

Διδακτορική Διατριβή

Αλλαγές φάσης στο πρότυπο Baxter-Wu

[Φεβρουάριος 2013]

Ιωάννης Ν. Βελονάκης

ΑΛΛΑΓΕΣ ΦΑΣΗΣ ΣΤΟ ΠΡΟΤΥΠΟ BAXTER-WU

από
Ιωάννη Ν. Βελονάκη
Διατριβή υποβαλλόμενη για τη λήψη
Διδακτορικού Διπλώματος Φυσικών Επιστημών (PhD)
Τμήμα Φυσικής Πανεπιστημίου Αθηνών

Φεβρουάριος 2013

Τριμελής Συμβουλευτική Επιτροπή:

- ❖ Σωτήριος Μαρτίνος (Αναπληρωτής Καθηγητής Τμήματος Φυσικής Ε. Κ. Π. Α.- κύριος επιβλέπων)
- ❖ Μαλάκης Αναστάσιος (Αναπληρωτής Καθηγητής Τμήματος Φυσικής Ε.Κ.Π.Α.)
- ❖ Χατζηαγαπίου Ιωάννης (Αναπληρωτής Καθηγητής Τμήματος Φυσικής Ε.Κ.Π.Α.)

Στην επταμελή επιτροπή κρίσης συμμετείχαν επιπλέον οι:

- ❖ Βαρώτσος Παναγιώτης (Καθηγητής Τμήματος Φυσικής Ε. Κ. Π. Α.)
- ❖ Μανουσάκης Ευστράτιος (Καθηγητής Τμήματος Φυσικής Ε. Κ. Π. Α.)
- ❖ Στεφάνου Νικόλαος (Καθηγητής Τμήματος Φυσικής Ε. Κ. Π. Α.)
- ❖ Παρασκευαΐδης Κωνσταντίνος (Αναπληρωτής Καθηγητής Σ.Ε.Μ.Φ.Ε. Ε. Μ. Π.)

Στη Μαρία, η οποία με έκανε
να βλέπω τον κόσμο με άλλα μάτια...

Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών
ΑΛΛΑΓΕΣ ΦΑΣΗΣ ΣΤΟ ΠΡΟΤΥΠΟ BAXTER-
WU

Ιωάννης Ν. Βελονάκης

Κύριος επιβλέπων:

Αναπληρωτής Καθηγητής
Σωτήριος Σ. Μαρτίνος
Τμήμα Φυσικής Ε. Κ. Π.Α.

Περίληψη

Στην παρούσα διδακτορική διατριβή μελετώνται οι αλλαγές φάσης πρώτης και ανώτερης τάξης στο πρότυπο Baxter-Wu παρουσία και απουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου με συνδυασμό φαινομενολογικών θεωριών και υπολογιστικών προσομοιώσεων Monte Carlo. Αρχικά, για τις ανάγκες της μελέτης μας, πέρα από τους υφιστάμενους αλγορίθμους Metropolis και Wang-Landau, αναπτύσσουμε και ένα νέο, του τύπου Wolff-Niedermayer που ήδη εφαρμόζεται στο μοντέλο Ising, με σκοπό την καλύτερη προσομοίωση της κρίσιμης συμπεριφοράς. Στη συνέχεια τον χρησιμοποιούμε για τη μελέτη χαρακτηριστικών ενεργειακών και μαγνητικών ποσοτήτων της κρίσιμης αλλαγής φάσης απουσία μαγνητικού πεδίου, βελτιώνοντας σημαντικά την ακρίβεια των ήδη υπαρχόντων αποτελεσμάτων και δίνοντας νέα για τις κρίσιμες κατανομές μαγνήτισης και ενέργειας και τους αντίστοιχους σωρευτές Binder. Τα αποτελέσματά μας επαληθεύουν σε γενικές γραμμές τις υφιστάμενες φαινομενολογικές θεωρίες, ενώ σε κάποιες περιπτώσεις προτείνονται διορθώσεις. Επιπλέον, επεκτείνεται η υφιστάμενη θεωρία του Binder προκειμένου να περιγράψει την κρίσιμη κατανομή της ενέργειας, ενώ εισάγεται ένας νέος ενεργειακός στατιστικός σωρευτής τύπου Binder για την αποτελεσματικότερη διάκριση των κρίσιμων αλλαγών φάσης. Κατόπιν, με τη μέθοδο της εντροπικής δειγματοληψίας των Wang-Landau, υπολογίζουμε αρχικά την εντροπία και από αυτήν τη θερμοχωρητικότητα και τη μαγνητική επιδεκτικότητα του συστήματος. Με τη βοήθεια της θεωρίας κλιμάκωσης σε πεπερασμένο μέγεθος (Finite-Size Scaling) για τα μεγέθη αυτά βρίσκουμε την κρίσιμη θερμοκρασία συναρτήσει του μαγνητικού πεδίου, οπότε προκύπτει τόσο το φασικό διάγραμμα στο επίπεδο $H-T$ όσο και οι τιμές των κρίσιμων εκθετών. Οι τελευταίοι, παρουσία αρνητικού εξωτερικού μαγνητικού πεδίου μεγαλύτερου από $-6J$, φαίνεται να ανήκουν σε μια νέα Κλάση Παγκοσμιότητας. Τέλος, η εξέταση της συμπεριφοράς του προτύπου ολοκληρώνεται με τη μελέτη των σωρευτών ενέργειας κατά μήκος της κρίσιμης καμπύλης του φασικού διαγράμματος.

National and Kapodistrian University of Athens
PHASE TRANSITIONS OF THE BAXTER-WU
MODEL

Ioannis N. Velonakis
Associate Professor Sotirios S. Martinos
Department of Physics, University of Athens

Main Advisor:

Abstract

In the present PhD Thesis we study the phase transitions of the Baxter-Wu model not only at zero but also at non-zero external magnetic field. These phase transitions are both 1st and 2nd order and they are studied by using existing phenomenological theories as well as Monte Carlo simulations. Apart from the existing Metropolis and Wang-Landau Monte Carlo methods, we also develop a new Wolff-Niedermayer type cluster algorithm, which improves considerably the simulations at critical points. Such algorithms have already being used widely for the Ising model. We use it for studying the characteristic energy and magnetic properties of the critical phase transition at zero external magnetic field, improving the existing results and giving new, especially for the energy and the magnetization distribution functions as well as for the corresponding Binder cumulants. Although our results are consistent in general with the existing phenomenological theories, in some cases the introduction of correction terms is necessary. We also extend the existing Binder phenomenological theory for the energy probability distribution function at the continuous phase transitions and we introduce a new Binder-like energy cumulant which seems more efficient in distinguishing phase transitions. For studying the phase transitions of the Baxter-Wu model in the presence of a negative external magnetic field, we calculate the entropy as a function of both energy and magnetization for different lattice sizes with the Wang-Landau entropic sampling method. By using the previous results, we calculate the isothermal magnetic susceptibility and the specific heat. Based on the phenomenological Finite-Size Scaling Theory, we find both the critical temperature as a function of the external magnetic field, in other words the phase diagram in the H - T plane, as well as the corresponding critical exponents. In the presence of a negative external magnetic field greater than $-6J$, these exponents probably belong to a new Universality Class. Finally, we study the energy cumulants' behavior along the phase transition line.

ΠΙΝΑΚΑΣ ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΩΝ

ΠΡΟΛΟΓΟΣ	13
ΕΙΣΑΓΩΓΗ	17
1.1 Βασικές σχέσεις από τη θερμοδυναμική	19
1.2 Βασικές σχέσεις από τη στατιστική φυσική	22
1.3 Διάκριση των αλλαγών φάσης	26
1.4 Κρίσιμα φαινόμενα	33
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2: ΘΕΩΡΙΕΣ ΚΛΙΜΑΚΩΣΗΣ	47
2.1 Γενικά για τις θεωρίες κλιμάκωσης (scaling)	47
2.2 Οι συντοριακές συνθήκες στα πεπερασμένα συστήματα	55
2.3 Η μέθοδος της κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους (Finite-Size Scaling)	58
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3: ΤΟ ΠΡΟΤΥΠΟ BAXTER-WU	63
3.1 Γενικά για το πρότυπο Baxter-Wu	63
3.2 Φυσική σημασία και εφαρμογές του προτύπου Baxter-Wu	68
3.3 Η φαινομενολογική θεωρία του Binder για την κατανομή μαγνήτισης	69
3.4 Φαινομενολογικός υπολογισμός των σωρευτών Binder 4 ^{ης} τάξης για την κατανομή μαγνήτισης στο πρότυπο Baxter-Wu	77
3.5 Η φαινομενολογική θεωρία του Binder για την κατανομή ενέργειας	85
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4: ΟΙ ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ	91
4.1 Γενικά για τις μεθόδους Monte Carlo	91
4.2 Ο αλγόριθμος Metropolis	96
4.3 Ο αλγόριθμος Heat-Bath («λουτρού θερμότητας»)	97
4.4 Αλγόριθμοι πλειάδων (cluster)	98
4.5 Αλγόριθμοι Εντροπικής Δειγματοληψίας (Entropic Sampling)	104
4.6 Πρόσθετα στοιχεία για τις προσομοιώσεις στο πρότυπο Baxter-Wu	107
4.7 Παραλληλοποιώντας τους αλγορίθμους Monte Carlo	111
4.8 Λίγα λόγια για τους τυχαίους αριθμούς	116
4.9 Η μέθοδος του μονού ιστογράμματος (single histogram method) για το εξωτερικό πεδίο	117
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5: ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ ΜΕ ΤΟΝ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟ METROPOLIS	120
5.1 Έλεγχος του προγράμματος και υπολογισμός του χρόνου ισορροπίας	120
5.2 Αποτελέσματα προσομοιώσεων μακριά από την κρίσιμη θερμοκρασία	125
5.3 Απόπειρα μελέτης του κρίσιμου σημείου με τον αλγόριθμο Metropolis	147
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6: Ο ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ ΠΛΕΙΑΔΩΝ (CLUSTER) ΤΡΙΓΩΝΩΝ ΓΙΑ ΤΟ ΠΡΟΤΥΠΟ BAXTER-WU	158

6.1	Η γενική ιδέα του αλγορίθμου	158
6.2	Έλεγχος του αλγορίθμου	167
6.3	Αξιολόγηση του αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων- υπολογισμός του δυναμικού κρίσιμου εκθέτη	177

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 7: ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ ΜΕ ΤΟΝ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟ ΠΛΕΙΑΔΩΝ ΤΡΙΓΩΝΩΝ ΣΤΟ ΚΡΙΣΙΜΟ ΣΗΜΕΙΟ ΑΠΟΥΣΙΑ ΕΞΩΤΕΡΙΚΟΥ ΜΑΓΝΗΤΙΚΟΥ ΠΕΔΙΟΥ

7.1	Η μαγνητική επιδεκτικότητα	191
7.2	Η κρίσιμη κατανομή μαγνήτισης	200
7.3	Οι κρίσιμοι σωρευτές Binder για τη μαγνήτιση	205
7.4	Ο κρίσιμος λόγος Binder για τη μαγνήτιση	211
7.5	Η κρίσιμη θερμοχωρητικότητα	218
7.6	Η κρίσιμη κατανομή της ενέργειας	224
7.7	Ο κρίσιμος σωρευτής Binder της ενέργειας	234
7.8	Εισάγοντας ένα νέο στατιστικό σωρευτή για την ενέργεια	247

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 8: ΜΕΛΕΤΗ ΤΟΥ ΠΡΟΤΥΠΟΥ BAXTER-WU ΠΑΡΟΥΣΙΑ ΑΡΝΗΤΙΚΟΥ ΕΞΩΤΕΡΙΚΟΥ ΜΑΓΝΗΤΙΚΟΥ ΠΕΔΙΟΥ

8.1	Κατασκευή φασικού διαγράμματος και υπολογισμός των κρίσιμων εκθετών	253
8.2	Οι κρίσιμοι ενεργειακοί σωρευτές παρουσία αρνητικού εξωτερικού μαγνητικού πεδίου	270

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 9: ΣΥΝΟΨΗ ΤΩΝ ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΩΝ.

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑΤΑ	289
A. Το Υπολογιστικό Κέντρο του Πανεπιστημίου Αθηνών	289
B. Διαγράμματα ροής αλγορίθμων	293
C. Κώδικες γεννητριών τυχαίων αριθμών	298
D. Κώδικας αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων	303
E. Κώδικας αλγορίθμου πλειάδων των Novotny και Evertz	315

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

ΕΥΡΕΤΗΡΙΟ ΕΙΚΟΝΩΝ

ΕΥΡΕΤΗΡΙΟ ΔΙΑΓΡΑΜΜΑΤΩΝ

ΕΥΡΕΤΗΡΙΟ ΠΙΝΑΚΩΝ

ΕΥΡΕΤΗΡΙΟ ΟΡΩΝ

**ΠΙΝΑΚΑΣ ΧΡΗΣΙΜΟΠΟΙΟΥΜΕΝΩΝ ΣΥΜΒΟΛΩΝ ΦΥΣΙΚΩΝ
ΜΕΓΕΘΩΝ**

Φυσικό Μέγεθος	Σύμβολο	Γραμματοσειρά
Μεταβλητή κατάληψης μιας πλεγματικής θέσης	c	Arial
Spin- μαγνητική ροπή	$\vec{s}$	Times New Roman (πλάγια)
Spin- μεταβλητή (με δυο τιμές, ± 1)	σ	Arial
Ανηγμένη θερμοκρασία	t	Arial
Ανηγμένο μαγνητικό πεδίο	h	Arial
Αντίστροφη απόλυτη θερμοκρασία	β	Arial
Απόλυτη θερμοκρασία	T	Arial
Διάνυσμα θέσης	$\vec{r}$	Times New Roman (πλάγια)
Ελεύθερη ενέργεια κατά Gibbs	G	Arial
Ελεύθερη ενέργεια κατά Gibbs ανά δομικό λίθο	g	Arial
Ελεύθερη ενέργεια κατά Helmholtz	F	Arial
Ελεύθερη ενέργεια κατά Helmholtz ανά δομικό λίθο	f	Arial
Ενέργεια	E	Times new Roman
Ενέργεια ανά δομικό λίθο	ϵ	Times new Roman
Ενέργεια σύνδεσης των ετεροατόμων στην προσρόφηση	ϵ_b	Times New Roman
Ενεργειακή σταθερά σύζευξης	J	Arial
Ενεργειακή σταθερά τριπλών αλληλεπιδράσεων στην προσρόφηση	ϵ_t	Times New Roman
Ενθαλπία	H	Garamond
Εντροπία	S	Arial
Εσωτερική Ενέργεια	U	Arial
Θερμικός συντελεστής υπό σταθερή μαγνήτιση	α_M	Arial
Θερμικός συντελεστής	α_H	Arial

υπό σταθερό εξωτερικό πεδίο		
Θερμοχωρητικότητα ανά δομικό λίθο υπό σταθερή μαγνήτιση	C_M	Times new Roman
Θερμοχωρητικότητα ανά δομικό λίθο υπό σταθερό εξωτερικό πεδίο	C_H	Times new Roman
Θερμοχωρητικότητα υπό σταθερή μαγνήτιση	C_M	Times new Roman
Θερμοχωρητικότητα υπό σταθερό εξωτερικό πεδίο	C_H	Times new Roman
Ισεντροπική μαγνητική επιδεικτικότητα	χ_S	Times new Roman (πλάγια)
Ισόθερμη μαγνητική επιδεικτικότητα	χ_T	Times new Roman (πλάγια)
Κανονική συνάρτηση επιμερισμού	Z	Times new Roman
Κλάσμα μεταβολής της κρίσιμης θερμοκρασίας (fractional shift)	ε	Arial
Κλάσμα στρογγυλοποίησης της κρίσιμης θερμοκρασίας (fractional rounding)	δ	Arial
Κρίσιμος εκθέτης επιδεικτικότητας	γ	Times New Roman
Κρίσιμος εκθέτης θερμοχωρητικότητας	α	Times New Roman
Κρίσιμος εκθέτης κρίσιμης ισόθερμου	δ	Times New Roman
Κρίσιμος εκθέτης μήκους συσχέτισης	ν	Times New Roman
Κρίσιμος εκθέτης παραμέτρου τάξης	β	Times New Roman
Κρίσιμος εκθέτης συνάρτησης συσχέτισης	η	Times New Roman
Κρίσιμος εκθέτης χάσματος (τάξης ℓ)	Δ_ℓ	Times New Roman
Λόγος Αποδοχής	A	Times new Roman (πλάγια)
Μαγνητική ροπή	$\vec{m}$	Times new Roman (πλάγια)
Μαγνητικό Πεδίο	H	Arial
Μαγνήτιση	M	Arial
Μαγνήτιση ανά δομικό	m	Arial

λίθο		
Μαγνητόνη του Bohr	μ_B	Times new Roman
Μεγάλη συνάρτηση επιμερισμού	Ω	Times new Roman
Μήκος συσχέτισης	ξ	Times new Roman
Όγκος	V	Arial
Όγκος ανά δομικό λίθο	v	Arial
Παράμετρος τάξης (γενικά)	A	Arial
Παράμετρος τάξης προτύπου Baxter-Wu	$\mathcal{P}$	Monotype Corsiva
Πίεση	P	Arial
Πιθανότητα μεταφοράς	P	Times new Roman (πλάγια)
Πιθανότητα Μικροιατάστασης	p	Times new Roman (πλάγια)
Πλέγμα	$\mathcal{T}$	Monotype Corsiva
Πλέγμα- κηρήθρα	$\mathcal{L}_H$	Monotype Corsiva
Πλήθος σωματιδίων	N	Times New Roman
Πλήθος των ετεροατόμων στην προσρόφηση	N_a	Times New Roman
Πυκνότητα	ρ	Times New Roman
Σταθερά του Boltzmann	k_B	Times New Roman
Χαμιλτονιανή	$\mathcal{H}$	Monotype Corsiva
Συνάρτηση συσχέτισης	Γ_c	Times New Roman
Συντελεστής πιθανότητας στο κρίσιμο σημείο	p_c	Times new Roman (πλάγια)
Υπόπλεγμα	$\mathcal{L}_T$	Monotype Corsiva
Χημικό δυναμικό	μ	Arial
Χρόνος	t	Times New Roman
Χρόνος ισορροπίας	τ_{eq}	Times New Roman
Χρόνος συσχέτισης	τ_{cor}	Times New Roman

ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Τον παρόν πόνημα περιέχει τα αποτελέσματα ερευνητικής δραστηριότητας που πραγματοποιήθηκε, επίσημα τουλάχιστον, από το καλοκαίρι του 2006 ως το Δεκέμβριο του 2012 στον Τομέα Φυσικής Στερεάς Κατάστασης του τμήματος Φυσικής του Πανεπιστημίου Αθηνών, σε συνεργασία με την ερευνητική ομάδα Κρισίμων Φαινομένων και Στατιστικής Φυσικής, μια από τις καταξιωμένες ελληνικές ερευνητικές ομάδες στο εσωτερικό και στο εξωτερικό, με την οποία ο γράφων είχε την τιμή να γνωριστεί από τον καιρό που ήταν προπτυχιακός φοιτητής. Σημειώνεται ότι αν και η απόφαση για το είδος και το αντικείμενο των σπουδών μου ελήφθη σε πολύ μικρή ηλικία, η απόφαση για εκπόνηση διδακτορικής διατριβής αλλά και το θέμα προέκυψαν σε κάποιο βαθμό συγκυριακά. Το καλοκαίρι του 2005 ολοκλήρωσα τη διπλωματική του εργασίας για τη λήψη Μεταπτυχιακού Διπλώματος Ειδίκευσης στη Φυσική των Υλικών υπό την επίβλεψη του Επίκουρου τότε Καθηγητή Σωτήριου Μαρτίνου με αντικείμενο την εφαρμογή ορισμένων στατιστικών σωρευτών στο πρότυπο Baxter-Wu. Από τα αποτελέσματά της ήταν προφανές ότι οι διαθέσιμοι ως τότε αλγόριθμοι Metropolis και Heat-Bath αδυνατούσαν να παρέχουν ακρίβεια στο καλά γνωστό από τη βιβλιογραφία κρίσιμο σημείο, τουλάχιστο μέσα σε εύλογο χρονικό διάστημα.

