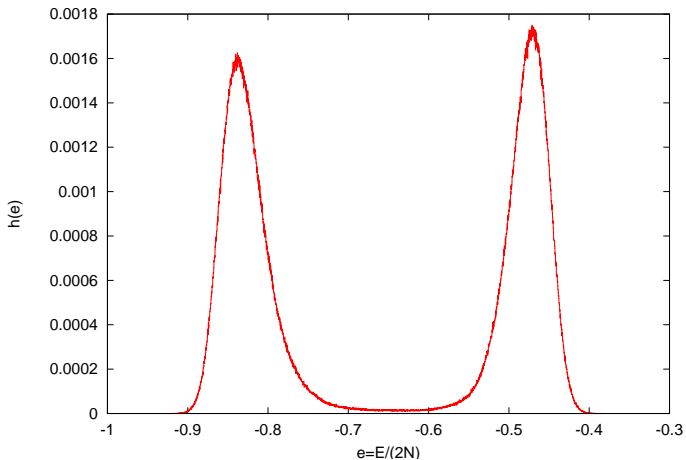
Ιστόγραμμα μαγνήτισης

Συνύπαρξη φάσεων



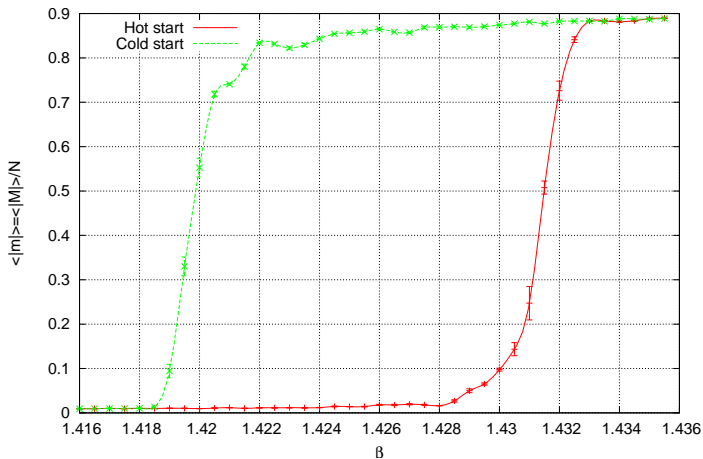
Ιστόγραμμα ενέργειας

Έντονος διαχωρισμός



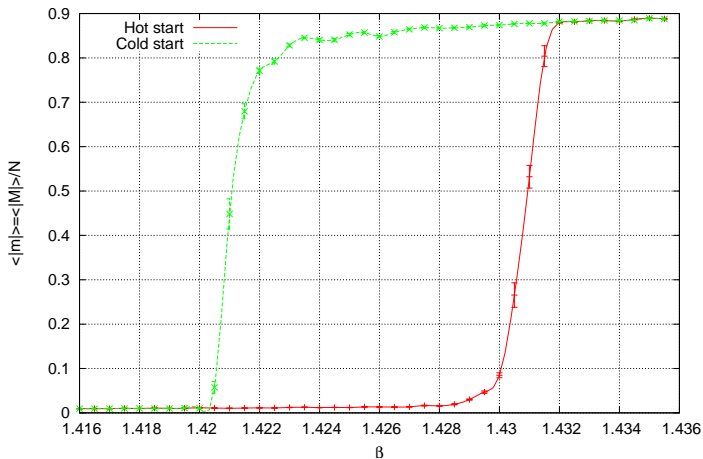
Υστέρηση μαγνήτισης

$L = 256, 1000$ sweeps



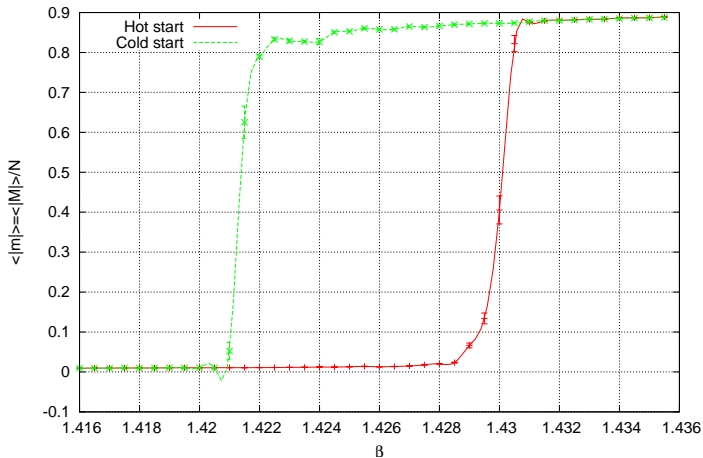
Υστέρηση μαγνήτισης

$L = 256, 2000$ sweeps



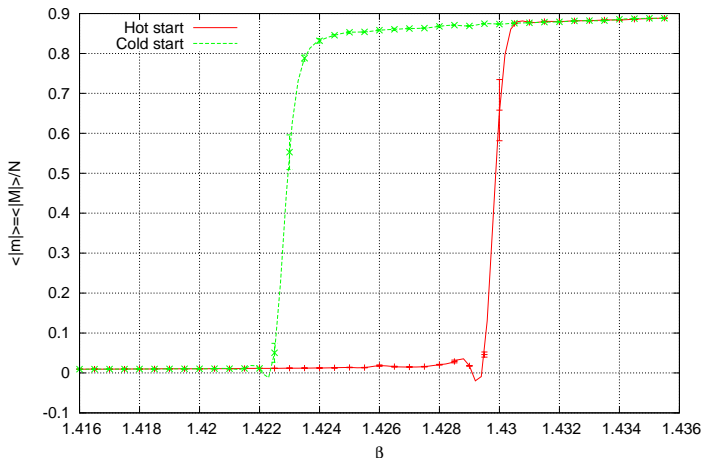
Υστέρηση μαγνήτισης

$L = 256, 4000$ sweeps



Υστέρηση μαγνήτισης

$L = 256, 8000$ sweeps



Εν κατακλείδει

Αποτελέσματα

- 1 Ανάπτυξη γενικού κώδικα
- 2 Επιβεβαίωση τάξης μετάβασης
- 3 Επιβεβαίωση κρίσιμου σημείου

Εν κατακλείδει

Αποτελέσματα

- 1 Ανάπτυξη γενικού κώδικα
- 2 Επιβεβαίωση τάξης μετάβασης
- 3 Επιβεβαίωση κρίσιμου σημείου

Προοπτικές

- Εφαρμογές Potts σε άλλες επιστήμες
- Εντατικότερες προσομοιώσεις - υπολογιστικές απαιτήσεις
- Προσομοιώσεις για περισσότερες διαστάσεις - έλλειψη αναλυτικών προβλέψεων
- Ανάλυση με εξεζητημένες στατιστικές μεθόδους για ποσοτικές προβλέψεις