Αναζητήσαμε πιθανές λύσεις για το πρόβλημα σε έγκυρα διεθνή επιστημονικά περιοδικά και μονογραφίες. Την προσοχή μας τράβηξαν οι ιδέες του Ferenc Niedermayer πάνω στους γενικευμένους αλγορίθμους cluster, όπως παρουσιάζονται στο εξαιρετικό ομολογουμένως βιβλίο των Newman και Barkema. Ελπίζαμε να καταλήξουμε σε έναν αλγόριθμο παρόμοιο με εκείνους του Wolff ή των Swendsen-Wang, οι οποίοι έχουν αποδειχτεί ιδιαίτερα αποτελεσματικοί στην προσομοίωση του κρίσιμου σημείου του προτύπου Ising. Ωστόσο, η εφαρμογή τους σε ένα πρότυπο με τριπλές αλληλεπιδράσεις δε φαινόταν τετριμμένη υπόθεση. Εδώ εισάγαμε μια καινοτομία: αντί για μεμονωμένα σημεία, όπως συνηθίζονταν ως τότε, εργαστήκαμε με τρίγωνα. Ήταν η αρχή, δηλαδή το ήμισι του παντός. Τον ίδιο Αύγουστο παρουσιάστηκα να υπηρετήσω τη στρατιωτική μου θητεία. Πριν την ολοκλήρωσή της είχε αποφασιστεί το θέμα και είχε οριστεί η τριμελής συμβουλευτική επιτροπή.

Ακολούθησαν χρόνια σκληρής και επίμονης επιστημονικής έρευνας, τόσο με σκοπό τη αξιολόγηση και βελτιστοποίηση του σχετικού προγράμματος όσο και την αξιοποίησή του για τη μελέτη ιδιοτήτων του προτύπου Baxter-Wu που δεν είχαν ως τότε προκαλέσει το ενδιαφέρον της επιστημονικής κοινότητας. Παράλληλα, διερευνήθηκαν με προσομοιώσεις οι ελάχιστοι γνωστές μέχρι εκείνη την εποχή αλλαγές φάσης του παραπάνω μοντέλου παρουσία μαγνητικού πεδίου. Τονίζουμε πως σημαντικό μέρος της διατριβής δεν έχει ακόμα δημοσιευτεί, ωστόσο καλώς εχόντων των πραγμάτων αυτό θα συμβεί σχετικά σύντομα. Παρόλα αυτά, το θέμα απέχει αρκετά από το να θεωρηθεί εξαντλημένο. Για τον αναγνώστη όμως που θα έχει το ενδιαφέρον και την υπομονή να διατρέξει την έκτασή της, περιέχονται πιστεύουμε χρήσιμα και πρωτότυπα επιστημονικά συμπεράσματα, ενώ ανοίγονται νέοι ερευνητικοί δρόμοι, καθώς αρκετά από αυτά μπορούν να γενικευτούν και σε άλλα φυσικά συστήματα.

Στο σημείο αυτό συνηθίζεται η έκφραση ευχαριστιών προς όσους με οποιονδήποτε τρόπο συνέβαλαν στην προσπάθεια του συγγραφέα. Ένας από τους αναμφίβολα κορυφαίους φυσικούς όλων των εποχών, ο sir Isaak Newton σημείωνε χαρακτηριστικά: «Έφτασα ψηλά γιατί πάτησα σε ώμους γιγάντων!». Έτσι λοιπόν εκφράζονται ευχαριστίες προς

- τον κύριο επιβλέποντα της διατριβής, δηλαδή τον Αναπληρωτή Καθηγητή του τμήματος Φυσικής του Ε.Κ.Π.Α. Σωτήριο Μαρτίνο, για την αμέριστη συμπαράσταση και βοήθειά του σε όλα τα στάδια εκπόνησης της εργασίας αυτής. Ακόμα, για τη μεγάλη υπομονή που επέδειξε απέναντι στις αυξημένες επαγγελματικές και άλλες υποχρεώσεις του γράφοντος, εξαιτίας των οποίων οι προγραμματισμένες συναντήσεις μας πραγματοποιούνταν Σαββατοκύριακα, αργίες και γενικότερα σε ημέρες και ώρες που συνήθως οι περισσότεροι δεν εργάζονται.
- τους Αναπληρωτές Καθηγητές του τμήματος Φυσικής του Ε. Κ. Π. Α. Αναστάσιο Μαλάκη και Ιωάννη Χαζηγαπίου, μέλη της τριμελούς συμβουλευτικής επιτροπής της διατριβής. Ειδικά ο πρώτος, με τον οποίο είχα την τύχη να συνεργαστώ από τα προπτυχιακά μου χρόνια, έπαιξε με τις καίριες παρατηρήσεις του αποφασιστικό ρόλο στη διαμόρφωση όχι μόνο της τελικής μορφής της παρούσας εργασίας αλλά και της όποιας επιστημονικής οντότητας του συγγραφέα της.
- τα υπόλοιπα μέλη Δ.Ε.Π. που συμμετείχαν στην επταμελή επιτροπή κρίσης της διατριβής πιο συγκεκριμένα τους Καθηγητές του τμήματος Φυσικής Ε.Κ.Π.Α. Ευστράτιο Μανουσάκη, Νικόλαο Στεφάνου και Παναγιώτη Βαρώτσο καθώς και τον Αναπληρωτή Καθηγητή του Ε. Μ. Π. Κωνσταντίνο Παρασκευαΐδη. Επιπλέον, τους δυο πρώτους για την ευγενική παραχώρηση των υπολογιστικών συστημάτων Ithaca και Apollo αντίστοιχα, όπου τελικά υλοποιήθηκε μεγάλο μέρος των προσομοιώσεων που ακολουθούν.
- τον Επίκουρο Καθηγητή του τμήματος Φυσικής Ε.Κ.Π.Α. Εμμανουήλ Συσιάκη για τη φιλοξενία στους χώρους του εργαστηρίου του μετά το 2009 αλλά και τις συμβουλές και τη βοήθεια που σε κάθε ευκαιρία πρόθυμα μας παρέχει.
- τον Καθηγητή Φυσικής και Πρόεδρο του τμήματος Φυσικής και Αστρονομίας στο Πολιτειακό Πανεπιστήμιο του Mississippi στις Η. Π. Α. Mark Novotny για το ενδιαφέρον του και τις συμβουλές του.
- τον ερευνητή Δρα Φυσικής Γεώργιο Γκαντζούνη και τον Ιωάννη Γεωργιάδη , διαχειριστή υπολογιστικών συστημάτων στο Υπολογιστικό Κέντρο του Ε.Κ.Π.Α., για τον υπερβάλλοντα χρόνο που διέθεσαν ώστε να αξιοποιηθούν αποτελεσματικά τα υπολογιστικά συστήματα με λειτουργικό σύστημα UNIX/LINUX που μας παραχωρήθηκαν.
- τον υποψήφιο διδάκτορα του τομέα Φυσικής Στερεάς Κατάστασης του τμήματος Φυσικής του Ε.Κ.Π.Α. Κωνσταντίνο Γεωργαλά, ο οποίος διευκόλυνε αφάνταστα ενημερώνοντας για την πορεία των υπολογιστικών προσομοιώσεων, επανεκκινώντας τις σε περίπτωση διακοπής ρεύματος και στέλνοντας τα τελικά αποτελέσματα ώστε να πραγματοποιηθεί η επεξεργασία τους.
- το Ίδρυμα Κρατικών Υποτροφιών (Ι. Κ. Υ.), του οποίου ο συγγραφέας υπήρξε υπότροφος, για την οικονομική του αρωγή τόσο κατά τη διάρκεια των μεταπτυχιακών σπουδών όσο και κατά την εκπόνηση της παρούσας διδακτορικής διατριβής.

Κλείνοντας, ο γράφων θα ήθελε να εκφράσσει την αγάπη και την ευγνωμοσύνη του προς τους αφανείς ήρωες αυτής της προσπάθειας, δηλαδή τους γονείς του Νικόλαο και Λευκοθέα, τον αδελφό του Σταύρο και τη Μαρία, για την ποικιλόμορφη βοήθεια και συμπαράστασή τους όλα αυτά τα χρόνια, αλλά και για την υπομονή που επέδειξαν στις κάποιες φορές ατελειώτες ώρες που χρειάστηκε να διατεθούν για την ολοκλήρωσή της. Καλή ανάγνωση !

Αθήνα, Φεβρουάριος 2013

Ιωάννης Ν. Βελονάκης

ΛΕΞΕΙΣ- ΚΛΕΙΔΙΑ

phase transitions: αλλαγές φάσης
critical phenomena: κρίσιμα φαινόμενα
critical point: κρίσιμο σημείο
critical exponents: κρίσιμοι εκθέτες
Universality Class: Κλάση Παγκοσμιότητας
Finite-Size Scaling: Κλιμάκωση Πεπερασμένου Μεγέθους
Baxter-Wu model: πρότυπο Baxter-Wu
Monte Carlo simulations: προσομοιώσεις Monte Carlo
Metropolis algorithm: αλγόριθμος Metropolis
Heat-Bath algorithm: αλγόριθμος Heat-Bath
cluster algorithm: αλγόριθμος πλειάδων
triangle- cluster algorithm: αλγόριθμος πλειάδων τριγώνων
Wang-Landau algorithm: αλγόριθμος Wang-Landau
isothermal magnetic susceptibility: ισόθερμη μαγνητική επιδεκτικότητα
heat capacity: θερμοχωρητικότητα
specific heat: ειδική θερμότητα
magnetization distribution function: κατανομή μαγνήτισης
energy distribution function: κατανομή ενέργειας
Binder cumulants: σωρευτές Binder

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Σκοπός μιας διδακτορικής διατριβής είναι η παραγωγή προτύπου επιστημονικού έργου, το οποίο να συμβάλλει αποδεδειγμένα στην προαγωγή της επιστήμης. Έτσι, σε συνενόηση με την τριμελή συμβουλευτική επιτροπή, επιλέχθηκαν ως αντικείμενο μελέτης της παρούσας διδακτορικής διατριβής οι αλλαγές φάσης του προτύπου Baxter-Wu, ενός απλουστευμένου μαγνητικού μοντέλου με κύριο χαρακτηριστικό την παρουσία τριπλών αλληλεπιδράσεων μεταξύ spin-μαγνητικών ροπών. Αυτό προτάθηκε από τους Baxter και Wu τη δεκαετία του 1970. Τράβηξε την προσοχή των ερευνητών στο παρελθόν επειδή ορισμένες από τις χαρακτηριστικές του ποσότητες ήταν δυνατό να υπολογιστούν αναλυτικά, συνεπώς χρησιμοποιήθηκε συχνά για τη μελέτη και την κατανόηση φασικών μεταβάσεων, ιδίως σε εποχές που η χρήση ηλεκτρονικών υπολογιστικών συστημάτων στην επίλυση φυσικών προβλημάτων βρισκόταν ακόμα στα σπάργανα ή ήταν πολύ περιορισμένη σε σχέση με τις ημέρες μας.

Ωστόσο, δεν έλειπαν και μεγέθη του παραπάνω προτύπου που δεν ήταν δυνατό να βρεθούν αναλυτικά και για τη συμπεριφορά τους γνωρίζαμε αρκετά λιγότερα, όπως οι κατανομές μαγνήτισης και ενέργειας αλλά και διάφοροι στατιστικοί σωρευτές. Επίσης, ελάχιστα είχαν γίνει για τη μελέτη του παρόντος μοντέλου παρουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Το κενό αυτό άρχισε να καλύπτεται με την ανάπτυξη των υπολογιστικών προσομοιώσεων στη Στατιστική Φυσική τις τελευταίες τρεις δεκαετίες, τα αποτελέσματα των οποίων έρχονται να επαληθεύσουν συμπεράσματα αναλυτικών προσεγγίσεων αλλά και να αποτελέσουν τη βάση για την ερμηνεία της συμπεριφοράς πολύπλοκων φυσικών συστημάτων. Η παρούσα εργασία στηρίζεται στην πραγματοποίηση υπολογιστικών προσομοιώσεων Monte Carlo και ανάλυση των αποτελεσμάτων τους με τη χρήση ήδη υπάρχοντων, φαινομενολογικών συνήθως, θεωριών, κυρίως της Θεωρίας Κλιμάκωσης Πεπερασμένου Μεγέθους (Φαινομενολογική Επανανακανονικοποίηση) και εκείνης που ανέπτυξε ο Kurt Binder και άλλοι για τις κατανομές μαγνήτισης και ενέργειας. Σε όποια σημεία αυτές κρίθηκαν ανεπαρκείς, προτείναμε διορθώσεις ή εισηγηθήκαμε επεκτάσεις.

Το ομολογουμένως αρκετό υλικό που συγκεντρώθηκε οργανώθηκε τελικά σε εννιά κεφάλαια. Στα πρώτα τέσσερα συμπεριλήφθηκε κυρίως η προϋπάρχουσα σχετική επιστημονική γνώση. Για λόγους επιστημονικής πληρότητας αλλά και διευκόλυνσης του αναγνώστη, η παρουσίασή της είναι αρκετά εκτεταμένη. Πιο συγκεκριμένα, στο πρώτο κεφάλαιο περιέχονται απαραίτητες έννοιες από τη θερμοδυναμική, τη στατιστική φυσική και τη θεωρία των αλλαγών φάσης, οι οποίες θα χρησιμοποιηθούν κατόπιν στη μελέτη μας. Ακολουθεί στο δεύτερο κεφάλαιο η παρουσίαση της Θεωρίας Κλιμάκωσης (Scaling) και της Θεωρίας Κλιμάκωσης Πεπερασμένου Μεγέθους (Finite-Size Scaling) ενώ το τρίτο αφιερώνεται στην περιγραφή του προτύπου Baxter-Wu, των μέχρι σήμερα επιστημονικών μας γνώσεων για αυτό αλλά και της φαινομενολογικής θεωρίας που ανέπτυξε ο Kurt Binder και άλλοι για τις κατανομές μαγνήτισης και ενέργειας. Η προσαρμογή αυτής της θεωρίας στην περίπτωση του μελετώμενου μοντέλου και ιδίως ο σχετικός αναλυτικός υπολογισμός των σωρευτών της μαγνήτισης για την παρατηρούμενη αλλαγή φάσης 1^{ου} είδους αποτελεί το μόνο νέο στοιχείο που περιλαμβάνεται στα κεφάλαια αυτά, παρέκκλιση που έγινε για τεχνικούς λόγους. Τέλος, το ιδιαίτερα εκτεταμένο 4^ο κεφάλαιο περιέχει όλες τις αριθμητικές μεθόδους που πρόκειται να χρησιμοποιηθούν στη συνέχεια, προσαρμοσμένες φυσικά στο υπό μελέτη σύστημά μας. Σε πολλά σημεία ακολουθήσαμε για τη συγγραφή του το εξαιρετικό βιβλίο των Newman και Barkema “Monte Carlo Methods in Statistical Physics”.

Στα επόμενα κεφάλαια παρουσιάζονται τα νέα αποτελέσματα για το πρότυπο Baxter-Wu, μαζί με σχόλια, προτάσεις και βελτιώσεις των υφιστάμενων θεωριών και μεθόδων. Έτσι, το κεφάλαιο 5 αφορά τη μελέτη του συστήματός μας απουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου με τον πολυχρησιμοποιημένο αλγόριθμο Metropolis. Σε αυτό αποτυπώνονται οι δυνατότητες του αλγορίθμου αυτού αλλά παρ'όλα αυτά η αδυναμία του να δώσει ακριβή αποτελέσματα στα κρίσιμα σημεία. Μεγάλο μέρος των αποτελεσμάτων του έχουν συμπεριληφθεί στη διπλωματική μας εργασία για τη λήψη Μεταπτυχιακού Διπλώματος Ειδίκευσης στη Φυσική των Υλικών (2005) και έχουν ήδη δημοσιευτεί. Το κεφάλαιο 6 πάλι αναφέρεται σε ένα νέο αλγόριθμο πλειάδων (προτιμήσαμε τον όρο «πλειάδες» αντί του όρου «συσσωματώματα» για την απόδοση στα Ελληνικά του αγγλικού όρου «cluster») τον οποίο αναπτύξαμε ειδικά για τη μελέτη των κρίσιμων αλλαγών φάσης του μοντέλου Baxter-Wu αλλά και άλλων, πιο πολύπλοκων προτύπων με αποκλειστικά τριπλές αλληλεπιδράσεις.

Τα πιο σημαντικά αποτελέσματα περιέχονται στα κεφάλαια 7 και 8. Στο πρώτο παρουσιάζονται εκείνα της εφαρμογής του νέου αλγορίθμου πλειάδων στο επαρκώς γνωστό κρίσιμο σημείο απουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Μελετώνται τόσο μαγνητικά όσο και ενεργειακά μεγέθη, όπως θερμοχωρητικότητα, ισόθερμη μαγνητική επιδεικτικότητα και στατιστικοί σωρευτές, βελτιώνοντας σημαντικά τα ήδη υφιστάμενα αποτελέσματα υπολογιστικών προσομοιώσεων και δίνοντας αρκετά ακριβή νέα εκεί όπου δεν υπήρχαν μέχρι σήμερα. Επιπλέον, αναδεικνύεται η επίδραση των συνοριακών συνθηκών στην κατανομή της μαγνήτισης και στους στατιστικούς σωρευτές της, ενώ επεκτείνεται η φαινομενολογική θεωρία του Binder για να περιγράψει την κρίσιμη κατανομή ενέργειας. Επίσης, προτείνεται η υιοθέτηση ενός νέου στατιστικού σωρευτή για την ενέργεια, ο οποίος δείχνει να επιτρέπει την ευκολότερη διάκριση των αλλαγών φάσης. Τέλος, στο κεφάλαιο 8 μελετάμε με τη βοήθεια του αλγορίθμου Wang-Landau μια αλλαγή φάσης του μοντέλου Baxter-Wu παρουσία αρνητικού εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, αποδεικνύοντας ότι πρόκειται για κρίσιμο φαινόμενο και υπολογίζοντας τους αντίστοιχους κρίσιμους εκθέτες. Οι τελευταίοι φαίνεται να ανήκουν σε μια εντελώς νέα Κλάση Παγκοσμιοτήτας. Εξετάζεται ακόμα η συμπεριφορά των στατιστικών σωρευτών για την ενέργεια, προκειμένου κυρίως να επαληθευτούν οι ιδιότητές τους.

Τα κυριότερα επιστημονικά συμπεράσματα της παρούσας διδακτορικής διατριβής συγκεντρώθηκαν και συνοψίστηκαν σε ένα ξεχωριστό κεφάλαιο, το 9^ο, μαζί με ορισμένα σημεία που πρέπει κατά την άποψή μας να αποτελέσουν αντικείμενο περαιτέρω έρευνας. Ας σημειωθεί εδώ ότι μόνο ένα μέρος των αποτελεσμάτων που παρατίθενται έχει ήδη δημοσιευτεί ενώ αρκετά, ιδίως από τα κεφάλαια 7 και 8 βρίσκονται σε διαδικασία δημοσίευσης. Τα απαραίτητα για την κατανόηση πτυχών της εργασίας μας που δεν εντάσσονταν εύκολα στο κυρίως κείμενο αποτελούν παραρτήματα αυτής. Πρόκειται για τα διαγράμματα ροής των χρησιμοποιούμενων αλγορίθμων, κώδικες γεννητριών τυχαίων αριθμών (από το εξαιρετικό βιβλίο “Numerical Recipes in Fortran 90: the Art of Parallel Scientific Computing”) αλλά και πλήρη τμήματα κώδικα (σε γλώσσα FORTRAN 95/2003) που υλοποιούν αλγορίθμους πλειάδων στο πρότυπο Baxter-Wu, με σκοπό την ευκολότερη χρήση τους. Επίσης στο παράρτημα γίνεται μια σύντομη αναφορά στα μεγάλα υπολογιστικά συστήματα του Υπολογιστικού Κέντρου του Πανεπιστημίου Αθηνών αλλά και του τμήματος Φυσικής, επειδή η συνεισφορά τους στην εξαγωγή των αποτελεσμάτων μας υπήρξε συχνά αποφασιστική.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1: ΑΛΛΑΓΕΣ ΦΑΣΗΣ ΚΑΙ ΚΡΙΣΙΜΑ ΦΑΙΝΟΜΕΝΑ

1.1 Βασικές σχέσεις από τη θερμοδυναμική

Στο εισαγωγικό αυτό κεφάλαιο θα ασχοληθούμε με τις αλλαγές φάσης δίνοντας έμφαση στα κρίσιμα φαινόμενα σε μαγνητικά συστήματα. Είναι γνωστό ότι στις αλλαγές φάσης περιλαμβάνονται πολύ συνηθισμένα φαινόμενα στη φύση και στην καθημερινή ζωή, όπως το λιώσιμο των πάγων και ο βρασμός του νερού. Επιπλέον, αλλαγές φάσης εμφανίζονται σε σημαντικές βιομηχανικές διεργασίες σαν τη μεταλλουργία ή την κλασματική απόσταξη του πετρελαίου. Γενικά μπορούμε να πούμε πως παίζουν αποφασιστικό ρόλο τόσο στην εξέλιξη του σύμπαντος και της Γης όσο και στην ανάπτυξη της τεχνολογίας.

Πριν συνεχίσουμε όμως χρειάζεται να υπενθυμίσουμε ορισμένες βασικές έννοιες της θερμοδυναμικής, η οποία θεμελιώθηκε γύρω στα μέσα του δέκατου ένατου αιώνα [1], [2] με τις εργασίες των Julius Robert Mayer, Herman von Helmholtz, James Prescott Joule, Rudolf Clausius και William Thomson (λόρδου Kelvin). Είναι μια γενική φαινομενολογική θεωρία που περιγράφει τις ιδιότητες των υλικών σωμάτων που μπορούν να χαρακτηριστούν με τη βοήθεια μικροσκοπικών παραμέτρων, χωρίς συνήθως να ενδιαφέρεται για μικροσκοπικούς μηχανισμούς. Ολόκληρο το θεωρητικό της οικοδόμημα στηρίζεται σε τρεις βασικές αρχές (Νόμοι της Θερμοδυναμικής). Η πρώτη εκφράζει την Αρχή Διατήρησης της Ενέργειας, η δεύτερη χαρακτηρίζει την κατεύθυνση της εξέλιξης των θερμοδυναμικών διαδικασιών και η τρίτη θέτει περιορισμούς στις θερμοδυναμικές διαδικασίες, αφού απαγορεύει θερμοκρασίες ίσες με το απόλυτο μηδέν. Όλα τα συστήματα που μελετά θεωρούνται πως έχουν πλήθος δομικών λίθων N και αριθμό βαθμών ελευθερίας που τείνει στο άπειρο ($N \rightarrow +\infty$, το λεγόμενο θερμοδυναμικό όριο), στην πράξη όμως $N \sim N_A$, όπου $N_A = 6, 023 \cdot 10^{23}$ ο αριθμός του Avogadro. Πρόκειται για ισχυρή θεωρία, η οποία βρίσκει πολλές εφαρμογές σε πολλούς, φαινομενικά διαφορετικούς επιστημονικούς κλάδους (φυσική, χημεία, γεωλογία, μηχανική κ.α.), αφού οι περισσότερες προβλέψεις της επαληθεύονται πειραματικά.

Στη συνέχεια θα εφαρμόσουμε τις προηγούμενες αρχές στην περίπτωση αντιστρεπτών μεταβολών ενός μαγνητικού συστήματος, δηλαδή ενός συστήματος που οι μικροσκοπικοί βαθμοί ελευθερίας του είναι αποκλειστικά μαγνητικής φύσης (λ.χ. οφειλόμενοι σε κβαντική αλληλεπίδραση ανταλλαγής). Ξεκινώντας από τον 1^ο Νόμο της Θερμοδυναμικής (Αρχή Διατήρησης της Ενέργειας) και εφαρμόζοντας κατάλληλους μετασχηματισμούς Legendre μπορούμε να ορίσουμε θερμοδυναμικές συναρτήσεις γνωστές σαν θερμοδυναμικά δυναμικά. Τέτοια είναι η ενθαλπία H , η ελεύθερη ενέργεια F και η ελεύθερη ενέργεια G , οι οποίες δίνονται από τις σχέσεις [3]

$$H = H(S, M) = U - MS \quad (1.1),$$

$$F = F(T, M) = U - TS \quad (1.2),$$

$$G = G(T, H) = U - TS - MH \quad (1.3),$$

όπου U η εσωτερική ενέργεια του συστήματος, οφειλόμενη αποκλειστικά στην ενέργεια των μαγνητικών αλληλεπιδράσεων μεταξύ των δομικών λίθων του, T η απόλυτη θερμοκρασία του, S η

εντροπία του, $\mathbf{M}$ η μακροσκοπική μαγνήτιση και $\mathbf{H}$ το εξωτερικά εφαρμοζόμενο «μαγνητίζον» πεδίο [4]. Από την ίδια διαδικασία προκύπτει επίσης ότι

$$S = - \left. \frac{\partial G}{\partial T} \right|_{\mathbf{H}} \quad (1.4),$$

$$S = - \left. \frac{\partial F}{\partial T} \right|_{\mathbf{M}} \quad (1.5),$$

$$\mathbf{H} = \left. \frac{\partial F}{\partial \mathbf{M}} \right|_{\mathbf{T}} \quad (1.6).$$

$$\mathbf{M} = - \left. \frac{\partial G}{\partial \mathbf{H}} \right|_{\mathbf{T}} \quad (1.7).$$

Ξεχωριστό ενδιαφέρον, όπως θα δούμε στη συνέχεια, παρουσιάζουν οι συναρτήσεις απόκρισης ενός συστήματος [5]. Στην περίπτωση μας αυτές είναι:

- η ισόθερμη και η ισηντροπική (αδιαβατική) μαγνητική επιδεικτικότητα ($\chi_{\mathbf{T}}$ και $\chi_{\mathbf{S}}$ αντίστοιχα), οι οποίες εκφράζουν την απόκριση του συστήματος σε εξωτερικό μαγνητικό ερέθισμα και δίνονται από τους τύπους

$$\chi_{\mathbf{T}} = \left. \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial \mathbf{H}} \right|_{\mathbf{T}} = - \left. \frac{\partial^2 G}{\partial \mathbf{H}^2} \right|_{\mathbf{T}} \quad (1.8),$$

$$\chi_{\mathbf{S}} = \left. \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial \mathbf{H}} \right|_{\mathbf{S}} = - \left. \frac{\partial^2 H}{\partial \mathbf{H}^2} \right|_{\mathbf{S}} \quad (1.9).$$

- οι θερμοχωρητικότητες υπό σταθερό εξωτερικό πεδίο $\mathbf{H}$ και υπό σταθερή μακροσκοπική μαγνήτιση $\mathbf{M}$ ($C_{\mathbf{H}}$ και $C_{\mathbf{M}}$ αντίστοιχα), οι οποίες εκφράζουν τη θερμότητα που εκλύεται ή απορροφάται από το σύστημα όταν μεταβάλλεται η θερμοκρασία του

$$C_{\mathbf{H}} = T \left. \frac{\partial S}{\partial T} \right|_{\mathbf{H}} = \left. \frac{\partial H}{\partial T} \right|_{\mathbf{H}} = - T \left. \frac{\partial^2 G}{\partial T^2} \right|_{\mathbf{H}} \quad (1.10),$$

$$C_{\mathbf{M}} = T \left. \frac{\partial S}{\partial T} \right|_{\mathbf{M}} = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_{\mathbf{M}} = - T \left. \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right|_{\mathbf{M}} \quad (1.11).$$

- οι θερμοικοί συντελεστές της μακροσκοπικής μαγνήτισης $\mathbf{M}$ και του μαγνητικού πεδίου $\mathbf{H}$ (α_H και α_M αντίστοιχα), οι οποίοι εκφράζουν την απόκριση των αντίστοιχων μεγεθών όταν μεταβάλλεται η θερμοκρασία του συστήματος

$$\alpha_H = \left. \frac{\partial M}{\partial T} \right|_H \quad (1.12),$$

$$\alpha_M = \left. \frac{\partial H}{\partial T} \right|_M = -\frac{\alpha_H}{\chi_T} \quad (1.13).$$

Αξίζει να σημειωθεί ότι οι συναρτήσεις απόκρισης C_M και α_M ενός συστήματος υπό σταθερή μακροσκοπική μαγνήτιση $\mathbf{M}$ είναι εξαιρετικά δύσκολο να παρατηρηθούν στην πράξη ή να μετρηθούν πειραματικά, αφού για να συμβεί κάτι τέτοιο θα έπρεπε αυτό να περνά μόνο από καταστάσεις με την ίδια κάθε φορά $\mathbf{M}$.

Μπορούμε επίσης να ορίσουμε την καταστατική εξίσωση του συστήματος, η οποία στα μαγνητικά συστήματα έχει μια από τις επόμενες ισοδύναμες μορφές [6]

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}(\mathbf{H}, T) \quad (1.14),$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}(\mathbf{M}, T) \quad (1.15).$$

Η ακριβής έκφραση αυτών των σχέσεων για τις διάφορες τιμές των $\mathbf{M}$, $\mathbf{H}$, T δεν είναι συνήθως εύκολο να προσδιοριστεί. Ας σημειωθεί εδώ ότι παρόμοιες εκφράσεις με τις προαναφερθείσες προκύπτουν και για τα ρευστά με την αντικατάσταση $\mathbf{H} \rightarrow \mathbf{P}$, $\mathbf{M} \rightarrow -\mathbf{V}$, $T \rightarrow T$ ή, σύμφωνα με το M. E. Fisher [7], $\mathbf{H} \rightarrow \mu$, $\mathbf{M} \rightarrow \rho$, $T \rightarrow T$ (μ είναι το γνωστό από τη θερμοδυναμική χημικό δυναμικό).

Συχνά στη θερμοδυναμική οι μεταβλητές, ανεξάρτητες και εξαρτημένες, διακρίνονται σε εκτατικές, οι οποίες εξαρτώνται από το συνολικό αριθμό N δομικών λίθων ενός συστήματος, και σε εντατικές, οι οποίες είναι ανεξάρτητες από το N . Τυπικά παραδείγματα εκτατικών μεταβλητών είναι ο όγκος $\mathbf{V}$ (Arial γραμματοσειρά) και η μακροσκοπική μαγνήτιση $\mathbf{M}$ ενώ στη δεύτερη κατηγορία ανήκουν η θερμοκρασία T , η πίεση $\mathbf{P}$ και το εξωτερικό πεδίο $\mathbf{H}$. Προφανώς μια εκτατική μεταβλητή μπορεί εύκολα να δώσει μια αντίστοιχη εντατική αν διαιρεθεί με το πλήθος N των δομικών λίθων ενός συστήματος. Έτσι λ.χ. από τον όγκο $\mathbf{V}$ προκύπτει όγκος ανά δομικό λίθο ενός συστήματος

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{V}}{N} \quad (1.16).$$

Η τελευταία παρατήρηση οδήγησε το M. E. Fisher [7] να εισάγει μια πιο θεμελιώδη διάκριση των θερμοδυναμικών μεταβλητών. Τούτη στηρίζεται στις ανισοτικές σχέσεις

$$\left. \frac{\partial^2 \mathbf{G}}{\partial \mathbf{T}^2} \right|_{\mathbf{H}} \leq 0 \text{ και } \left. \frac{\partial^2 \mathbf{G}}{\partial \mathbf{H}^2} \right|_{\mathbf{T}} \leq 0 \quad (1.17),$$

$$\left. \frac{\partial^2 \mathbf{F}}{\partial \mathbf{T}^2} \right|_{\mathbf{M}} \leq 0 \text{ και } \left. \frac{\partial^2 \mathbf{F}}{\partial \mathbf{M}^2} \right|_{\mathbf{T}} \geq 0 \quad (1.18),$$

οι οποίες αποδεικνύονται γενικά για κάθε σύστημα, καθορίζοντας την κυρτότητα των θερμοδυναμικών δυναμικών. Οι μεταβλητές εκείνες ως προς τις οποίες τα θερμοδυναμικά δυναμικά είναι κοίλες συναρτήσεις λέγονται «πεδία» ενώ εκείνες ως προς τις οποίες τα θερμοδυναμικά δυναμικά είναι κυρτές συναρτήσεις λέγονται «πυκνότητες». Έτσι, σύμφωνα με τις ανισότητες (1.17), (1.18), στα μαγνητικά συστήματα «πεδία» θα είναι η θερμοκρασία $\mathbf{T}$ και το πεδίο $\mathbf{H}$ ενώ «πυκνότητα» μπορεί να θεωρηθεί η μακροσκοπική μαγνήτιση $\mathbf{M}$.

Τα «πεδία» έχουν τη χαρακτηριστική αλλά όχι προφανή ιδιότητα να έχουν πάντα την ίδια τιμή για όλη την περιοχή ενός συστήματος σε θερμοδυναμική ισορροπία. Αντίθετα μια «πυκνότητα» μπορεί να έχει την ίδια χρονική στιγμή διαφορετική τιμή σε καθεμιά από τις περιοχές ομοιογένειας (φάσεις) ενός τέτοιου συστήματος. Τούτο συμβαίνει για παράδειγμα με την πυκνότητα του νερού στο τριπλό του σημείο, όπου συνυπάρχουν το νερό, ο πάγος και οι υδρατμοί σε ισορροπία. Οι Griffiths και Wheeler [3] χρησιμοποίησαν την παραπάνω ιδιότητα σαν κριτήριο για να διακρίνουν τις θερμοδυναμικές μεταβλητές σε «πεδία» και σε «πυκνότητες».

1.2 Βασικές σχέσεις από τη στατιστική φυσική

Για την πληρέστερη κατανόηση των φαινομένων που θα μελετήσουμε στη συνέχεια και για την πραγματοποίηση υπολογισμών πρέπει να θυμηθούμε ορισμένες βασικές έννοιες της στατιστικής μηχανικής. Η στατιστική μηχανική είναι ο κλάδος της φυσικής που ασχολείται με την πρόβλεψη και την ερμηνεία των μακροσκοπικών ιδιοτήτων των συστημάτων με πολύ μεγάλο αριθμό βαθμών ελευθερίας (θερμοδυναμικά συστήματα) ξεκινώντας από τις μικροσκοπικές ιδιότητες των δομικών λίθων τους που παρέχονται από την κλασική ή την κβαντική μηχανική. Θεμελιώθηκε στα τέλη του 19^{ου} αιώνα με τις εργασίες των James Clerk Maxwell, Ludwig Boltzmann και Josiah Willard Gibbs [1], [2]. Διακρίνεται σε δυο κυρίως κλάδους, έναν πιο θεμελιώδη, ο οποίος ενδιαφέρεται για τη γενική συμπεριφορά των θερμοδυναμικών συστημάτων, και ένα δεύτερο, ο οποίος χρησιμοποιεί τα αποτελέσματα του πρώτου σαν εργαλεία για τα τη μελέτη συγκεκριμένων φυσικών προβλημάτων.

Το ασύλληπτο πλήθος βαθμών ελευθερίας των θερμοδυναμικών συστημάτων καθιστά τις συνηθισμένες δυναμικές μεθόδους περιγραφής τους μέσω του 2^{ου} Νόμου του Newton ή της εξίσωσης του Schrödinger θεωρητικά ανώφελες, πρακτικά άχρηστες και τεχνικά ανεφάρμοστες. Εξαιτίας αυτού του προβλήματος η στατιστική φυσική περιγράφει τις καταστάσεις θερμοδυναμικής ισορροπίας ενός συστήματος, για τις οποίες όλες οι μακροσκοπικές θερμοδυναμικές μεταβλητές του έχουν τιμή ανεξάρτητη από το χρόνο, στηριζόμενη στα μαθηματικά εργαλεία της θεωρίας των πιθανοτήτων, στο στατιστικό ορισμό της εντροπίας και στο αξίωμα της εργοδικότητας. Σύμφωνα με το τελευταίο όταν ένα σύστημα παραμένει σε μια μακροκατάσταση (μακροσκοπική κατάσταση) ισορροπίας του για αρκετό χρόνο (θεωρητικά για άπειρο) θα περάσει από όλες τις δυνατές μικροκαταστάσεις (μικροσκοπικές καταστάσεις) μέσω των οποίων μπορεί να υλοποιηθεί και μάλιστα η χρονική μέση τιμή ενός οποιουδήποτε μεγέθους

θα ισούται με τη μέση τιμή αυτού ως προς την αντίστοιχη συλλογή των μικροκαταστάσεων (θερμική μέση τιμή).

Τρεις είναι οι περισσότερες χρησιμοποιούμενες στατιστικές συλλογές, η μικροκανονική, η κανονική και η μεγαλοκανονική [8]. Στην πρώτη το εξεταζόμενο σύστημα είναι ολότελα απομονωμένο από το περιβάλλον του, στη δεύτερη βρίσκεται σε θερμοδυναμική ισορροπία με δεξαμενή σταθερής θερμοκρασίας ενώ στην τρίτη με δεξαμενή σταθερής θερμοκρασίας και σταθερού χημικού δυναμικού μ (ή υπό σταθερή εξωτερική πίεση ή υπό σταθερό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο, ανάλογα με τη φύση του μελετώμενου συστήματος). Από αυτές μεγαλύτερο ενδιαφέρον για τα συστήματα που μελετάμε παρουσιάζει η κανονική συλλογή, για τούτο και θα αναφερθούμε σε αυτήν πιο εκτεταμένα. Έστω ένα σύστημα σε θερμοδυναμική ισορροπία με δεξαμενή σταθερής απόλυτης θερμοκρασίας T . Η μικροκατάστασή του υλοποιείται σε μικροσκοπικό επίπεδο από έναν αριθμό μικροκαταστάσεων, καθεμιά από τις οποίες έχει τη δική της ενέργεια. Αποδεικνύεται πως η πιθανότητα μιας τέτοιας μικροκατάστασης μ (κανονική πιθανότητα ή πιθανότητα κατά Gibbs) ενέργειας E_μ δίνεται από τη σχέση

$$p_\mu = \frac{1}{Z} \exp(-\beta E_\mu) \quad (1.19),$$

με

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \quad (1.20),$$

όπου k_B η σταθερά του Boltzmann. Η Z είναι η κανονική συνάρτηση επιμερισμού, η οποία προσδιορίζεται από τη συνθήκη κανονικοποίησης της κανονικής πιθανότητας

$$\sum_\mu p_\mu = 1 \quad (1.21),$$

είναι συνάρτηση της θερμοκρασίας T και αποδεικνύεται ίση με

$$Z = \sum_i \exp(-\beta E_i) \quad (1.22).$$

Ας δούμε πώς διαφοροποιούνται τα προαναφερθέντα σε ένα μαγνητικό σύστημα αποτελούμενο από N μικροσκοπικές μαγνητικές ροπές $\vec{s}_i$. Γενικά αυτό το σύστημα θα έχει μ διαφορετικές μικροκαταστάσεις, καθεμιά από τις οποίες θα αντιστοιχεί σε ενέργεια E_μ . Αν βρεθεί σε δεξαμενή σταθερής θερμοκρασίας T υπό την επίδραση εξωτερικού μαγνητικού πεδίου $\vec{H}$ τότε η κατάλληλη στατιστική συλλογή για την περιγραφή του θα είναι η μεγαλοκανονική [9], [10] και η σχέση (1.19) θα γραφτεί ως

$$p_\mu = \frac{1}{\Omega} \exp\left(-\beta E_\mu + \beta \vec{H} \cdot \sum_i \vec{s}_i\right) \quad (1.23).$$

Τώρα η Ω είναι η λεγόμενη μεγάλη συνάρτηση επιμερισμού, η οποία προσδιορίζεται επίσης από τον τύπο (1.21) και είναι συνάρτηση της τόσο της θερμοκρασίας T όσο και του μαγνητικού πεδίου $\vec{H}$, ενώ αποδεικνύεται ίση με

$$\Omega = \sum_i \exp \left(-\beta E_\mu + \beta \vec{H} \cdot \sum_i \vec{s}_i \right) \quad (1.24).$$

Εννοείται φυσικά ότι απουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου οι μαθηματικές εκφράσεις (1.19) και (1.23) ταυτίζονται, όπως και οι (1.22) και (1.24), Στην περίπτωση αυτή το σύστημα μας εξακολουθεί να περιγράφεται από τη μεγαλοκανονική συλλογή με $\vec{H} = 0$, ωστόσο έχει επικρατήσει καταχρηστικά να λέμε ότι μελετάται στην κανονική συλλογή [8].