Ευχαριστώ

Backup Slides

Η μέθοδος Monte Carlo

Ιδιότητες

- Εκτίμηση μεγεθών αντί υπολογισμού
- Επιλογή αντιπροσωπευτικών καταστάσεων (importance-sampling)
- Ισορροπία \rightarrow κατανομή Boltzmann
- Χρήση διαδικασιών Markov για εναλλαγή καταστάσεων

Η μέθοδος Monte Carlo

Ιδιότητες

- Εκτίμηση μεγεθών αντί υπολογισμού
- Επιλογή αντιπροσωπευτικών καταστάσεων (importance-sampling)
- Ισορροπία \rightarrow κατανομή Boltzmann
- Χρήση διαδικασιών Markov για εναλλαγή καταστάσεων

Πιθανότητα μετάβασης διαδικασιών

- $P(\mu \rightarrow \nu) = f(\mu, \nu)$: Εξάρτηση από αρχική/τελική κατάσταση
- $\frac{dP(\mu \rightarrow \nu)}{dt} = 0$: Σταθερή στο χρόνο
- $\sum_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu) = 1$: Κανονικοποίηση στη μονάδα
- $P(\mu \rightarrow \mu) = P \in [0, 1]$: Επιτρέπεται παραμονή στην ίδια κατάσταση

Συνθήκες διαδικασιών Markov

Συνθήκη Εργοδικότητας (Ergodicity)

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

Συνθήκη Λεπτομερούς Ισοζύγισης (Detailed balance)