Η στατιστική ερμηνεία της εσωτερικής ενέργειας (ανά δομικό λίθο) θα είναι

$$\frac{U}{N} = \frac{\langle E \rangle}{N} = \langle \epsilon \rangle = \frac{\langle E_\mu \rangle}{N} \quad (1.25),$$

ενώ η μέση συνολική μαγνητική ροπή (ανά δομικό λίθο),

$$\langle \vec{m} \rangle = \frac{\langle \vec{M} \rangle}{N} = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i \vec{s}_i \right\rangle \quad (1.26).$$

Στο σημείο αυτό πρέπει να παρατηρήσουμε ότι η μακροσκοπική μαγνήτιση που αναφέραμε στην προηγούμενη παράγραφο ερμηνεύεται μικροσκοπικά ως ο μέσος όρος της απόλυτης τιμής της συνολικής μαγνητικής ροπής (ανά δομικό λίθο), δηλαδή

$$\frac{M}{N} = \langle |\vec{m}| \rangle = \frac{\left\langle \left| \sum_i \vec{s}_i \right| \right\rangle}{N} \quad (1.27).$$

Εξαιρετικό ενδιαφέρον παρουσιάζουν επίσης η συνδεδεμένη συνάρτηση συσχέτισης δυο σημείων- μαγνητικών ροπών (two-point connected correlation function) και το μήκος συσχέτισης ξ . Η πρώτη είναι μια χωρική- ταυστική συνάρτηση που εξαρτάται μόνο από το διάνυσμα της μετατόπισης $\vec{r}_{ij}$ μεταξύ δυο σημείων i και j και δίνεται από τον τύπο [3]

$$\Gamma_c^{(2)}(\vec{r}_{ij}) = \langle \vec{s}_i \vec{s}_j \rangle - \langle \vec{s}_i \rangle \langle \vec{s}_j \rangle \quad (1.28).$$

Για συστήματα τα οποία παρουσιάζουν συμμετρία μετατόπισης δεν εξαρτάται από τα επιλεγμένα σημεία i και j ενώ για συστήματα τα οποία παρουσιάζουν και συμμετρία περιστροφής (π.χ. μαγνητικές ροπές τοποθετημένες στα σημεία ενός κρυσταλλικού πλέγματος) εξαρτάται μόνο από το μέτρο του διανύσματος $\vec{r}_{ij} = \vec{r}$.

Ας σημειωθεί ότι αν και για τα περισσότερα συστήματα η ακριβής αναλυτική έκφραση των συναρτήσεων συσχέτισης δεν έχει βρεθεί, οι συστηματικές προσεγγιστικές μελέτες μας έχουν εφοδιάσει με μερικά συμπεράσματα. Έτσι, εκτός από το κρίσιμο σημείο, αναμένουμε μια συμπεριφορά για μεγάλες τιμές του μέτρου διανύσματος $\vec{r}_{ij} = \vec{r}$ της μορφής

$$\Gamma_c^{(2)}(r) \sim r^\tau \exp\left(-\frac{r}{\xi}\right) \quad (1.29),$$

όπου $\tau \in \mathbb{R}$ και ξ το μήκος συσχέτισης (correlation length). Το τελευταίο είναι επίσης συνάρτηση της θερμοκρασίας T και του πεδίου H . Για τα συστήματα με τα οποία θα ασχοληθούμε είναι ανεξάρτητο από την κατεύθυνση του διανύσματος $\vec{r}_{ij} = \vec{r}$ και δίνεται από τη σχέση [4]

$$\xi^{-1} = -\lim_{r \rightarrow +\infty} \frac{\ln | \langle s_0 s_r \rangle - \langle s_0 \rangle \langle s_r \rangle |}{r} \quad (1.30).$$

Για ένα μαγνητικό σύστημα συνήθως καθορίζονται η θερμοκρασία T και το πεδίο H , οπότε συμφέρει η μελέτη του στα πλαίσια της μεγαλοκιανονικής συλλογής. Στην περίπτωση αυτή αποδεικνύονται από τις σχέσεις (1.3), (1.4), (1.7), (1.24), (1.27), (1.28) οι τύποι

$$G = -k_B T \ln \Omega \quad (1.31),$$

$$H = U - MH = - \left. \frac{\partial \ln \Omega}{\partial \beta} \right|_N \quad (1.32),$$

$$\Gamma_c^{(2)}(\vec{r}_{ij}) = \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2 \ln \Omega}{\partial H^2} \quad (1.33).$$

Από αυτούς και τις θερμοδυναμικές σχέσεις της §1.1 είναι προφανές πως αν γνωρίζουμε τη συνάρτηση επιμερισμού ενός συστήματος μπορούμε να πάρουμε πληροφορίες για όλα τα χαρακτηριστικά του μεγέθι. Το πρόβλημα είναι ότι η εύρεση αυτής είναι πολύ δύσκολη, αν όχι αδύνατη για τα περισσότερα μελετώμενα συστήματα.

Ακόμα ξεκινώντας από τις εξισώσεις (1.8), (1.10) μπορούμε να βρούμε τη στατιστική ερμηνεία συναρτήσεων απόκρισης του συστήματος, όπως της ισόθερμης μαγνητικής επιδεκτικότητας (ανά δομικό λίθο) και της θερμοχωρητικότητας (ανά δομικό λίθο) υπό σταθερό πεδίο H . Με κατάλληλες πράξεις, έχουμε [9], [10]

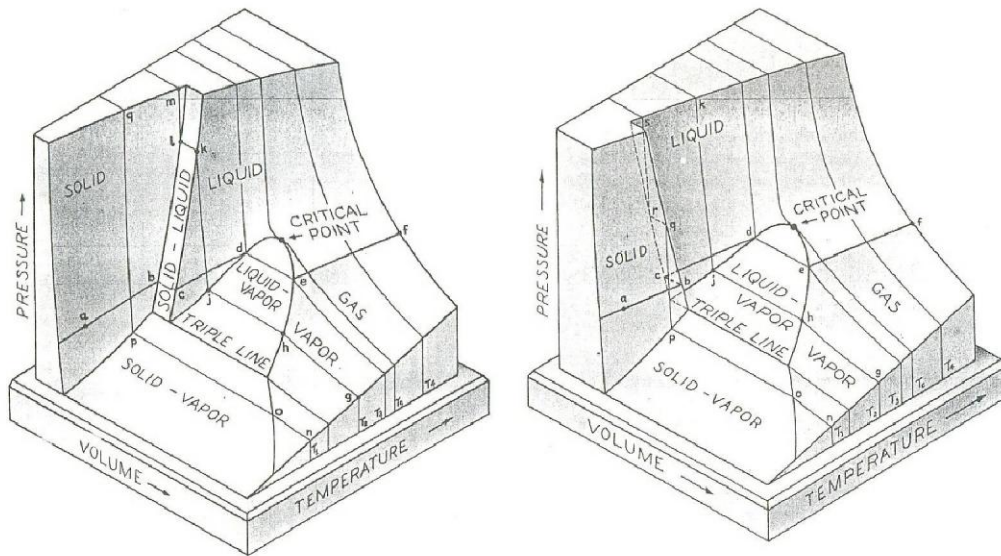
$$\frac{\chi_T}{N} = \beta N \left(\langle m^2 \rangle - \langle |m| \rangle^2 \right) = \beta N \sigma_{|m|}^2 \quad (1.34),$$

$$\frac{C_H}{N} = \beta^2 N k_B \left(\langle \varepsilon^2 \rangle - \langle \varepsilon \rangle^2 \right) = \beta^2 N k_B \sigma_\varepsilon^2 \quad (1.35).$$

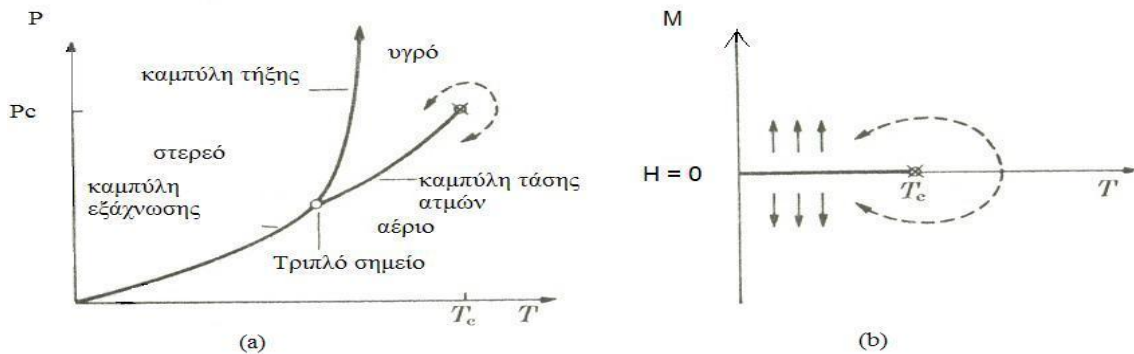
Οι τελευταίες σχέσεις δείχνουν ότι οι συναρτήσεις απόκρισης ενός συστήματος συνδέονται με τις διακυμάνσεις της εσωτερικής του ενέργειας σ_e ή της μακροσκοπικής του μαγνήτισης σ_m . Η (1.34) μάλιστα είναι γνωστή και σαν θεώρημα διακυμάνσεων- απωλειών (fluctuation- dissipation theorem).

1.3 Διάκριση των αλλαγών φάσης

Είναι γνωστό ότι η καταστατική εξίσωση ενός φυσικού συστήματος, η οποία θα είναι της μορφής (1.14) ή (1.15), μπορεί να παρασταθεί γραφικά σε κατάλληλο σύστημα αξόνων και το διάγραμμα που προκύπτει λέγεται φασικό διάγραμμα του αντίστοιχου συστήματος. Παρατηρώντας το διάγραμμα φάσεων ενός υγρού (εικόνες 1.1, 1.2a) ή ενός σιδηρομαγνητικού προτύπου (εικόνα 1.2b) είναι εύκολο να διαπιστώσουμε την ύπαρξη σημείων στα οποία η αντίστοιχη γραφική παράσταση διακόπτεται ή σχηματίζει γωνίες [6]. Η συμπεριφορά των συστημάτων σε αυτά χαρακτηρίζεται από απότομες αλλαγές των μακροσκοπικών ιδιοτήτων τους, για αυτό προσέλκυσε σχετικά νωρίς το ενδιαφέρον των μελετητών, οι οποίοι της έδωσαν το όνομα «αλλαγή φάσης»



Εικόνα 1.1: Διάγραμμα φάσεων (PVT) ουσίας που ο όγκος της μειώνεται (δεξιά) ή αυξάνει (αριστερά) κατά την τήξη.



Εικόνα 1.2: Το διάγραμμα φάσεων ενός ρευστού (a) και ενός σιδηρομαγνήτη (b).

Με βάση τις παραπάνω παρατηρήσεις ονομάζουμε αλλαγή φάσης το φαινόμενο που συμβαίνει όταν σε ορισμένες συνθήκες μια τουλάχιστον από τις παραγώγους ενός θερμοδυναμικού δυναμικού κάποιου συστήματος παρουσιάζει ιδιόμορφα σημεία στο θερμοδυναμικό όριο [3], όπου ο αριθμός N των δομικών του λίθων του συστήματος, άρα και οι βαθμοί ελευθερίας του, τείνει στο άπειρο ($N \rightarrow +\infty$, στην πράξη $N \sim N_A$, με $N_A = 6,023 \cdot 10^{23}$ ο αριθμός του Avogadro). Διαπιστώθηκε ότι η εμφάνισή της συνδέεται με την ανάγκη ελαχιστοποίησης του αντίστοιχου θερμοδυναμικού δυναμικού του συστήματος, σύμφωνα με το 2^ο Νόμο της Θερμοδυναμικής. Μικροσκοπικά οι αλλαγές φάσης συνδέονται με αλλαγές στη συμπεριφορά όλων μαζί των δομικών λίθων ενός συστήματος, για το λόγο αυτόν χαρακτηρίζονται σαν φαινόμενα συνεργασίας (cooperative phenomena).

Χαρακτηριστικά παραδείγματα αλλαγών φάσης είναι η μετατροπή των υγρών σε αέρια, των κοινών αγωγών σε υπεραγωγούς και των σιδηρομαγνητικών υλικών σε παραμαγνητικά. Τις περισσότερες φορές κατάλληλο θερμοδυναμικό δυναμικό για την περιγραφή του φαινομένου είναι η ελεύθερη ενέργεια κατά Gibbs, η οποία στα ρευστά δίνεται από τη σχέση

$$G = G(T, P) = U - TS + PV \quad (1.36),$$

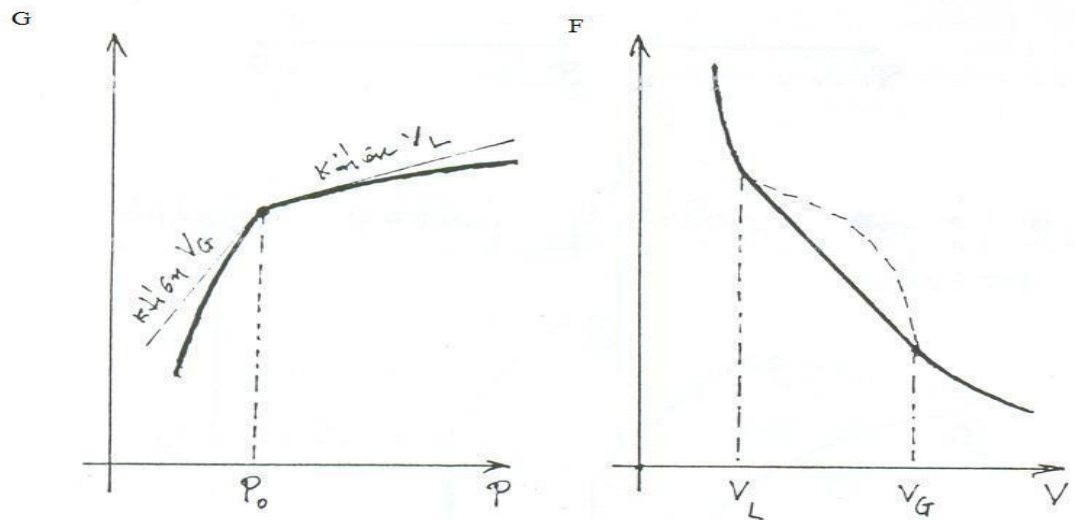
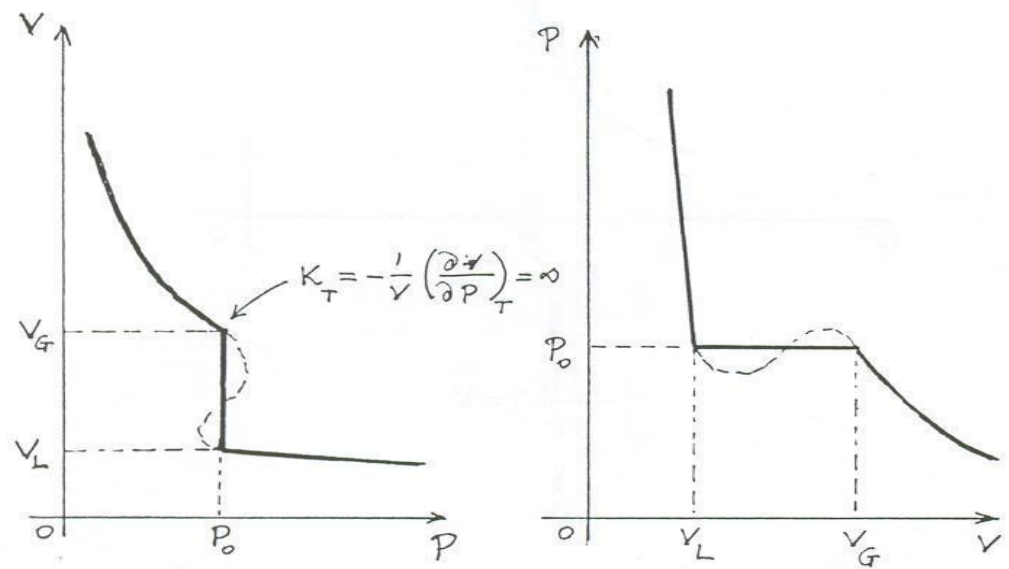
ενώ στα μαγνητικά συστήματα από τον τύπο (1.3).

Οι αλλαγές φάσης έχει διαπιστωθεί ότι παρουσιάζουν όχι μόνο ομοιότητες αλλά και αρκετές διαφορές. Η πρώτη προσπάθεια συστηματικής ταξινόμησής τους με βάση τις ασυνέχειες της πρώτης παραγώγου της ελεύθερης ενέργειας κατά Gibbs G έγινε από τον Ehrenfest το 19^ο αιώνα [3]. Σήμερα, υπό το πρίσμα νέων πειραματικών, υπολογιστικών και θεωρητικών δεδομένων [3], [6], οι περισσότεροι φυσικοί δέχονται την ταξινόμηση του M. E. Fisher [7], σύμφωνα με την οποία οι αλλαγές φάσης διακρίνονται σε πρώτης τάξης και ανώτερης τάξης ή συνεχείς ή κρίσιμες.

Αν μια τουλάχιστον από τις πρώτες παραγώγους ενός θερμοδυναμικού δυναμικού παρουσιάζει πεπερασμένη ασυνέχεια τότε η αλλαγή φάσης θα λέγεται πρώτου είδους. Κύριο μακροσκοπικό χαρακτηριστικό της είναι η συνύπαρξη δύο τουλάχιστον διαφορετικών φάσεων του ίδιου συστήματος, αφού μια θερμοδυναμική συνάρτηση παρουσιάζει περισσότερα από ένα ελάχιστα. Τέτοιου είδους αλλαγές φάσης για ένα ρευστό και για ένα σιδηρομαγνητικό μοντέλο ($T < T_c$) απεικονίζονται στα διαγράμματα των εικόνων 1.3 και 1.4.

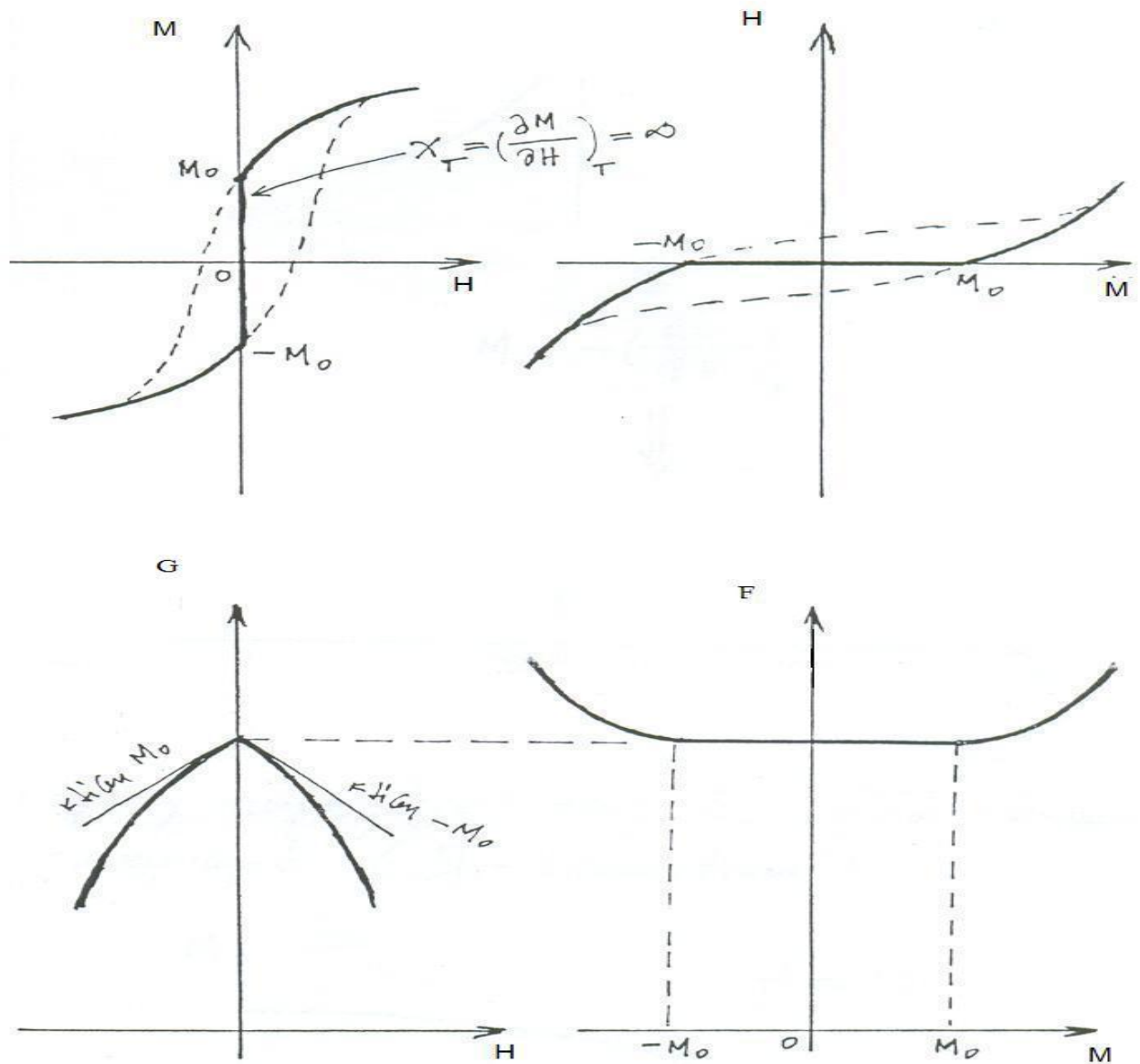
Αξίζει εδώ να αναφέρουμε ότι μια αλλαγή φάσης 1^{ου} είδους μπορεί να μην αρχίσει αμέσως μόλις φτάσουμε στο θεωρητικά προβλεπόμενο σημείο συνύπαρξης των αντίστοιχων φάσεων αλλά το σύστημα να παγιδευτεί σε μια μακροκατάσταση (μετασταθή κατάσταση) που αντιστοιχεί σε τοπικό ελάχιστο του αντίστοιχου θερμοδυναμικού δυναμικού στις δοσμένες συνθήκες. Χαρακτηριστικά παραδείγματα τέτοιων καταστάσεων αποτελούν το υπέρθερμο νερό ($T > 373 \text{ K}$) και οι υπερψυγμένοι ατμοί ($T < 373 \text{ K}$). Τέτοια φαινόμενα παρατηρούνται όταν προσεγγίζουμε την περιοχή αλλαγής φάσης με γρήγορες μεταβολές των κατάλληλων θερμοδυναμικών μεταβλητών [5].

Ρευστό



Εικόνα 1.3: Διαγράμματα $V = V(P)$, $P = P(V)$, $G = G(P)$, $F = F(V)$ για αλλαγή φάσης 1^{ου} είδους σε ρευστό.

$$T < T_c$$



Εικόνα 1.4: Διαγράμματα $M = M(H)$, $H = H(M)$, $G = G(H)$, $F = F(M)$ για αλλαγή φάσης 1^{ου} είδους σε σιδηρομαγνήτη.

Σε μετατροπές σαν αυτή του διαγράμματος 1.3 (λ.χ. μετατροπή αερίων σε υγρά ή υγρών σε στερεά), η αλλαγή φάσης 1^{ου} είδους συνοδεύεται από μεταβολή της εντροπίας ΔS , οπότε παρατηρείται έκλυση ή απορρόφηση θερμότητας υπό σταθερή θερμοκρασία (λανθάνουσα θερμότητα αλλαγής φάσης Q_L). Στην περίπτωση αυτή ξεκινώντας από δυο σημεία $A(P, T)$ και $B(P+dP, T+dT)$ της καμπύλης αλλαγής φάσης $P = f(T)$ και στηριζόμενοι στα όσα είπαμε πριν για τα αίτια της συνύπαρξης φάσεων μπορούμε να γράψουμε [5]

$$G_A(T, P) = G_B(T, P) \quad (1.37),$$

$$G_A(T+dT, P+dP) = G_B(T+dT, P+dP) \quad (1.38).$$

Αν τώρα θυμηθούμε την (1.36) και αναπτύξουμε σε σειρές Taylor καταλήγουμε με πράξεις στη θερμοδυναμική σχέση των Clausius- Clapeyron [5]

$$\frac{dP}{dT} = \frac{\Delta H}{\Delta VT} \quad (1.39).$$

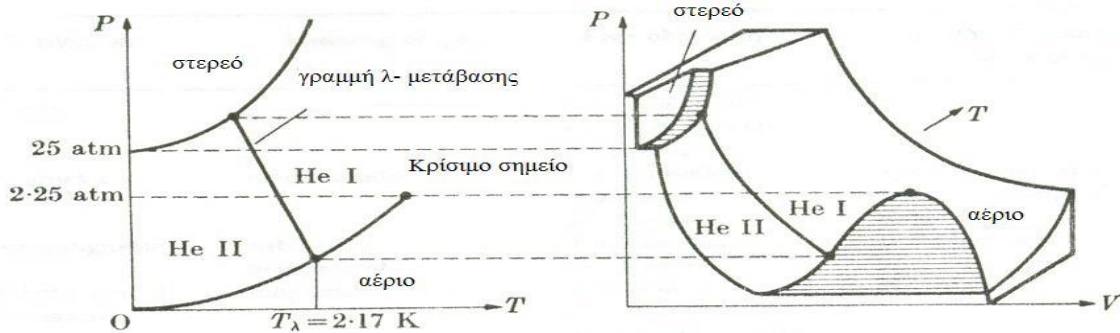
Τούτη εκφράζει την κλίση της καμπύλης αλλαγής φάσης $P = f(T)$ ενός ρευστού ή στερεού στην περιοχή της αλλαγής φάσης του σε συνάρτηση με τη μεταβολή της ενθαλπίας του ΔH (λανθάνουσα θερμότητα αλλαγής φάσης Q_L), τη θερμοκρασία του T και τη μεταβολή του όγκου του ΔV . Αντίθετα κατά τη μετατροπή σιδηρομαγνητών σε παραμαγνήτες, όπου παρατηρείται αλλαγή φάσης 1^{ου} είδους σε κάθε θερμοκρασία $T < T_c$ για $H = 0$, η εντροπία δε μεταβάλλεται λόγω της συμμετρίας του συστήματος και ο αντίστοιχος υπολογισμός δεν οδηγεί σε διαφορική εξίσωση της μορφής (1.39).

Αν όλες οι πρώτες παράγωγοι ενός θερμοδυναμικού δυναμικού είναι συνεχείς αλλά μια τουλάχιστον από τις δεύτερης (ή ανώτερης τάξης) παραγώγους του παρουσιάζει πεπερασμένη ασυνέχεια ή απειρισμό τότε η αλλαγή φάσης θα λέγεται ανώτερης τάξης ή συνεχής ή κρίσιμη. Τέτοιες αλλαγές φάσης χαρακτηρίζονται από απειρισμούς μεγεθών όπως η ισόθερμη μαγνητική επιδεκτικότητα χ_T , η θερμοχωρητικότητα υπό σταθερό πεδίο C_H και ο θερμικός συντελεστής της μακροσκοπικής μαγνήτισης α_H . Επίσης το μήκος συσχέτισης ξ απειρίζεται ενώ η συνάρτηση συσχέτισης φθίνει ακολουθώντας, όπως θα δούμε, νόμο αρνητικής δύναμης [6].

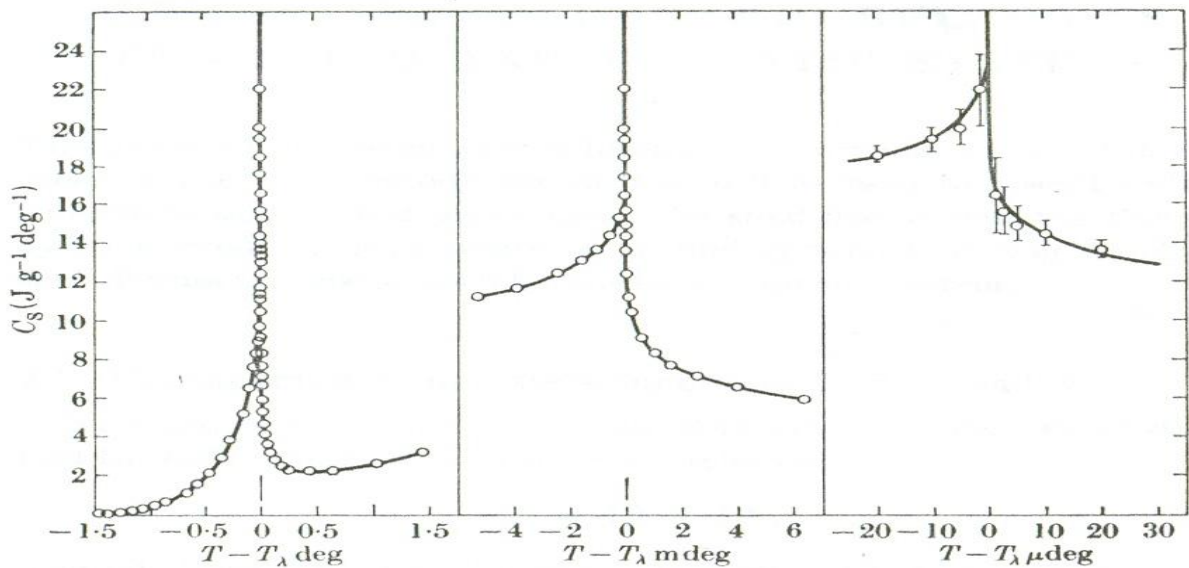
Σε πολλά φυσικά συστήματα (ρευστά, σιδηρομαγνήτες κ.τ.λ.), όπως οι μαγνήτες και τα ρευστά, μια καμπύλη αλλαγής φάσης πρώτου είδους τερματίζεται σε ένα κρίσιμο σημείο, οπότε μπορούμε να «κινηθούμε γύρω» από το τελευταίο με εντελώς συνεχή τρόπο, αφού οι διαφορές των δυο φάσεων πέρα από αυτό πρακτικά εξαφανίζονται. Σε ορισμένα άλλα πάλι μπορούμε να συναντήσουμε γραμμές συνεχών αλλαγών φάσης, κατά μήκος των οποίων συναντάμε διάφορες κρίσιμες συμπεριφορές, όπως στην περίπτωση του υγρού ηλίου ${}^4_2\text{He}$ (βλέπε εικόνα 1.5- [3]) ή του προτύπου Ising με spin-1 [6].

Στο υγρό ήλιο ${}^4_2\text{He}$ η γραμμή των κρίσιμων σημείων τερματίζεται σε ένα σημείο (P_c, T_c) της καμπύλης της τάσης ατμών το οποίο ονομάζεται λ-σημείο γιατί εκεί παρατηρείται μια συνεχής αλλαγή φάσης που λέγεται λ- μετάβαση (λ- transition). Σε αυτήν η θερμοχωρητικότητα του

συστήματος C_P υπό σταθερή πίεση κορεσμένων ατμών του ${}^4_2\text{He}$ απειριζείται λογαριθμικά, με συνέπεια το αντίστοιχο διάγραμμα να μοιάζει με το ελληνικό γράμμα λ (βλέπε εικόνα 1.6- [3]).



Εικόνα 1.5: Φασικά διαγράμματα PT και PVT για το ${}^4_2\text{He}$.



Εικόνα 1.6: Διάγραμμα θερμοχωρητικότητας C_S για τη λ-μετάβαση.

Για την πλήρη ποσοτική περιγραφή των αλλαγών φάσης χρειάζεται επιπλέον να προσδιορίσουμε μια νέα ποσότητα, την παράμετρο τάξης [11]. Αυτή ορίζεται ως το χαρακτηριστικό εκείνο φυσικό μέγεθος του οποίου η θερμική μέση τιμή μεταβάλλεται δραματικά κατά τη διάρκεια της αλλαγής φάσης. Έχει επικρατήσει μάλιστα να επιλέγεται έτσι ώστε η μέση της τιμή να μηδενίζεται σε θερμοκρασίες μεγαλύτερες από αυτήν της αλλαγής φάσης αλλά να είναι διαφορετική από το μηδέν για θερμοκρασίες μικρότερες από αυτήν. Στην παρούσα εργασία αν δε γνωρίζουμε κάτι άλλο για αυτή θα τη συμβολίζουμε με **A**.

Σύμφωνα με τα παραπάνω η παράμετρος τάξης πρέπει να είναι συνάρτηση τόσο της θέσης όσο και του χρόνου [3]. Στις περισσότερες περιπτώσεις όμως ενδιαφερόμαστε μόνο για τη

θερμική μέση τιμή της $\langle A \rangle$. Μέσω της τελευταίας ορίζουμε στη συνέχεια άλλα απαραίτητα μεγέθη για την περιγραφή των αλλαγών φάσεων, όπως τους κρίσιμους εκθέτες. Ανάλογα με το φυσικό σύστημα μπορεί να είναι πραγματικός ή μιγαδικός αριθμός, μονόμετρο, διανυσματικό ή ακόμα και τανυστικό φυσικό μέγεθος. Η θερμοδυναμική όμως δεν μπορεί να μας πει τίποτα για αυτό, εκτός ίσως από το ότι θα πρέπει να ανήκει στις «πυκνότητες», αφού εξαρτάται από τα μικροσκοπικά χαρακτηριστικά κάθε συστήματος. Ο προσδιορισμός της δεν είναι μια διαδικασία τετριμμένη, απαιτεί αρκετή προσπάθεια, γνώση και κατανόηση τόσο των μικροσκοπικών ιδιοτήτων όσο και της συμπεριφοράς του τελευταίου.

Για ορισμένα φυσικά συστήματα η παράμετρος τάξης είναι γνωστή, όπως φαίνεται στον πίνακα 1.1 [6]. Πρόκειται κυρίως για παραμέτρους τάξης ρευστών, μαγνητικών συστημάτων και υπεραγωγών, μια και τέτοιου είδους μοντέλα έχουν εκτενέστερα μελετηθεί προκειμένου να διασαφηνιστεί περισσότερο η σπουδαία αυτή έννοια.

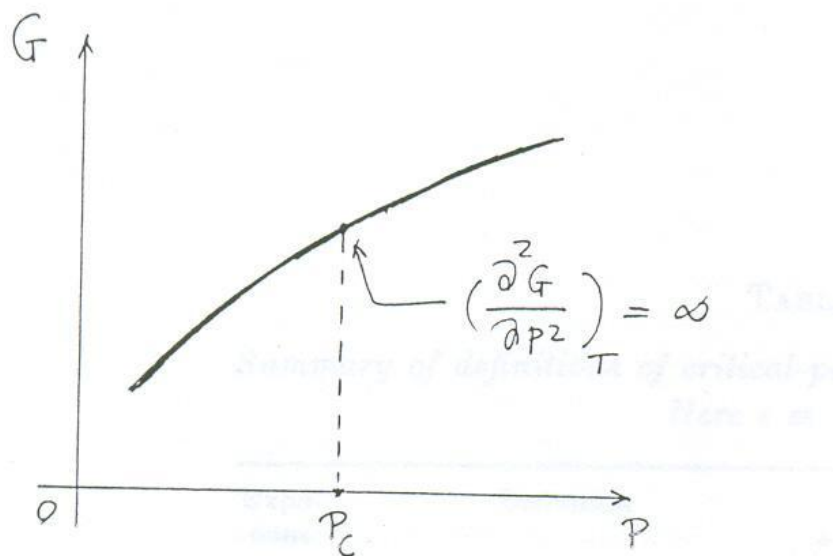
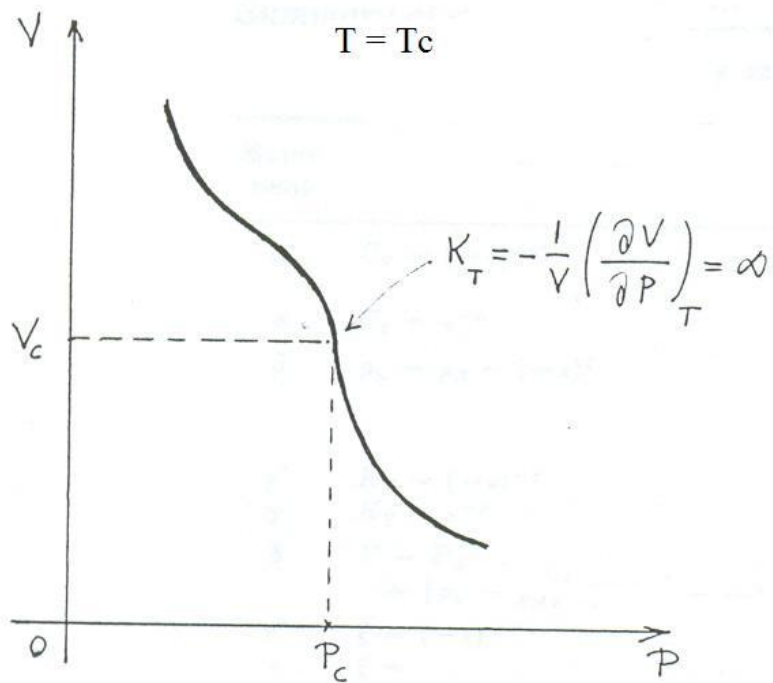
Πίνακας 1.1: Παράμετροι τάξης ορισμένων αλλαγών φάσης.