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

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

Θερμοδυναμικά μεγέθη

Συνάρτηση Επιμερισμού

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

Κατανομή Boltzmann - Θερμική ισορροπία

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

Αντίστροφη θερμοκρασία

$$\beta = \frac{1}{kT}$$

Εσωτερική ενέργεια

$$U = - \frac{\partial \log Z}{\partial \beta}$$

Ενέργεια Helmholtz

$$F = - \frac{\log Z}{\beta}$$

Μαγνήτιση

$$M = \frac{\partial F}{\partial B}$$

Ειδική θερμότητα

$$C = \frac{\partial E}{\partial T}$$

Μαγνητική επιδεκτικότητα

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B}$$

Αριθμητικοί υπολογισμοί για δεδομένο β

Ενέργεια ανά sweep

$$E_s = \sum \delta(s_i, s_j)$$

Μαγνήτιση ανά sweep

$$M_s = N_{max} - \frac{N - N_{max}}{q - 1}$$

Ενέργεια

$$e = \frac{\langle E_s \rangle}{2N}$$

Ειδική θερμότητα

$$c = \beta^2 \frac{\langle E_s^2 \rangle - \langle E_s \rangle^2}{2N}$$

Energy Cumulant

$$ec = \frac{\langle E_s^4 \rangle}{\langle E_s^2 \rangle^2} - 1$$

Αριθμητικοί υπολογισμοί για δεδομένο β

Ενέργεια ανά sweep

$$E_s = \sum \delta(s_i, s_j)$$

Μαγνήτιση ανά sweep

$$M_s = N_{max} - \frac{N - N_{max}}{q - 1}$$

Ενέργεια

$$e = \frac{\langle E_s \rangle}{2N}$$

Ειδική θερμότητα

$$c = \beta^2 \frac{\langle E_s^2 \rangle - \langle E_s \rangle^2}{2N}$$

Energy Cumulant

$$ec = \frac{\langle E_s^4 \rangle}{\langle E_s^2 \rangle^2} - 1$$

Μαγνήτιση

$$m = \frac{\langle |M_s| \rangle}{N}$$

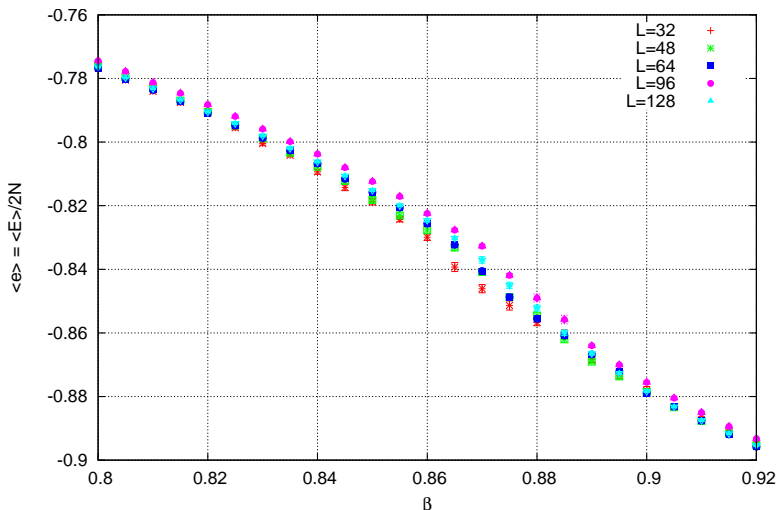
Μαγνητική επιδεικτικότητα

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

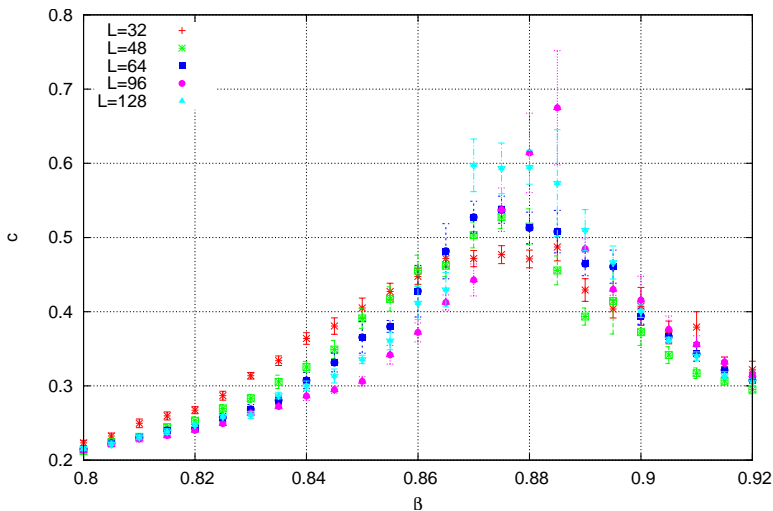
Binder Cumulant