Αλλαγή φάσης	Παράμετρος τάξης	Είδος παραμέτρου τάξης
Βρασμός- υγροποίηση, τήξη- πήξη	Πυκνότητα	Μονόμετρο μέγεθος
Δομικές αλλαγές φάσης	Συγκέντρωση δομικών λίθων σε κατάλληλο κρυσταλλικό πλέγμα	Μονόμετρο μέγεθος
Σιδηρομαγνητισμός- παραμαγνητισμός	Συνολική μαγνητική ροπή όλου του συστήματος	Τρισεδιάστατο διάνυσμα
Αντισιδηρομαγνητισμός (ή σιδηριμαγνητισμός)-παραμαγνητισμός	Συνολική μαγνητική ροπή κατάλληλου υποσυστήματος	Τρισεδιάστατο διάνυσμα
Σιδηροηλεκτρισμός	Συνολική ηλεκτρική διπολική ροπή όλου του συστήματος	Τρισεδιάστατο διάνυσμα
Κανονικός αγωγός- υπεραγωγός	Κυματοσυνάρτηση ζευγών Cooper	Μιγαδικός αριθμός
Κανονικό ρευστό- υπερρευστό	Κυματοσυνάρτηση δομικών λίθων του υπερρευστού	Μιγαδικός αριθμός

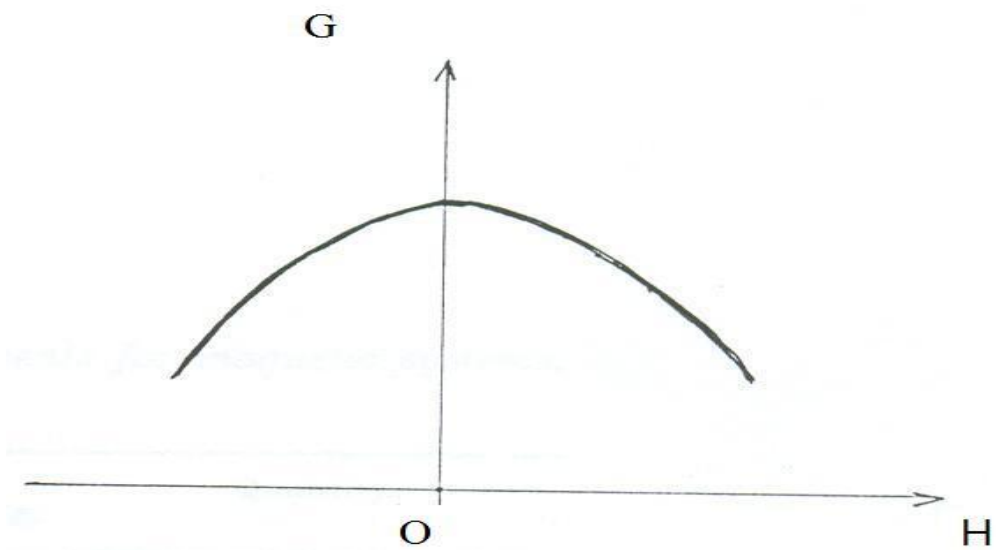
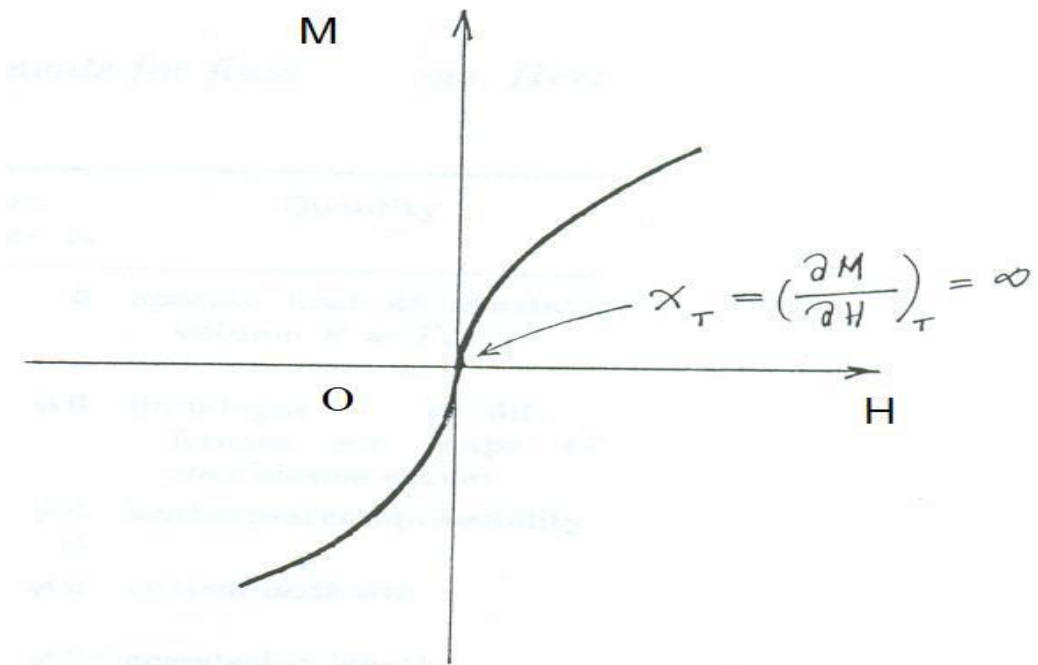
1.4 Κρίσιμα φαινόμενα

Τα κύρια μικροσκοπικά χαρακτηριστικά ενός κρίσιμου φαινομένου σε ένα οποιοδήποτε σύστημα είναι οι απειρισμοί στο σημείο αλλαγής φάσης (κρίσιμο σημείο, σε μαγνητικά συστήματα $(H, T) = (H_c, T_c)$ μεγεθών όπως η ισόθερμη μαγνητική επιδεικτικότητα χ_T , η θερμοχωρητικότητα υπό σταθερό πεδίο C_H και ο θερμικός συντελεστής της μακροσκοπικής μαγνήτισης A_H . Αυτά φαίνονται καθαρά στα διαγράμματα των εικόνων 1.7, 1.8 για ρευστό και για μοντέλο σιδηρομαγνήτη αντίστοιχα. Αν θυμηθούμε τις σχέσεις ανάμεσα στις συναρτήσεις απόκρισης και στις διακυμάνσεις των αντίστοιχων μικροσκοπικών μεγεθών που διατυπώθηκαν στην §1.2 εύκολα καταλαβαίνουμε γιατί η κρίσιμη συμπεριφορά προσδιορίζεται από «μεγάλης εμβέλειας αλλά ασθενείς διακυμάνσεις (κρίσιμες διακυμάνσεις) που κάνουν αισθητή την παρουσία τους σε όλες τις κλίμακες μήκους» [12]. Σε συστήματα ρευστών οι διακυμάνσεις αυτές επηρεάζουν μακροσκοπικές οπτικές ιδιότητες, όπως ο δείκτης διάθλασης, με αποτέλεσμα το ρευστό να λάμπει έντονα στο κρίσιμο σημείο αν φωτοβοληθεί, εμφανίζοντας παράλληλα ασθενή ιριδισμό. Το

εντυπωσιακό αυτό οπτικό φαινόμενο λέγεται critical opalescence [3] και το αποδίδουμε στα ελληνικά με τον όρο «κρίσιμος ιριδισμός».



Εικόνα 1.7: Διαγράμματα $V = V(P)$, $G = G(P)$ για συνεχή αλλαγή φάσης σε ρευστό.



Εικόνα 1.8: Διαγράμματα $M = M(H)$, $G = G(H)$ για συνεχή αλλαγή φάσης σε σιδηρομαγνήτη.

Σε υψηλές θερμοκρασίες ($T > T_c$) οι δομικοί λίθοι του συστήματος (στα μαγνητικά συστήματα οι μαγνητικές ροπές) συμπεριφέρονται σαν ανεξάρτητοι (σε μαγνητικό σύστημα έχουμε παραμαγνητισμό), ενώ στο κρίσιμο σημείο η συμπεριφορά του συστήματος δε θυμίζει σε τίποτε το σύστημα των ανεξάρτητων σωματιδίων, η καμπύλωση της κρίσιμης ισόθερμης $H = H(M, T)$ είναι πλήρης και η ισόθερμη επιδεικτικότητα (ή κάποιο άλλο αντίστοιχο μέγεθος) είναι άπειρη [6].

Κάτω από την κρίσιμη θερμοκρασία ($T < T_c$) παρουσιάζεται «τάξη» στα φυσικά συστήματα (στα μαγνητικά συστήματα σιδηρομαγνητική, αντισιδηρομαγνητική, σιδηριμαγνητική κ. λ. π. συμπεριφορά), αφού πλέον οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των δομικών λίθων είναι αρκούντως ισχυρές ώστε αυτοί να μη συμπεριφέρονται σαν πρακτικά ανεξάρτητα σωματίδια. Μακροσκοπικά η εμφάνιση τάξης εκδηλώνεται με το λεγόμενο «αυθόρμητο σπάσιμο» της συμμετρίας του συστήματος. Με άλλα λόγια το σύστημα επιλέγει να παραμένει για πολύ περισσότερο χρόνο στις ενεργειακές μικροκαταστάσεις που αντιστοιχούν σε ορισμένη μέση τιμή ενός μικροσκοπικού φυσικού μεγέθους που λέγεται παράμετρος τάξης **A**. Φυσικά αν μπορούσαμε να εξετάσουμε τη συμπεριφορά του για άπειρο χρόνο αυτή η προτίμηση θα εξαφανιζόταν και το σύστημα θα περνούσε από όλες τις προβλεπόμενες μικροκαταστάσεις σύμφωνα με την εργοδική υπόθεση και τους άλλους νόμους της στατιστικής φυσικής (κρυμμένη συμμετρία). Πρέπει εδώ να παρατηρήσουμε ότι οι καταστάσεις «σπασμένης» συμμετρίας ενός συστήματος δεν είναι μετασταθείς γιατί αντιστοιχούν όλες στο ίδιο ολικό ελάχιστο του αντίστοιχου θερμοδυναμικού δυναμικού στις δοσμένες συνθήκες και όχι σε τοπικά ελάχιστα αυτού [12].

Οι δομικοί λίθοι του συστήματος στην κρίσιμη θερμοκρασία ομαδοποιούνται σε πλειάδες μεγέθους της τάξης του μήκους συσχέτισης ξ . Το μήκος συσχέτισης αποκλίνει καθώς η θερμοκρασία πλησιάζει την T_c ενώ η συνάρτηση συσχέτισης φθίνει στο κρίσιμο σημείο ακολουθώντας νόμο αρνητικής δύναμης [12]. Η λέξη πλειάδα αποτελεί μια απόδοση στα ελληνικά του αγγλικού όρου cluster, η οποία προτάθηκε από τους Λυκουργιώτη και Κορδούλη [13], [14], χωρίς όμως να έχει γίνει πλήρως αποδεκτή. Η έννοια θα εξηγηθεί λεπτομερώς στο κεφάλαιο 4. Προς το παρόν κρίνουμε σκόπιμο να δώσουμε μια εικόνα των διακυμάνσεων του συστήματος [12] που τονίζει τη φυσική σημασία του μήκους συσχέτισης ξ . Υποθέτουμε ότι το εξεταζόμενο σύστημα βρίσκεται σε χαμηλή θερμοκρασία ($T < T_c$) και έχει επιλέξει μια από τις ενεργειακά ισοδύναμες θεμελιώδεις καταστάσεις του, την οποία θα αποκαλούμε στο εξής «πάνω» φάση. Μέσα σε μια μακροσκοπική περιοχή του συστήματος είναι δυνατό να εμφανιστεί μια σταγόνα από κάποια από τις άλλες ενεργειακά ισοδύναμες καταστάσεις, έστω από την «κάτω» φάση, σαν αποτέλεσμα μιας διακύμανσης του συστήματος. Η σταγόνα αυτή έχει «λάθος» τιμή της παραμέτρου τάξης. Γνωρίζουμε ότι οι δυο φάσεις είναι ενεργειακά ισοδύναμες, οπότε η ανά μονάδα όγκου ελεύθερη ενέργεια είναι η ίδια τόσο μέσα στη σταγόνα όσο και στην υπόλοιπη περιοχή.

Ασφαλώς η διαχωριστική επιφάνεια παίζει το ρόλο της συνεισφέροντας μια επιπλέον ελεύθερη ενέργεια στο σύστημα. Πράγματι, η αλληλεπίδραση ανταλλαγής λ.χ. μεταξύ δυο γειτονικών αντιπαράλληλων μαγνητικών ροπών ($+J$) που περιβάλλουν τη διαχωριστική επιφάνεια είναι μεγαλύτερη της αλληλεπίδρασης μεταξύ παράλληλων ροπών ($-J$). Καθώς λοιπόν οι σχετικές πιθανότητες διαφοροποιούνται στη διαχωριστική επιφάνεια θα προκύψει μια επιπλέον δαπάνη ελεύθερης ενέργειας για το σύστημα. Η επιπλέον αυτή ενέργεια f_d για τη δημιουργία της σταγόνας θα είναι ανάλογη της επιφάνειάς της S_d και της ανά μονάδα επιφάνειας ενέργειας σχηματισμού της επιφάνειας ϵ_d , θα είναι δηλαδή [12]

$$f_d \sim S_d \epsilon_d \quad (1.40).$$

Αν η f_d είναι πολύ μεγαλύτερης τάξης από τη θερμική ενέργεια $k_B T$ η σταγόνα θα έχει πρακτικά μηδενική πιθανότητα να δημιουργηθεί μέσα στο υλικό. Στην αντίθετη περίπτωση η πιθανότητα δημιουργίας μιας σταγόνας είναι μη αγνοήσιμη αλλά το εμβαδόν της επιφάνειάς της θα περιορίζεται πρακτικά από τη σχέση

$$S_d \leq \frac{\epsilon_d}{k_B T} \quad (1.41).$$

Σε χαμηλές θερμοκρασίες η σχέση (1.41) περιορίζει το μέγεθος της σταγόνας, καθώς η ενέργεια σχηματισμού ϵ_d έχει μια αρκετά μεγάλη τιμή. Κοντά στο κρίσιμο σημείο η διαφορά μεταξύ των δυο φάσεων εξαφανίζεται και η επιφανειακή ενέργεια ϵ_d τείνει στο μηδέν, οπότε το μέγεθος της σταγόνας κυμαίνεται χωρίς περιορισμούς. Το μέγιστο χαρακτηριστικό μήκος της «σταγόνας διακυμάνσης» που επιτρέπει η περιοριστική σχέση (1.41) παίζει εδώ το ρόλο του μήκους συσχέτισης ξ . Στο σύστημα θα εμφανιστούν σταγόνες κάθε μεγέθους, μέχρι ενός ορισμένου μεγέθους ξ . Στο κρίσιμο σημείο εμφανίζονται σε όλες τις κλίμακες σταγόνες με δομή «όμοια» με τη δομή του μακροσκοπικού συστήματος. Μέσα σε μια «πάνω» σταγόνα συναντάμε μια «κάτω» σταγόνα και η δομή συνεχίζεται δίνοντάς μας ένα σχήμα που επεκτείνεται σε κάθε κλίμακα (μορφοκλασματικότητα ή αλλιώς fractal δομή). Η εικόνα αυτή αποτελεί ίσως το απαύγασμα της κατανόησής μας για την κρίσιμη συμπεριφορά [12].

Με σκοπό να κάνουμε τα προαναφερθέντα σαφέστερα ας εξετάσουμε λεπτομερέστερα την παράμετρο τάξης ορισμένων πολύ συνηθισμένων φυσικών συστημάτων σε κρίσιμη κατάσταση, των ρευστών και των σιδηρομαγνητών [3], [11].

- Καθώς το ρευστό προσεγγίζει το κρίσιμο σημείο του από χαμηλότερες θερμοκρασίες οι πυκνότητες της υγρής και της αέριας φάσης ρ_L και ρ_G τείνουν να εξισωθούν. Επομένως μια κατάλληλη παράμετρος τάξης για το σύστημα θα είναι η διαφορά

$$A = \rho_L(\vec{r}) - \rho_G(\vec{r}) \quad (1.42).$$

Η παράμετρος είναι μια ποσότητα με χωρικές διακυμάνσεις, και όχι μια θερμική μέση τιμή. Η αντίστοιχη μέση τιμή της θα πρέπει να θεωρείται για έναν όγκο πολύ μικρότερο από τον όγκο του δοχείου αλλά αρκετά μεγάλο ώστε να περιέχει αριθμό δομικών λίθων του ρευστού της τάξης του αριθμού του Avogadro. Παρατηρούμε ακόμα πως η παράμετρος τάξης είναι ένα βαθμωτό πεδίο, όχι μια απλή αριθμητική ποσότητα. Συχνά, ιδίως σε πειραματικές μελέτες, ενδιαφερόμαστε μόνο για τη θερμική μέση τιμή της παραμέτρου τάξης, η οποία στην περίπτωσή μας αντιστοιχεί στη διαφορά των μέσων πυκνοτήτων της υγρής από την αέρια φάση $\langle \rho_L \rangle - \langle \rho_G \rangle$.

- Στα σιδηρομαγνητικά συστήματα όταν $H = 0$ παρουσιάζεται αυθόρμητη μακροσκοπική μαγνήτιση M στο σύστημα για θερμοκρασίες χαμηλότερες της κρίσιμης, αφού αυτό προτιμά να επιλέγει καταστάσεις που αντιστοιχούν μόνο σε μια από τις δυο τιμές της αυθόρμητης μαγνήτισης. Μια κατάλληλη επιλογή της παραμέτρου τάξης για το σύστημα

αυτό είναι η απόλυτη τιμή της συνολικής μαγνητικής ροπής (ανά δομικό λίθο), η οποία δίνεται από τον τύπο.

$$A = |\vec{m}(\vec{r})| = \frac{1}{N} \left| \sum_i \vec{s}_i \right| \quad (1.43),$$

ενώ η μέση τιμή της από τη σχέση (1.27). Παρατηρούμε πως και εδώ η παράμετρος τάξης είναι ένα βαθμωτό πεδίο, όχι μια απλή παράμετρος, ενώ η μέση τιμή της ισούται με τη μακροσκοπική αυθόρμητη μαγνήτιση $\mathbf{M}$ του συστήματος. Φυσικά, όπως και στις αλλαγές φάσης υγρού-αερίου, έχει επικρατήσει να ενδιαφερόμαστε συχνά μόνο για τη θερμική μέση τιμή της παραμέτρου τάξης, η οποία εδώ ισούται με την αυθόρμητη μαγνήτιση $\mathbf{M}$ του συστήματος.

Ερχόμαστε τώρα σε πιο ποσοτικά θέματα. Για να περιγράψουμε την απόκλιση μιας συνάρτησης $f(x)$ καθώς προσεγγίζει ένα μη αναλυτικό σημείο $x = x_c$ (ιδιόμορφο σημείο, όπως είναι το κρίσιμο σημείο) εισάγουμε εκθέτες λ της γενικής μορφής [3]

$$f(x) \sim (\Delta x)^\lambda \quad (1.44),$$

με $\Delta x = |x - x_c| > 0$. Η τελευταία συντομογραφία δηλώνει απλώς την ύπαρξη του ορίου

$$\lambda = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\ln f(x)}{\ln \Delta x} \quad (1.45),$$

μέσω του οποίου ορίζεται ο εκθέτης λ , δηλαδή ότι η συνάρτηση $f(x)$ είναι ασυμπτωτικά ανάλογη του $(\Delta x)^\lambda$ και όχι πάντοτε ανάλογη του τελευταίου. Οι συνηθέστερες περιπτώσεις αυτής της ασυμπτωτικής συμπεριφοράς είναι οι παρακάτω [15]:

1. απλός νόμος δύναμης, δηλαδή

$$f(x) = f_0(\Delta x)^\lambda \quad (1.46),$$

όπου f_0 μια σταθερά. Αντιστοιχεί σε πόλο πρώτης τάξης (απλό πόλο) της συνάρτησης f .