$$bc = \frac{\langle M_s^4 \rangle}{\langle M_s^2 \rangle^2} - 1$$

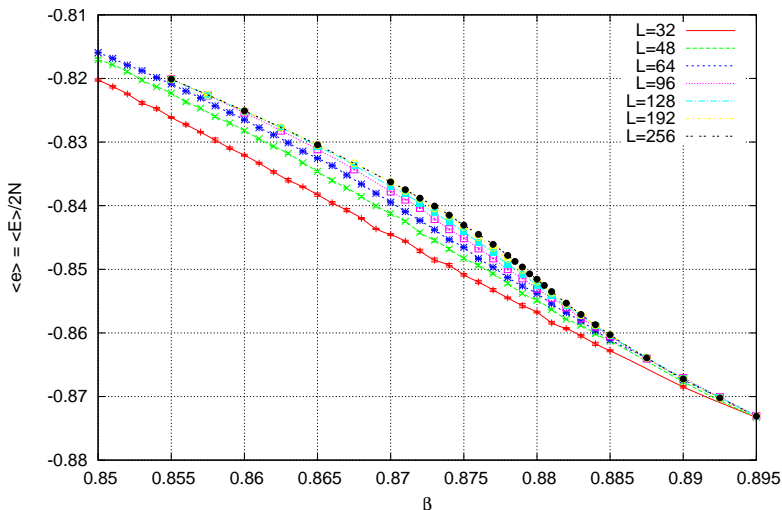
Ενέργεια $q = 2$, Heatbath



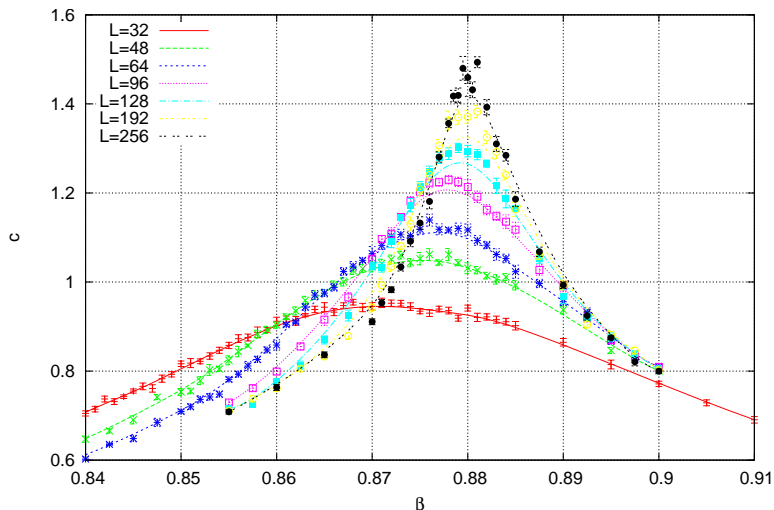
Ειδική θερμότητα, Heatbath



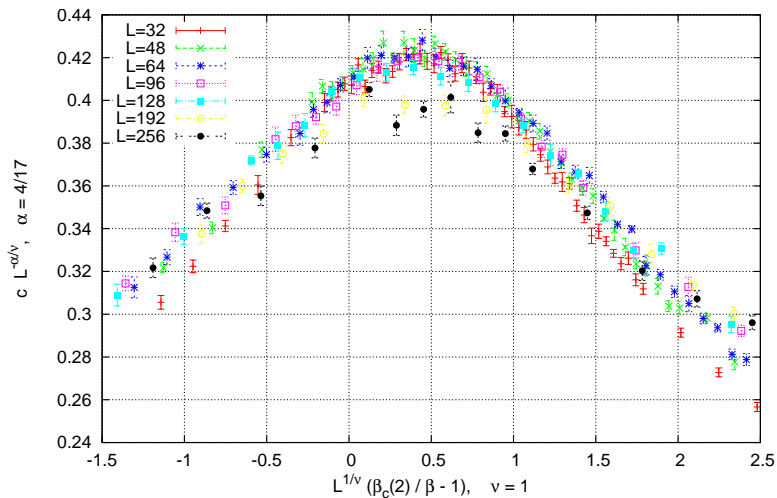
Ενέργεια $q = 2$, Swendsen-Wang



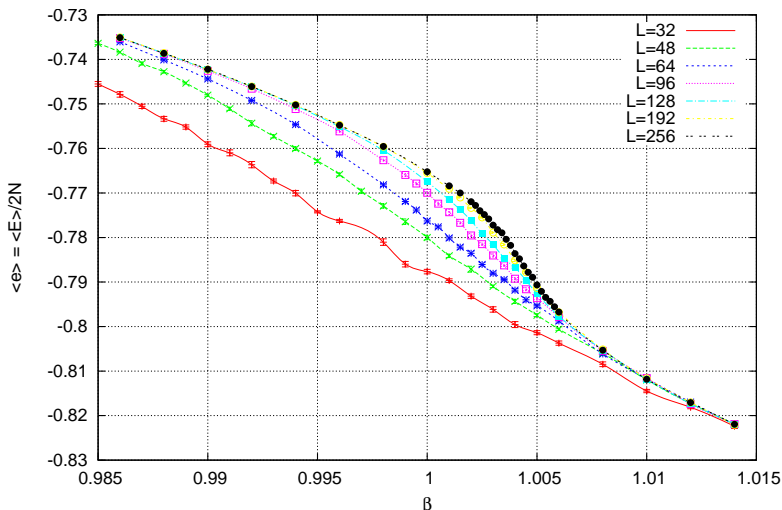
Ειδική θερμότητα $q = 2$, Swendsen-Wang



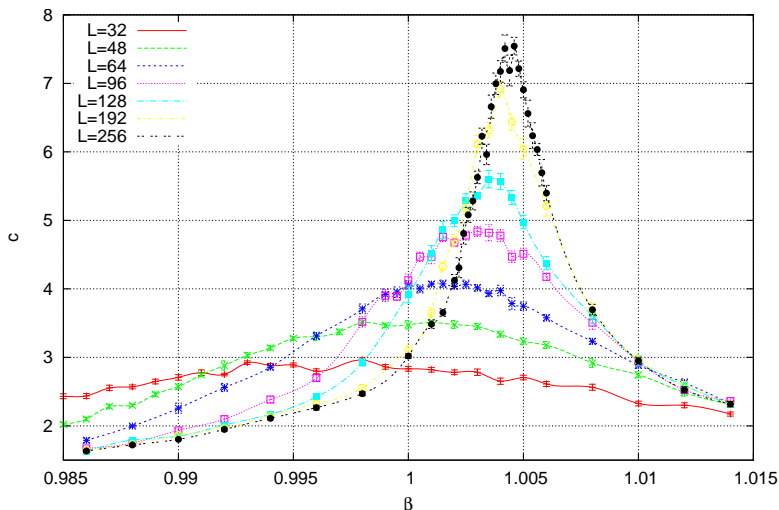
Ειδική θερμότητα $q = 2$, Swendsen-Wang



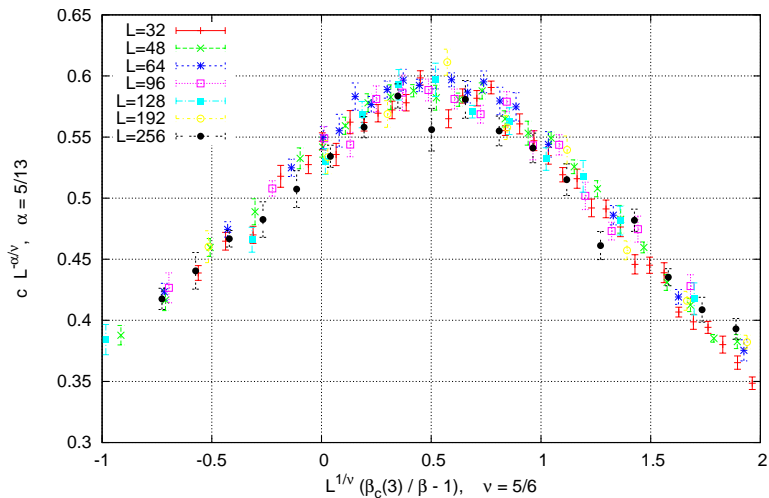
Ενέργεια $q = 3$, Swendsen-Wang



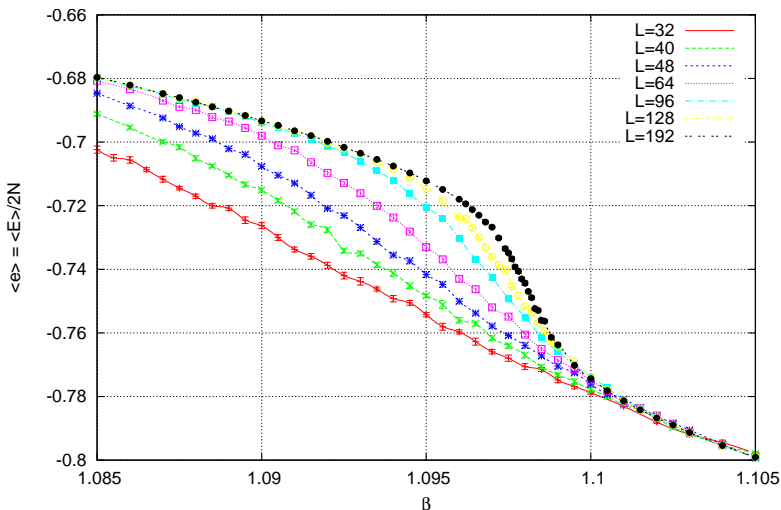
Ειδική θερμότητα $q = 3$, Swendsen-Wang



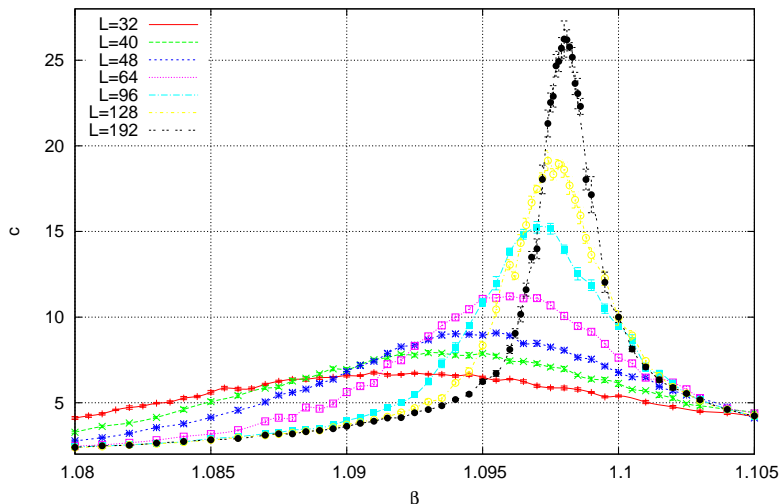
Ειδική θερμότητα $q = 3$, Swendsen-Wang



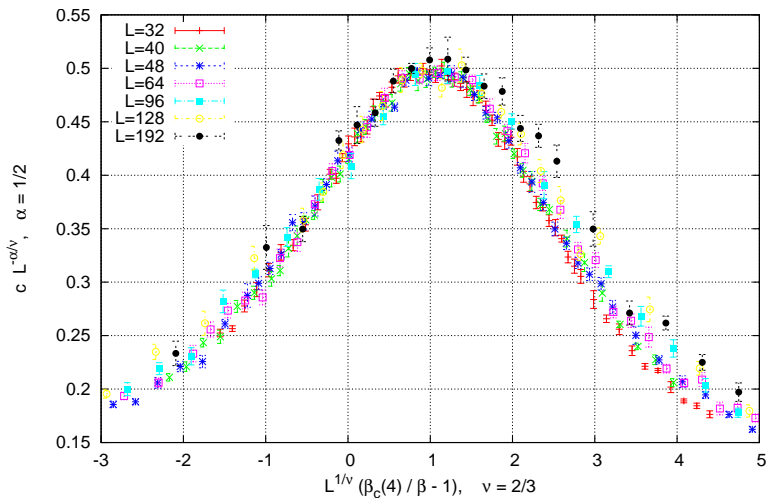
Ενέργεια $q = 4$, Swendsen-Wang



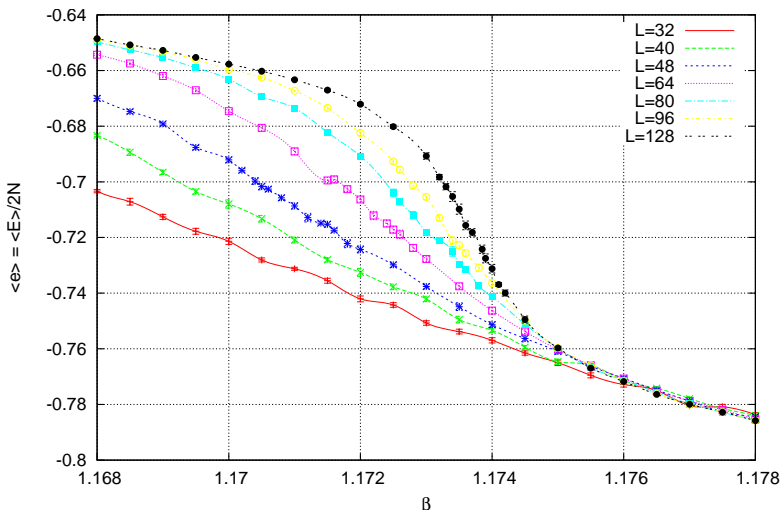
Ειδική θερμότητα $q = 4$, Swendsen-Wang



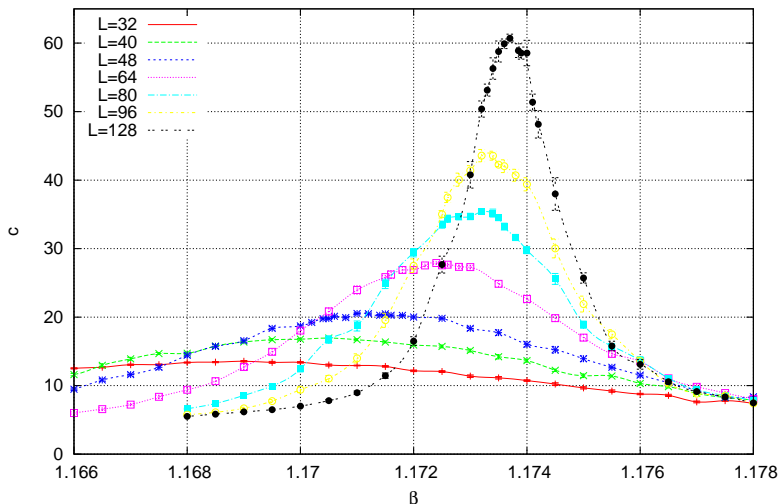
Ειδική θερμότητα $q = 4$, Swendsen-Wang



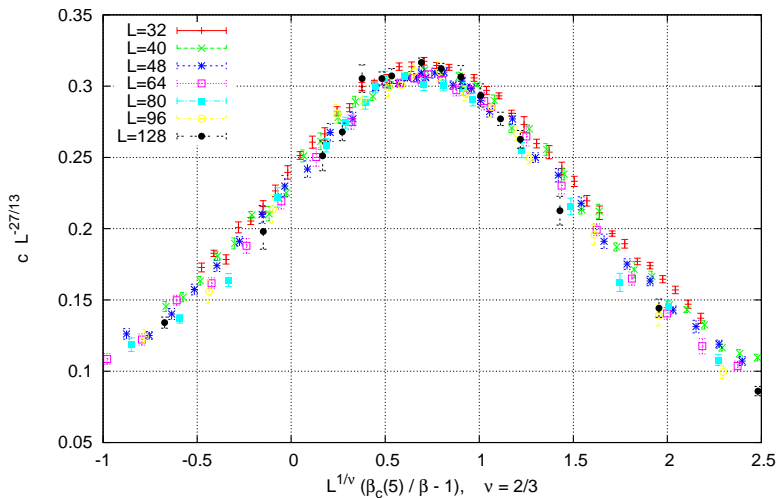
Ενέργεια $q = 5$, Swendsen-Wang



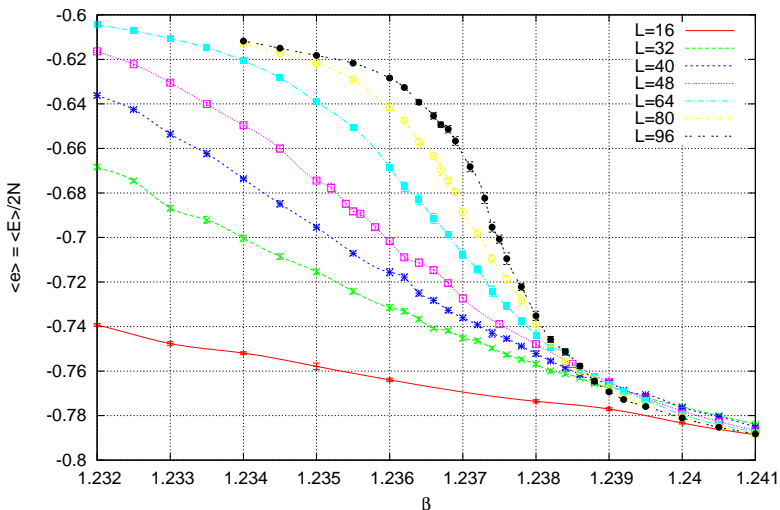
Ειδική θερμότητα $q = 5$, Swendsen-Wang



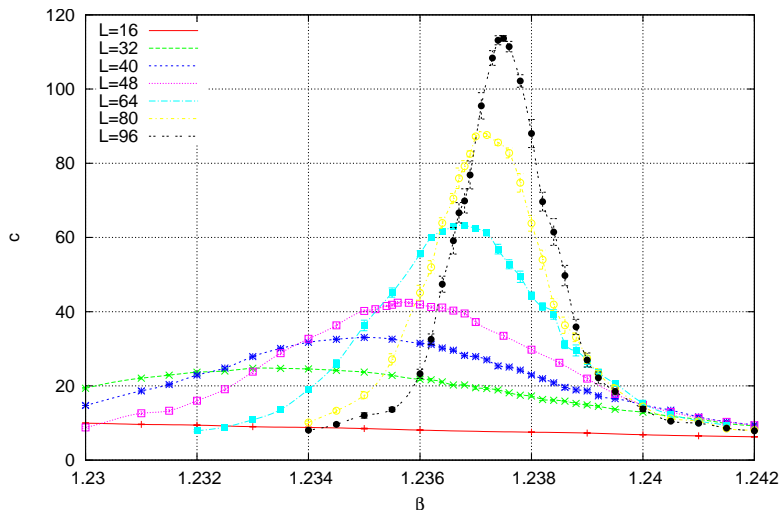
Ειδική θερμότητα $q = 5$, Swendsen-Wang



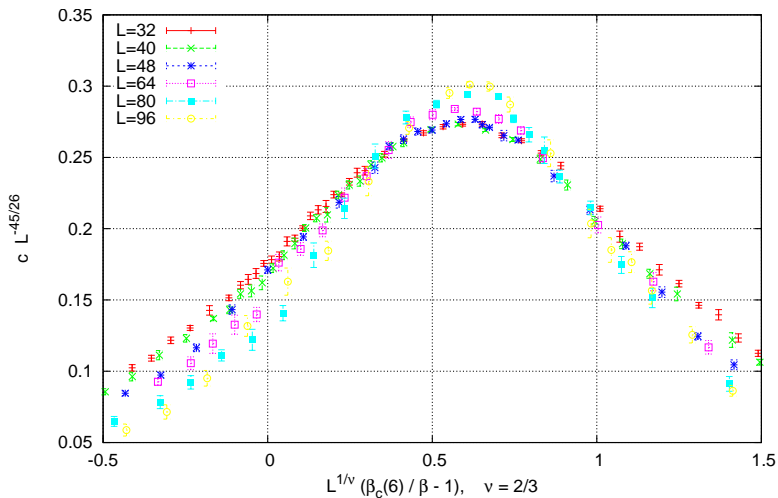
Ενέργεια $q = 6$, Swendsen-Wang



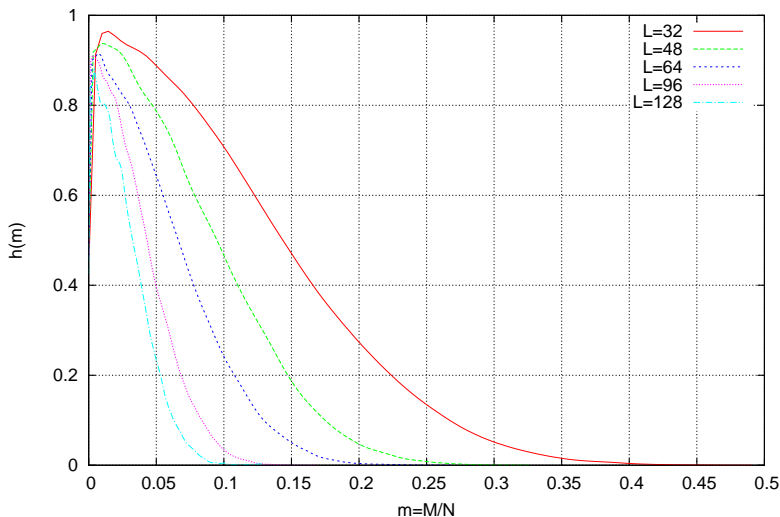
Ειδική θερμότητα $q = 6$, Swendsen-Wang



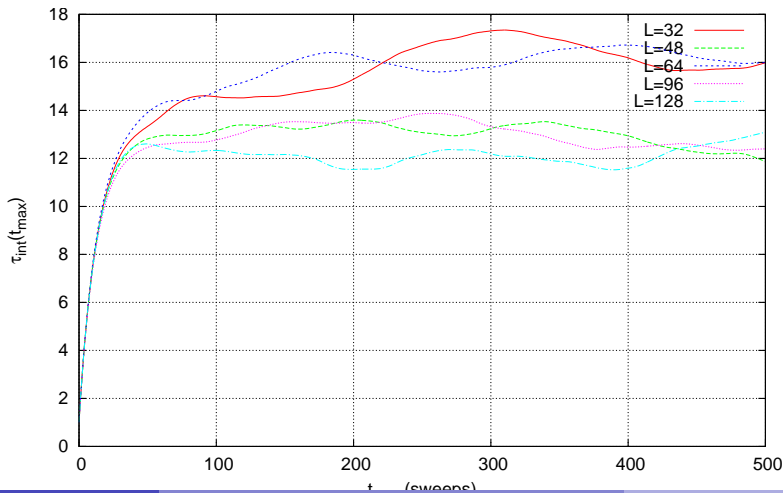
Ειδική θερμότητα $q = 6$, Swendsen-Wang



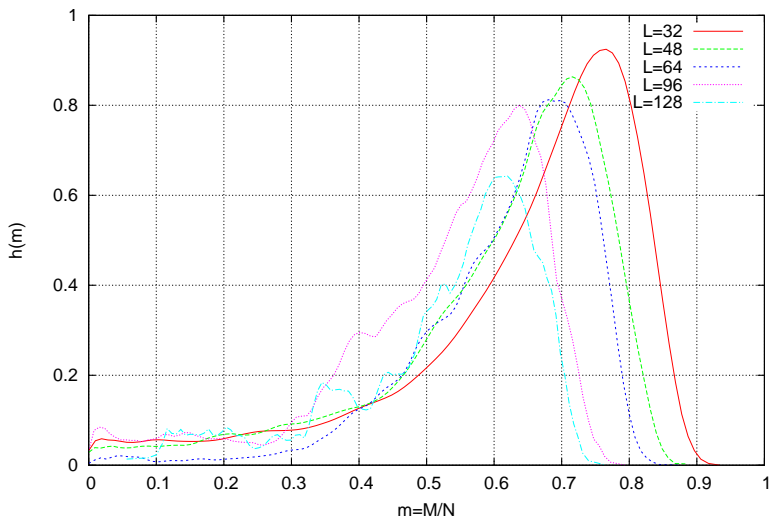
Ιστόγραμμα μαγνήτισης $q = 2, \beta = 0.7000$ (αμαγνήτιστη)



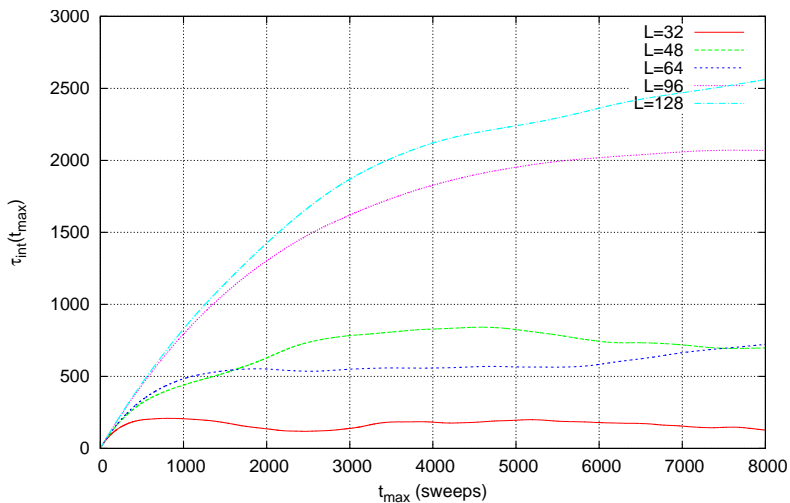
Ολ. χρόνος αυτοσυσχέτισης $q = 2, \beta = 0.7000$ (αμαγνήτιστη)



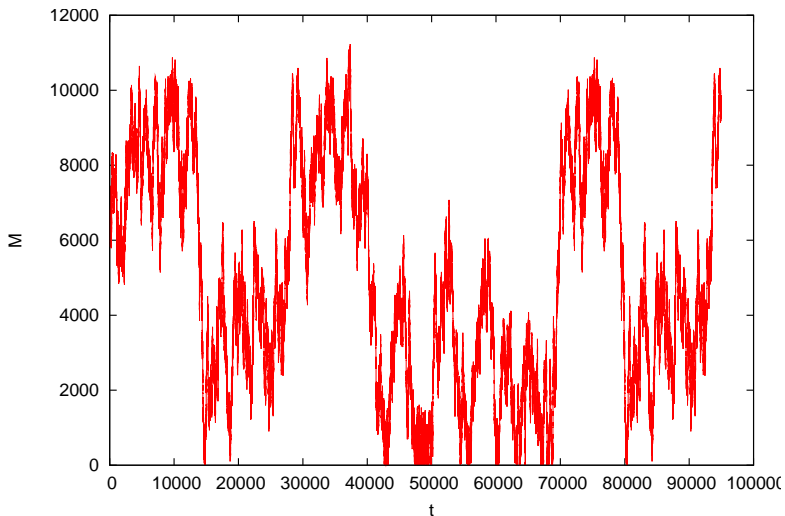
Ιστόγραμμα μαγνήτισης $q = 2, \beta = 0.8800$ (κρίσιμη)