2. η σχετικά απλή περίπτωση

$$f(x) = (\Delta x)^\lambda f_0(x) \quad (1.47),$$

όπου η $f_0(x)$ είναι αναλυτική συνάρτηση του x σε περιοχή του σημείου x_c . Αντιστοιχεί σε πόλο ανώτερης τάξης της συνάρτησης f .

3. η συνθετότερη περίπτωση,

$$f(x) = (\Delta x)^\lambda f_0(x) \quad (1.48),$$

όπου η $f_0(x)$ μη αναλυτική συνάρτηση του x για $x = x_c$. Πρόκειται για πιο πολύπλοκες και γενικά πιο δύσχρηστες ιδιομορφίες (ουσιώδεις ανωμαλίες). Εδώ διακρίνουμε δυο ενδιαφέρουσες υποπεριπτώσεις, τις

- συμπίπτουσες ασθενείς ιδιομορφίες

$$\lim_{x \rightarrow x_c} |\ln f_0(x)| = |\ln f_o| \in \Re \quad (1.49).$$

- αποκλίνουσες συμπίπτουσες ιδιομορφίες

$$\lim_{x \rightarrow x_c} |\ln f_0(x)| = +\infty \quad (1.50).$$

Από αυτές συνηθέστερη και σπουδαιότερη στη μελέτη των κρίσιμων φαινομένων είναι η λογαριθμική ανωμαλία, κατά την οποία ισχύει

$$f(x) = \ln|\Delta x| \quad (1.51).$$

Αν θυμηθούμε τα σχετικά θεωρήματα από τα όρια και τον κανόνα de l'Hospital έχουμε ότι ο αντίστοιχος εκθέτης λ στην περίπτωση αυτή είναι

$$\lambda = \lim_{x \rightarrow x_c} \frac{\ln |f(x)|}{\ln |\Delta x|} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\ln |\ln |\Delta x||}{\ln |\Delta x|} = \lim_{y \rightarrow \pm\infty} \frac{\ln |y|}{y} = 0 \quad (1.52).$$

Έτσι λοιπόν για τη μελέτη της συμπεριφοράς των διάφορων μεταβλητών ενός συστήματος στην κρίσιμη περιοχή εισάγουμε εκθέτες της παραπάνω μορφής που τους λέμε κρίσιμους εκθέτες. Πριν εξετάσουμε τους σπουδαιότερους, ορίζουμε για να διευκολυνθούμε μια αδιάστατη παράμετρο

$$t = \frac{T - T_c}{T_c} \quad (1.53),$$

η οποία ονομάζεται ανηγμένη θερμοκρασία (reduced temperature) και δείχνει πόσο μακριά από την κρίσιμη θερμοκρασία T_c είμαστε. Παρατηρούμε ότι όταν $t = 0$ τότε $T = T_c$.

Λαμβάνοντας υπόψη τα προαναφερθέντα ορίζουμε τους παρακάτω κρίσιμους εκθέτες στα μαγνητικά συστήματα [3], [16]:

1. τον εκθέτη α της ειδικής θερμότητας, ο οποίος περιγράφει την απόκλιση της ειδικής θερμότητας υπό σταθερό εξωτερικό πεδίο H κοντά στο κρίσιμο σημείο, δηλαδή

$$C_H \sim |t|^{-\alpha} \quad (1.54).$$

2. τον εκθέτη β της παραμέτρου τάξης, ο οποίος περιγράφει τη συμπεριφορά της παραμέτρου τάξης $\mathbf{A}$ κοντά στο κρίσιμο σημείο (και μάλιστα για $T < T_c$ αφού εξ ορισμού ισχύει $\mathbf{A} = 0$ για $T \geq T_c$), δηλαδή

$$\mathbf{A} \sim |\mathbf{t}|^\beta \quad (1.55).$$

3. τον εκθέτη γ της ισόθερμης μαγνητικής επιδεικνυκότητας, ο οποίος περιγράφει την απόκλιση της ισόθερμης μαγνητικής επιδεικνυκότητας χ_T κοντά στο κρίσιμο σημείο, δηλαδή

$$\chi_T \sim |\mathbf{t}|^{-\gamma} \quad (1.56).$$

4. τον εκθέτη δ της κρίσιμης ισόθερμου, ο οποίος περιγράφει την καμπύλωση της κρίσιμης ισόθερμου $\mathbf{H} = \mathbf{H}(\mathbf{M}, T_c)$ στο κρίσιμο σημείο (sgn: συνάρτηση που δίνει το πρόσημο μιας ποσότητας), δηλαδή

$$\mathbf{H} \sim |\mathbf{M}|^\delta \text{sgn}(\mathbf{M}) \quad (1.57).$$

5. τον εκθέτη η της συνδεδεμένης συνάρτησης συσχέτισης δυο σημείων, ο οποίος περιγράφει πως φθίνει η συνδεδεμένη συνάρτηση συσχέτισης δυο σημείων $\Gamma_c^{(2)}(\mathbf{r})$ ενός συστήματος διάστασης d στο κρίσιμο σημείο, δηλαδή

$$\Gamma_c^{(2)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r^{(d-2+\eta)}} \quad (1.58)$$

6. τον εκθέτη του μήκους συσχέτισης ν , ο οποίος περιγράφει την απόκλιση του μήκους συσχέτισης ξ κοντά στο κρίσιμο σημείο, δηλαδή

$$\xi \sim |\mathbf{t}|^{-\nu} \quad (1.59).$$

7. τον εκθέτη χάσματος Δ_i , ο οποίος περιγράφει την απόκλιση του λόγου $\frac{\frac{\partial^{(\ell)} \mathbf{G}}{\partial \mathbf{H}^\ell} \Big|_{\mathbf{T}}}{\frac{\partial^{(\ell-1)} \mathbf{G}}{\partial \mathbf{H}^{\ell-1}} \Big|_{\mathbf{T}}}$, όπου

$\mathbf{G}$ η ελεύθερη ενέργεια κατά Gibbs, κοντά στο κρίσιμο σημείο, δηλαδή

$$\frac{\frac{\partial^{(\ell)} \mathbf{G}}{\partial \mathbf{H}^\ell} \Big|_{\mathbf{T}}}{\frac{\partial^{(\ell-1)} \mathbf{G}}{\partial \mathbf{H}^{\ell-1}} \Big|_{\mathbf{T}}} \sim |\mathbf{t}|^{\Delta_i} \quad (1.60).$$

8. τον εκθέτη χάσματος $\Delta_{2\ell}$, ο οποίος περιγράφει την απόκλιση του λόγου $\frac{\frac{\partial^{(\ell-2)}G}{\partial H^\ell}}{\frac{\partial^{(2\ell-2)}G}{\partial H^{2\ell-2}}}\bigg|_T$, όπου

G η ελεύθερη ενέργεια κατά Gibbs, κοντά στο κρίσιμο σημείο, δηλαδή

$$\frac{\frac{\partial^{(2\ell)}G}{\partial H^{2\ell}}\bigg|_T}{\frac{\partial^{(2\ell-2)}G}{\partial H^{2\ell-2}}\bigg|_T} \sim |t|^{\Delta_\ell} \quad (1.61).$$

Στους παραπάνω τύπους η χρήση της απόλυτης τιμής $|t|$ επιτρέπει η ίδια μαθηματική έκφραση να χρησιμοποιείται τόσο για θερμοκρασίες μεγαλύτερες όσο και μικρότερες της T_c . Όμως η παραπάνω σύμβαση στις σχέσεις (1.54)- (1.61) δεν αποκλείει κατ' αρχήν να έχουμε διαφορετικές τιμές των κρίσιμων εκθετών και των αντίστοιχων πολλαπλασιαστικών συντελεστών για $T < T_c$ και $T > T_c$. Έτσι, για θερμοκρασίες χαμηλότερες της κρίσιμης ($T < T_c$) έχει επικρατήσει οι κρίσιμοι εκθέτες να συμβολίζονται με τονούμενα γράμματα (α' , γ' , ν' κ. κλπ) ενώ για υψηλότερες της κρίσιμης με άτονα (α , γ , ν κ. κλπ.). Ας σημειωθεί εδώ ότι δεν έχει νόημα να ορίσουμε κρίσιμο εκθέτη β για θερμοκρασίες υψηλότερες από την κρίσιμη αφού εκεί η παράμετρος τάξης του συστήματος είναι εξ ορισμού μηδέν. Επίσης, αντίστοιχους κρίσιμους εκθέτες μπορούμε να ορίσουμε και για οποιοδήποτε άλλο σύστημα το οποίο προσεγγίζει το κρίσιμο σημείο. Στην περίπτωση των ρευστών αρκεί μια από τις γνωστές αντικαταστάσεις $H \rightarrow P$, $M \rightarrow -V$, $T \rightarrow T$ ή, σύμφωνα με το M. E. Fisher [7], $H \rightarrow \mu$, $M \rightarrow \rho$, $T \rightarrow T$.

Ο υπολογισμός των κρίσιμων εκθετών δεν είναι μια τετριμμένη διαδικασία. Μεγάλη προσπάθεια καταβλήθηκε για τον προσδιορισμό τους και αναπτύχθηκαν ειδικές μέθοδοι, αφού η τιμή τους έχει ιδιαίτερο ενδιαφέρον για όσους ασχολούνται με τη φυσική των αλλαγών φάσεων. Γεννιέται βέβαια στο σημείο αυτό το ερώτημα γιατί η κρίσιμη συμπεριφορά και ιδίως οι προηγούμενοι εκθέτες προσελκύουν την προσοχή τόσων επιστημόνων παγκοσμίως αφού φαινομενικά δεν αντιπροσωπεύουν παρά μια προσέγγιση της συμπεριφοράς ενός συστήματος σε μια μικρή περιοχή του φασικού του διαγράμματος. Τρεις είναι οι κυριότεροι λόγοι, πέρα βέβαια από τη δυσκολία της εύρεσης των τιμών τους [16]:

- η αδυναμία ακριβούς επίλυσης των πιο πολλών μοντέλων σε περισσότερες από μια διαστάσεις είτε με αριθμητικές είτε με αναλυτικές μεθόδους.
- επιπλέον, πιστεύεται ότι αυτή η τιμή των κρίσιμων εκθετών είναι μια ιδιότητα ανεξάρτητη από «λεπτομέρειες» ενός φυσικού συστήματος, όπως η φύση και η ισχύς των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των δομικών του λίθων, εξαρτάται όμως από κάποια πιο γενικά χαρακτηριστικά του, π. χ. η διάσταση του συστήματος και η διάσταση της παραμέτρου τάξης A . Αυτή η ιδιότητα ονομάζεται «Οικουμενικότητα» (“Universality”). Λίγα σχετικά απλά μοντέλα, για παράδειγμα το διδιάστατο και το τριδιάστατο πρότυπο Ising, το τριδιάστατο πρότυπο Vars-Larkin και το τριδιάστατο πρότυπο Heisenberg, μπορούν

να χρησιμοποιηθούν για την περιγραφή της κρίσιμης συμπεριφοράς πολλών φαινομενικά εντελώς διαφορετικών μεταξύ τους φυσικών συστημάτων, ορίζοντας το καθένα από μια «Κλάση Οικουμενικότητας» (“Universality Class”- βλέπε πίνακα 1.2 και [2,11]) με τους ίδιους κρίσιμους εκθέτες.

- Οι κρίσιμοι εκθέτες αποδεικνύεται με θερμοδυναμικά επιχειρήματα ότι υπακούουν σε ορισμένες ανισοτικές σχέσεις, οι κυριότερες από τις οποίες είναι [3]:

1. ανισότητα Rushbrooke,

$$\alpha' + 2\beta + \gamma' \geq 2 \quad (1.62).$$

2. ανισότητες Griffiths,

$$\alpha' + \beta(1 + \delta) \geq 2 \quad (1.63).$$

$$\gamma' \geq \beta(\delta - 1) \quad (1.64).$$

3. ανισότητα Fisher

$$(2 - \eta)v \geq \gamma \quad (1.65).$$

4. ανισότητες Josephson

$$dv' \geq 2 - \alpha' \quad (1.66),$$

$$dv \geq 2 - \alpha \quad (1.67).$$

Από αυτές οι (1.62), (1.63) πηγάζουν από την αλληλεξάρτηση των θερμοδυναμικών συναρτήσεων και η απόδειξή τους στηρίζεται σε ισχυρά θερμοδυναμικά επιχειρήματα [3]. Πιο συγκεκριμένα από τις σχέσεις (1.8), (1.10), (1.11), (1.12) μπορούμε να οδηγηθούμε στην ισότητα

$$\chi_T(C_H - C_M) = T\alpha_H^2 \quad (1.68).$$

Αυτή συνεπάγεται

$$C_H \geq \frac{T\alpha_H^2}{\chi_T} \quad (1.69),$$

από όπου έχουμε την ανισότητα Rushbrooke (1.62), αν θυμηθούμε τη σχέση (1.12), τους ορισμούς των κρίσιμων εκθετών α' , β και γ' και το θεώρημα

$$x^\lambda \leq x^\varphi \Rightarrow \lambda \geq \varphi \quad (1.70),$$

με $\lambda, \varphi, x \in \mathbb{R}$ και $0 < x < 1$.

Η (1.64) χρησιμοποιεί επιπλέον τις υποθέσεις

$$\left. \frac{\partial H}{\partial T} \right|_M = - \left. \frac{\partial S}{\partial M} \right|_T \geq 0 \quad (1.71),$$

για $M \geq 0$ και ότι η συνάρτηση $\left. \frac{\partial H}{\partial M} \right|_T$ είναι μη φθίνουσα συνάρτηση του M για $M \geq 0, T \leq T_c$ οι

οποίες ισχύουν για όλα τα γνωστά συστήματα και μοντέλα. Επίσης φαίνεται από τα ως τώρα γνωστά αποτελέσματα πως και αυτή ισχύει σαν ισότητα.

Γενικά, αν και όλα τα μέχρι στιγμής θεωρητικά και πειραματικά αποτελέσματα τις επαληθεύουν τις (1.62)- (1.64) ως ισότητες στα όρια του πειραματικού σφάλματος [3], [6], δεν έχουν αποδειχτεί πειστικά με πρώτες θερμοδυναμικές αρχές ως τέτοιες παρά τις προσπάθειες που έχουν καταβληθεί. Ωστόσο ο Rushbrooke απέδειξε [3] το 1965 με απλά θερμοδυναμικά επιχειρήματα ότι η (1.62) δεν ισχύει ως ισότητα αν και μόνο αν στο κρίσιμο σημείο

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{C_H}{C_M} = 1 \quad (1.72),$$

δηλαδή αν εκεί οι δυο γενικά διαφορετικές μεταξύ τους θερμοχωρητικότητες C_M και C_H παίρνουν την ίδια αριθμητική τιμή.

Όσο για τις ανισότητες (1.64), (1.65), (1.67), βασίζονται σε επιπλέον υποθέσεις στατιστικής φύσης (π.χ. για τη μονοτονία και πρόσημο της συνδεδεμένης συνάρτησης συσχέτισης δυο σημείων στην περίπτωση της (1.63)- [3]) οι οποίες δε φαίνεται να έχουν καθολική ισχύ. Εξαιτίας τούτου, όπως εύκολα φαίνεται και από τον πίνακα 1.2 (τα στοιχεία του προέρχονται από τα [3], [6]), για πολλά φυσικά συστήματα, κυρίως δισδιάστατα σαν το 2-d Ising και το 2-d Potts, επαληθεύονται σαν ισότητες, για άλλα ισχύουν σαν ανισότητες (οι ανισότητες του Josephson στην περίπτωση του προτύπου 3-d Heisenberg) ενώ για ορισμένα ούτε καν σαν τέτοιες (οι ανισότητες του Josephson στην περίπτωση των προτύπων 3-d Ising, 3-d Vars-Larkin και ορισμένων συστημάτων με $d \geq 4$).

Πίνακας 1.2: Οι κυριότερες Κλάσεις Παγκοσμιοτήτας (όλα τα παρακάτω πρότυπα θεωρούνται ομογενή, συμμετρικά, με επίδραση μόνο μεταξύ πρώτων γειτόνων).

Κλάση παγκοσμιοτήτας	Χαμιλτονιανή του αντίστοιχου μοντέλου	Είδος παραμέτρου τάξης	Κρίσιμοι εκθέτες						Φυσικά συστήματα που περιγράφει
			α	β	γ	δ	ν	η	
2-d Ising	$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - H \sum_i s_i$	μονόμετρο μέγεθος	0	1/8	7/4	15	1	1/4	Προσροφήσεις
3-d Ising	$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - H \sum_i s_i$	μονόμετρο μέγεθος	0,10	0,33	1,24	4,8	0,63	0,04	Ρευστά, δυαδικά μίγματα, ανισοτροπικούς μαγνήτες
3-d Vars- Larkin	$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \left(\sum_{n=1}^2 s_{in} s_{jn} \right) - \vec{H} \cdot \sum_i \left(\sum_{n=1}^2 s_{in} \right)$	δισδιάστατο διάνυσμα	0,01	0,34	1,30	4,8	0,66	0,04	Υπερρευστά, υπεραγωγούς
3-d Heisenberg	$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \left(\sum_{n=1}^3 s_{in} s_{jn} \right) - \vec{H} \cdot \sum_i \left(\sum_{n=1}^3 s_{in} \right)$	τριδιάστατο διάνυσμα	-0,12	0,36	1,39	4,8	0,71	0,04	Ισοτροπικοί μαγνήτες
3-d Berlin-Kac	$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \left(\sum_{n=1}^{\infty} s_{in} s_{jn} \right) - \vec{H} \cdot \sum_i \left(\sum_{n=1}^{\infty} s_{in} \right)$	απειροδιάστατο διάνυσμα	-1	1/2	2	5	1	0	άγνωστα
2-d Potts, q = 3	$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{s_i} \delta_{s_j} - H \sum_i s_i$	μονόμετρο μέγεθος	1/3	1/9	13/9	14	5/6	4/15	Προσροφήσεις
2-d Potts, q = 4	$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{s_i} \delta_{s_j} - H \sum_i s_i$	μονόμετρο μέγεθος	2/3	1/12	7/6	15	2/3	1/4	Προσροφήσεις

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2: ΘΕΩΡΙΕΣ ΚΛΙΜΑΚΩΣΗΣ

2.1 Γενικά για τις θεωρίες κλιμάκωσης (*scaling*)

Από νωρίς η μελέτη των κρίσιμων φαινομένων τράβηξε την προσοχή όσων επιστημόνων ασχολούνταν με τις αλλαγές φάσης [3]. Στα 1873 ο Ολλανδός φυσικός Van der Waals πρότεινε μια γενικευμένη καταστατική εξίσωση για αέρια που οι δομικοί τους λίθοι αλληλεπιδρούσαν μεταξύ τους. Με τη βοήθεια αυτής προσπάθησε να ερμηνεύσει τις αλλαγές φάσης και την κρίσιμη συμπεριφορά των ρευστών. Το 1905 ο Pierre Weiss εισηγήθηκε μια παρόμοια θεωρία για μαγνητικά συστήματα, με τη βοήθεια της οποίας αποπειράθηκε να περιγράψει και την κρίσιμη συμπεριφορά τους. Αργότερα, το 1936, ο Ρώσος φυσικός Lev Landau διατύπωσε μια γενική θεωρία για τις αλλαγές φάσης, η οποία συμπληρώθηκε μεταπολεμικά (1950) και έγινε γνωστή σαν Θεωρία Landau-Ginzburg. Σύμφωνα με αυτήν η συμπεριφορά των συστημάτων καθορίζεται από ένα γενικευμένο θερμοδυναμικό δυναμικό, το οποίο μπορεί να αναπτυχθεί σαν δυναμοσειρά της παραμέτρου τάξης. Ο Landau βέβαια είχε καταλάβει πως στα σημεία αλλαγής φάσης ένα τέτοιο θερμοδυναμικό δυναμικό δεν μπορούσε εξ ορισμού να είναι αναλυτική συνάρτηση, θεώρησε όμως ότι το γεγονός αυτό επηρεάζει μόνο τους ανώτερης τάξης όρους του παραπάνω αναπτύγματος.