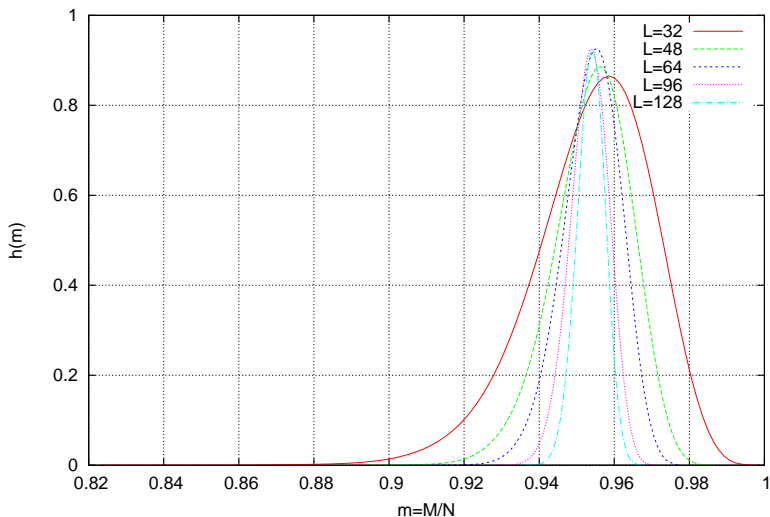
Ολ. χρόνος αυτοσυσχέτισης $q = 2, \beta = 0.8800$ (κρίσιμη)



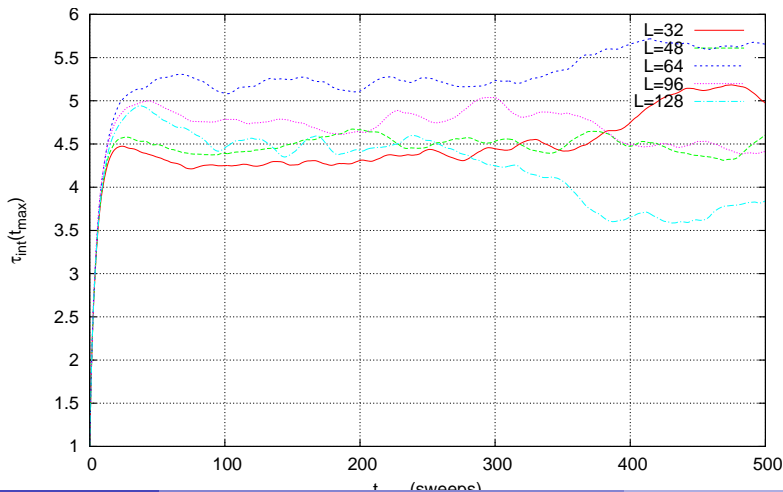
Χρονοσειρά μαγνήτισης $q = 2, \beta = 0.8800, L = 128$



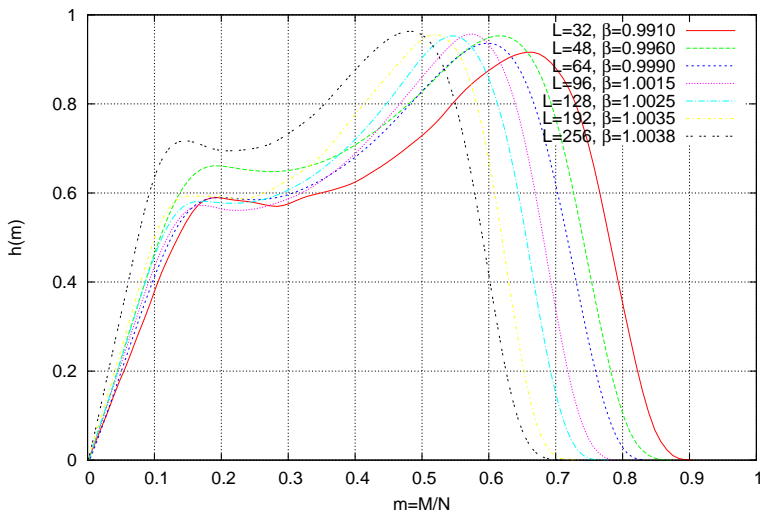
Ιστόγραμμα μαγνήτισης $q = 2, \beta = 1.1000$ (μαγνητισμένη)



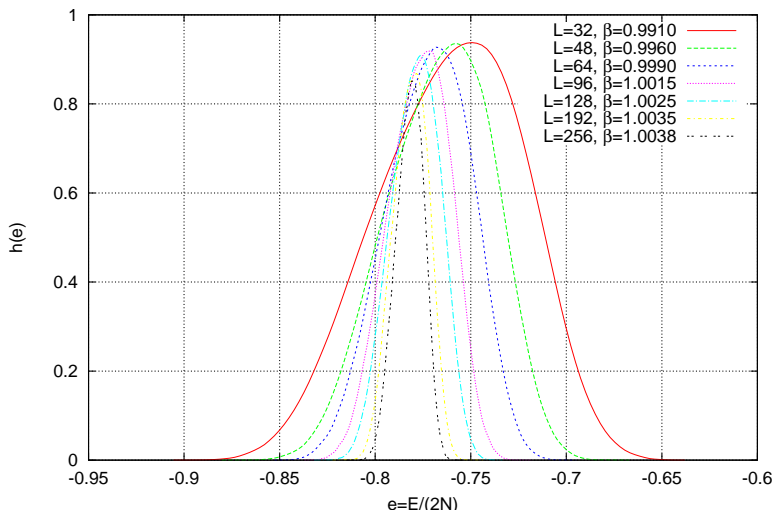
Ολ. χρόνος αυτοσυσχέτισης $q = 2, \beta = 1.1000$ (μαγνητισμένη)



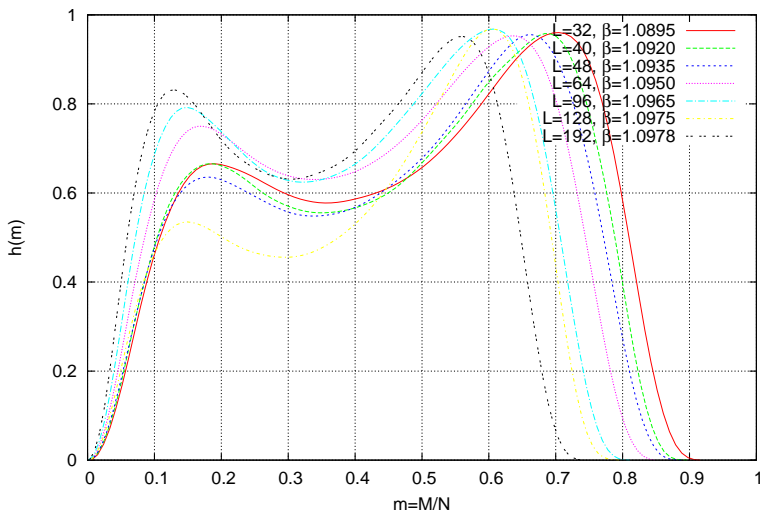
Ιστόγραμμα μαγνήτισης, $q = 3$



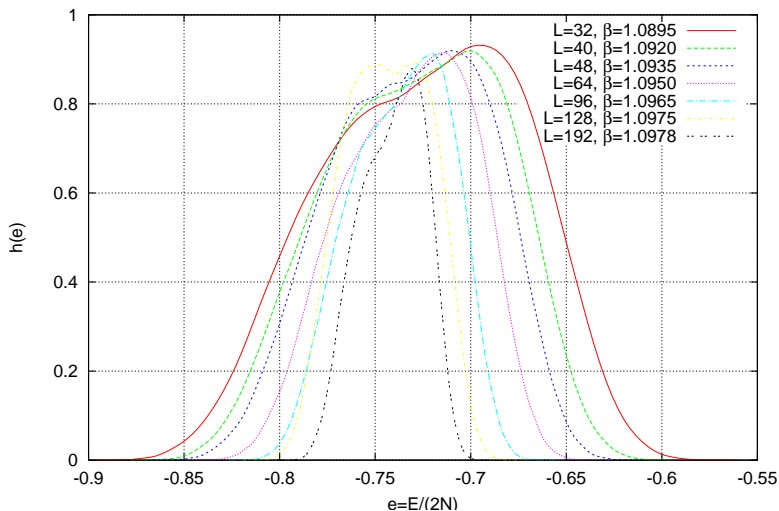
Ιστόγραμμα ενέργειας, $q = 3$



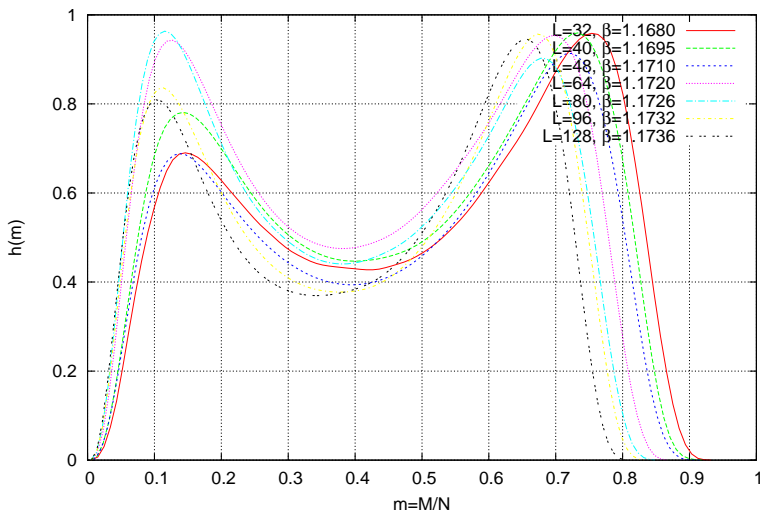
Ιστόγραμμα μαγνήτισης, $q = 4$



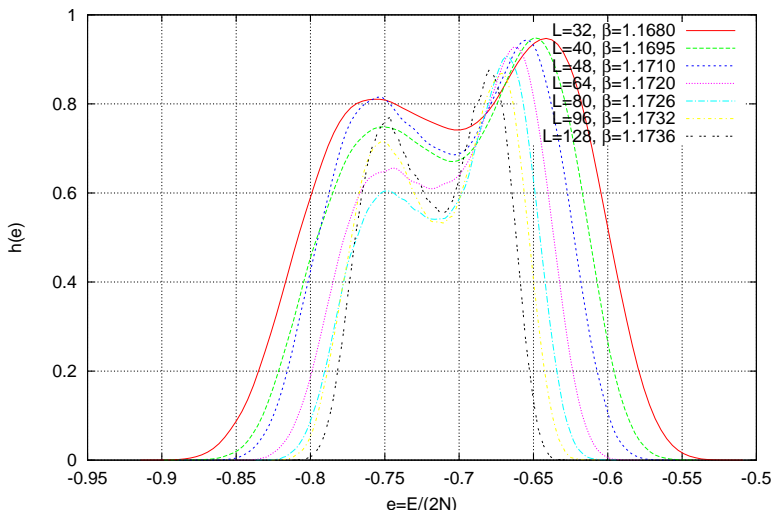
Ιστόγραμμα ενέργειας, $q = 4$



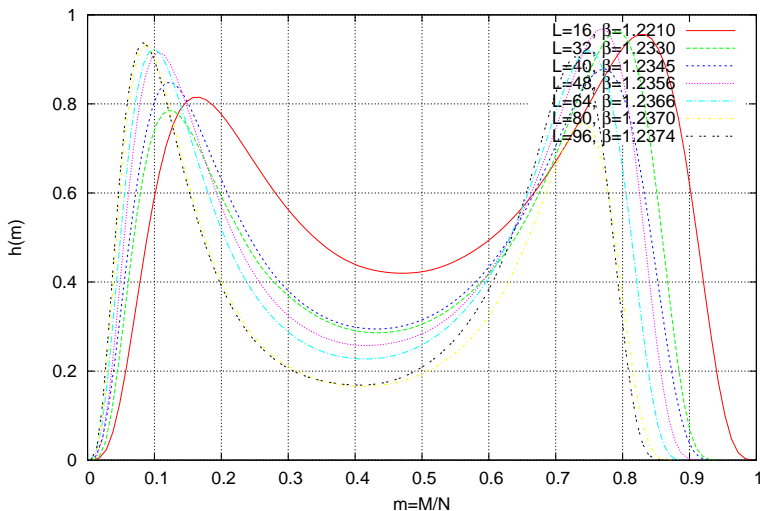
Ιστόγραμμα μαγνήτισης, $q = 5$



Ιστόγραμμα ενέργειας, $q = 5$



Ιστόγραμμα μαγνήτισης, $q = 6$



Ιστόγραμμα ενέργειας, $q = 6$