Η θεωρία αυτή είχε αρκετές επιτυχίες και αποτέλεσε σταθμό στην εξέλιξη των αντιλήψεών μας για τις αλλαγές φάσης, δεν κατάφερε όμως να περιγράψει ικανοποιητικά την κρίσιμη συμπεριφορά των περισσότερων φυσικών συστημάτων και μοντέλων, προβλέποντας τις σωστές τιμές των κρίσιμων εκθετών τους. Στις αρχές της δεκαετίας του 1960, υπό το φως των ήδη συσσωρευμένων θεωρητικών και πειραματικών δεδομένων (λ.χ. η λύση του προτύπου Ising στις δυο διαστάσεις από τον Onsager και άλλους) οι ερευνητές άρχισαν να πιστεύουν ότι το προαναφερθέν γενικευμένο θερμοδυναμικό δυναμικό αποτελείται από δυο μέρη, ένα αναλυτικό και ένα μη αναλυτικό. Το πρώτο περιγράφεται από τη Θεωρία Landau-Ginzburg ενώ στο δεύτερο αποδόθηκε η συμπεριφορά των φυσικών συστημάτων στο κρίσιμο σημείο [3].

Η πρώτη σαφής διατύπωση μιας θεωρίας κλιμάκωσης δυο μεταβλητών έγινε το 1965 ανεξάρτητα από τον Widom και τους Domb και Hunter [3], [11]. Αυτοί ισχυρίστηκαν πως το μη αναλυτικό τμήμα του γενικευμένου θερμοδυναμικού δυναμικού έχει τη μορφή γενικευμένης ομογενούς συνάρτησης δυο μεταβλητών, συνήθως της θερμοκρασίας T και του εξωτερικού πεδίου H . Από εδώ φάνηκε ότι το δυναμικό αυτό μπορούσε να ταυτιστεί με την ελεύθερη ενέργεια κατά Gibbs $G(T, H)$. Τα αποτελέσματά τους, σε αντίθεση με τη με την προηγούμενη θεωρία, δεν προέβλεπαν συγκεκριμένες τιμές για τους κρίσιμους εκθέτες παρά μόνο σχέσεις μεταξύ τους καθώς και τη μορφή της κρίσιμης ισόθερμου, όμως ήταν και εξακολουθούν να είναι σε καλή συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα.

Στα μαθηματικά ορίζουμε σαν ομογενή συνάρτηση n πραγματικών μεταβλητών κάθε πραγματική συνάρτηση f n πραγματικών μεταβλητών $x_1, x_2, \dots, x_n$ για την οποία ισχύει η συνθήκη

$$f(\lambda x_1, \lambda x_2, \dots, \lambda x_n) = \lambda^n f(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (2.1),$$

για κάθε $\lambda \in \mathbb{R}$, όπου g είναι μια πραγματική συνάρτηση μιας πραγματικής μεταβλητής. Μπορεί να αποδειχτεί, πιο εύκολα αν δεχτούμε εξ αρχής τη διαφορισιμότητά της, πως η g θα είναι πάντα της μορφής

$$g(\lambda) = \lambda^p \quad (2.2),$$

όπου $p \in \mathbb{R}^*$ ο βαθμός ομογένειας της συνάρτησης f .

Στη συνέχεια μπορούμε να ορίσουμε τις γενικευμένες ομογενείς συναρτήσεις, δηλαδή εκείνες τις πραγματικές συναρτήσεις f n πραγματικών μεταβλητών $x_1, x_2, \dots, x_n$ οι οποίες για κάθε $\lambda \in \mathbb{R}$ πληρούν τη συνθήκη [17]

$$f(\lambda^{y_1} x_1, \lambda^{y_2} x_2, \dots, \lambda^{y_n} x_n) = \lambda^p f(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (2.3),$$

με $y_1, y_2, \dots, y_n$ πραγματικές σταθερές. Ας σημειωθεί εδώ ότι η έκφραση

$$f(\lambda^{y_1} x_1, \lambda^{y_2} x_2, \dots, \lambda^{y_n} x_n) = \lambda^p f(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (2.4),$$

όπου $\lambda, p, y_1, y_2, \dots, y_n \in \mathbb{R}$ και $p \neq 0$, μπορεί γραφεί στη μορφή

$$f(\lambda^{\frac{y_1}{p}} x_1, \lambda^{\frac{y_2}{p}} x_2, \dots, \lambda^{\frac{y_n}{p}} x_n) = \lambda f(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (2.5),$$

δηλαδή είναι πλήρως ισοδύναμη με τη (2.3) και όχι γενίκευσή της.

Για λόγους ευκολίας η ελεύθερη ενέργεια κατά Gibbs $G(T, H)$ γράφεται σαν συνάρτηση της ανηγμένης θερμοκρασίας t (που ορίζεται από τη σχέση (1.5) και του ανηγμένου εξωτερικού πεδίου h , το οποίο δίνεται από τον τύπο

$$h = \frac{H - H_c}{H_c} \quad (2.6),$$

οπότε η υπόθεση κλιμάκωσης του Widom παίρνει για κάθε $\lambda \in \mathbb{R}$ τη μορφή

$$G(\lambda^{y_t} t, \lambda^{y_h} h) = \lambda G(t, h) \quad (2.7),$$

όπου y_t, y_h πραγματικές σταθερές. Λίγα χρόνια μετά τις εργασίες του Widom η υπόθεση κλιμάκωσης ερμηνεύτηκε γεωμετρικά [3] και έγινε σαφές ότι ανάλογες συνθήκες κλιμάκωσης θα πρέπει να ισχύουν και για τα υπόλοιπα θερμοδυναμικά δυναμικά που αναφέρονται στην §1.1.

Ξεινώνοντας από μια σχέση κλιμάκωσης για κάποια θερμοδυναμική συνάρτηση και αξιοποιώντας τους ορισμούς τόσο των θερμοδυναμικών μεγεθών όσο και των κρίσιμων εκθετών καταλήγουμε σε ενδιαφέροντα συμπεράσματα. Παραγωγίζοντας και τα δυο μέλη της τελευταίας σχέσης ως προς το ανηγμένο εξωτερικό πεδίο h και με τη βοήθεια της σχέσης (1.7) προκύπτει μια σχέση κλιμάκωσης για τη μακροσκοπική μαγνήτιση M , η

$$\lambda^{y_h} M(\lambda^{y_t} t, \lambda^{y_h} h) = \lambda M(t, h) \quad (2.8),$$

που ισχύει για κάθε $\lambda \in \mathfrak{R}$. Θέτουμε $h = 0$ ($H = H_c$),

$$\lambda = \left(\frac{1}{|t|} \right)^{\frac{1}{y_t}} \quad (2.9)$$

και υπολογίζουμε το όριο της ποσότητας που προκύπτει για $t \rightarrow 0^-$. Η εξίσωση ορισμού (1.53) του κρίσιμου εκθέτη β δίνει

$$\beta = \frac{1 - y_h}{y_t} \quad (2.10),$$

αφού η παράμετρος τάξης για τα μαγνητικά συστήματα ως γνωστόν ταυτίζεται με τη μακροσκοπική μαγνήτιση M . Κατόπιν μελετάμε την περίπτωση $t = 0$,

$$\lambda = |h|^{-\frac{1}{y_h}} \quad (2.11)$$

και $h \rightarrow 0$ ($H \rightarrow H_c$), οπότε από την εξίσωση ορισμού (1.55) του κρίσιμου εκθέτη δ αποδεικνύεται πως

$$\delta = \frac{y_h}{1 - y_h} \quad (2.12).$$

Μπορούμε να πάρουμε πληροφορίες και για άλλους κρίσιμους εκθέτες θεωρώντας τις μερικές παραγώγους ανώτερης τάξης της ελεύθερης ενέργειας κατά Gibbs. Από τον ορισμό της ισόθερμης μαγνητικής επιδεικτικότητας χ_T (σχέση (1.8)) προκύπτει ένας νόμος κλιμάκωσης για το φυσικό αυτό μέγεθος, η

$$\lambda^{2y_h} \chi_T(\lambda^{y_t} t, \lambda^{y_h} h) = \lambda \chi_T(t, h) \quad (2.13).$$

Θεωρώντας τώρα την περίπτωση $\mathbf{h} = 0$ ($\mathbf{H} = \mathbf{H}_0$),

$$\lambda = \left(\frac{1}{|\mathbf{t}|} \right)^{-\frac{1}{y_t}} \quad (2.14)$$

και υπολογίζοντας τα αντίστοιχα όρια για $\mathbf{t} \rightarrow 0^+$ και $\mathbf{t} \rightarrow 0^-$ προκύπτει, με τη βοήθεια της εξίσωσης ορισμού (1.53) των κρίσιμων εκθετών γ και γ' , ότι

$$\gamma = \gamma' = \frac{2y_h - 1}{y_t} \quad (2.15).$$

Δεν είναι δύσκολο να αποδείξουμε με τη μέθοδο της μαθηματικής επαγωγής ότι η ℓ -τάξης μερική παράγωγος της $\mathbf{G}$ ως προς το $\mathbf{h}$ έχει τη μορφή

$$\mathbf{G}^{(\ell)}(\mathbf{t}, \mathbf{h}) = \lambda^{\ell \cdot y_h - 1} \mathbf{G}^{(\ell)}(\lambda^{y_t} \mathbf{t}, \lambda^{y_h} \mathbf{h}) \quad (2.16),$$

που είναι η γενίκευση των εξισώσεων (2.8), (2.13). Από αυτή προκύπτει ο τύπος

$$\frac{\mathbf{G}^{(\ell)}(\mathbf{t}, \mathbf{h})}{\mathbf{G}^{(\ell-1)}(\mathbf{t}, \mathbf{h})} = \lambda^{y_h} \frac{\mathbf{G}^{(\ell)}(\lambda^{y_t} \mathbf{t}, \lambda^{y_h} \mathbf{h})}{\mathbf{G}^{(\ell-1)}(\lambda^{y_t} \mathbf{t}, \lambda^{y_h} \mathbf{h})} \quad (2.17).$$

Από εδώ, αν θυμηθούμε τον ορισμό του κρίσιμου εκθέτη Δ_ℓ (1.58) και εργαστούμε όμοια με προηγούμενως, μπορούμε να δούμε ότι

$$\Delta'_\ell = \Delta'_\ell = \Delta = \frac{y_h}{y_t} \quad (2.18),$$

για κάθε $\ell \in \mathbb{N}$.

Φυσικά μπορούμε να διαφορίσουμε κατάλληλα την ελεύθερη ενέργεια κατά Gibbs ως προς τη θερμοκρασία και να έχουμε το νόμο της κλιμάκωσης για την ειδική θερμότητα C_H υπό σταθερό ανηγμένο εξωτερικό πεδίο $\mathbf{h}$ (βλέπε τον τύπο (1.10)).

$$\lambda^{2y_t} C_H(\lambda^{y_t} \mathbf{t}, \lambda^{y_h} \mathbf{h}) = \lambda C_H(\mathbf{t}, \mathbf{H}) \quad (2.19).$$

Εργαζόμενοι όπως παραπάνω μπορούμε να δείξουμε πως οι κρίσιμοι εκθέτες της ειδικής θερμότητας α και α' υπακούουν στον τύπο

$$\alpha = \alpha' = 2 - y_t^{-1} \quad (2.20).$$

Από όσα αναφέρθηκαν εύκολα διαπιστώνουμε ότι όλοι κρίσιμοι εκθέτες α , β , γ , δ , Δ και οι αντίστοιχοι τονούμενοι μπορούν να εκφραστούν συναρτήσει δυο μόνο μεταβλητών, των εκθετών κλιμάκωσης y_H και y_t . Επομένως δε θα είναι ανεξάρτητοι μεταξύ τους. Πράγματι, από τις σχέσεις (2.10), (2.15), (2.20) προκύπτει ο τύπος

$$\alpha' + 2\beta + \gamma' = 2 \quad (2.21),$$

που δεν είναι παρά η ανισότητα του Rushbrooke σε μορφή ισότητας. Ομοίως οι τύποι (2.10), (2.12), (2.15), (2.20) συνδυαζόμενοι κατάλληλα μας δίνουν τις ανισότητες του Griffiths σε μορφή ισότητων, δηλαδή

$$\alpha' + \beta(1 + \delta) = 2 \quad (2.22),$$

$$\gamma' = \beta(\delta - 1) \quad (2.23).$$

Επίσης συνδυάζοντας τις (2.10), (2.12), (2.15) παίρνουμε την ισότητα

$$\Delta'_\ell = \Delta'_t = \Delta = \beta\delta = \beta + \gamma' \quad (2.24).$$

Με βάση τους τύπους (2.8), (2.10), (2.11), (2.12), (2.15) γράφουμε τώρα τη σχέση κλιμάκωσης για τη μακροσκοπική μαγνήτιση στη μορφή [18]

$$M(t, h) = |t|^\beta M\left(\frac{t}{|t|}, \frac{h}{|t|^{\beta\delta}}\right) \quad (2.25).$$

Στη συνέχεια ορίζουμε την κλιμακωμένη (μακροσκοπική) μαγνήτιση M_s και το κλιμακωμένο ανηγμένο μαγνητικό πεδίο h_s ως εξής:

$$M_s = |t|^{-\beta} M(t, h) \quad (2.26),$$

$$h_s = |t|^{-\beta\delta} h(t, M) \quad (2.27).$$

Η σχέση κλιμάκωσης για τη μακροσκοπική μαγνήτιση μπορεί πλέον να γραφεί με τη βοήθεια των κλιμακωμένων μεταβλητών

$$M_s = F_\pm(h_s) \quad (2.28)$$

ή

$$h_s = (F_\pm)^{-1}(M_s) \quad (2.29),$$

όπου $(F_\pm)^{-1}$ η αντίστροφη συνάρτηση της $F_\pm$.

Φυσικά διατυπώθηκαν και άλλες θεωρίες κλιμάκωσης πέρα από αυτή του Widom [3], [19]. Εδώ θα σκιαγραφήσουμε μόνο τη θεωρία του Kadanoff, η οποία πρωτοδιατυπώθηκε το 1966, αποτελώντας την πρώτη προσπάθεια μικροσκοπικής ερμηνείας των σχέσεων κλιμάκωσης των θερμοδυναμικών συναρτήσεων στο κρίσιμο σημείο. Επιπλέον προβλέπει σχέσεις κλιμάκωσης για τις συναρτήσεις συσχέτισης και επομένως ισότητες μεταξύ των αντίστοιχων κρίσιμων εκθετών. Σήμερα έχει αποδειχτεί ισοδύναμη με θεωρίες κλιμάκωσης τριών μεταβλητών, όπου ως τρίτη μεταβλητή λαμβάνεται συνήθως το μήκος συσχέτισης ξ . Τέτοιες θεωρίες είναι γνωστές σαν θεωρίες υπερκλιμάκωσης (hyperscaling).

Θεωρούμε για λόγους ευκολίας ένα απλό πρότυπο Ising d- διαστάσεων με $N \rightarrow +\infty$ μαγνητικές ροπές $\vec{s}_i$ και Χαμιλτονιανή $\mathcal{H}_{site}$ την [3]

$$\beta \mathcal{H}_{site} = -\beta J_b \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - \beta H \sum_i s_i \quad (2.30).$$

Χωρίζουμε το κρυσταλλικό πλέγμα σε κυψελίδες πλευράς La , όπου a η πλεγματική σταθερά και L η διάσταση του πλέγματος, δηλαδή ένας αυθαίρετος αριθμός συνήθως πολύ μεγαλύτερος από τη μονάδα. Θα υπάρχουν επομένως n κυψελίδες, με

$$n = \frac{N}{L^d} \quad (2.31),$$

καθεμιά από τις οποίες θα περιέχει L^d μαγνητικές ροπές. Εργαζόμαστε κατόπιν για περιοχή θερμοκρασιών τόσο κοντά στην κρίσιμη θερμοκρασία T_c (προφανώς πρέπει $d \geq 2$) ώστε για το μήκος συσχέτισης ξ να ισχύει

$$\xi \gg La \quad (2.32),$$

δηλαδή

$$1 \ll L \ll \xi a^{-1} \quad (2.33).$$

Αυτό σημαίνει ότι σε κάθε πλειάδα (cluster) συσχετισμένων μαγνητικών ροπών περιέχεται μεγάλος αριθμός τέτοιων κυψελίδων και αντίστροφα ότι καθεμιά από αυτές ανήκει εξ ολοκλήρου σε μια τέτοια πλειάδα (για τη χρήση και τη σημασία του όρου πλειάδα βλέπε [13], [14]). Όταν συμβαίνουν αυτά μπορούμε να υποθέσουμε ότι η συνολική μαγνητική ροπή (ανά δομικό λίθο) κάθε κυψελίδας $\vec{s}_i$ συμπεριφέρεται σαν να μπορεί να πάρει μόνο δυο τιμές, την «πάνω» και την «κάτω», όπως ακριβώς και η μαγνητική ροπή $\vec{s}_i$ σε κάθε πλεγματική θέση. Επίσης μπορούμε να γράψουμε τη Χαμιλτονιανή $\mathcal{H}_{cell}$ του

προτύπου Ising (2.30) με όρους μαγνητικών ροπών κυψελίδων $\tilde{s}_i$ αλλάζοντας μόνο τις τιμές των παραμέτρων της $\tilde{\mathbf{J}}_b$ και $\tilde{\mathbf{H}}$, όχι τη μορφή της, δηλαδή

$$\beta \mathcal{H}_{cell} = -\beta \tilde{\mathbf{J}}_b \sum_{\langle ij \rangle} \tilde{s}_i \tilde{s}_j - \beta \tilde{\mathbf{H}} \sum_i \tilde{s}_i \quad (2.34),$$

αφού προφανώς

$$\sum_{i \in k} s_i = L_{tot} L^d \tilde{s}_k \quad (2.35),$$

με $L_{tot} < 1$. Αν βέβαια όλες οι μαγνητικές ροπές σε μια κυψελίδα έχουν την ίδια τιμή τότε

$$\sum_{i \in k} s_i = L^d \tilde{s}_k \quad (2.36).$$

Από εδώ υποθέτοντας ότι

$$\tilde{\mathbf{H}} = f_1(L) \mathbf{H} \quad (2.37)$$

και

$$\tilde{\mathbf{t}} = f_2(L) \mathbf{t} \quad (2.38)$$

καταλήγουμε ότι το μη αναλυτικό τμήμα της θερμοδυναμικής συνάρτησης Gibbs θα είναι μια γενικευμένη ομογενής συνάρτηση δυο μεταβλητών $\mathbf{t}$ και $\mathbf{h}$ ($\mathbf{H}_c = 0$) της μορφής

$$\mathbf{g}(L^x \mathbf{t}, L^y \mathbf{h}) = L^d \mathbf{g}(\mathbf{t}, \mathbf{h}) \quad (2.39),$$

για κάθε $L \in \mathfrak{R}$. Αυτή είναι ισοδύναμη της (2.7), με

$$\mathbf{y}_t = \frac{\mathbf{x}}{d} \quad (2.40),$$

$$\mathbf{y}_h = \frac{\mathbf{y}}{d} \quad (2.41),$$

σύμφωνα με τα παραπάνω. Ας σημειωθεί εδώ ότι ο Kadanoff στην αρχική του εργασία είχε υποθέσει συγκεκριμένες μορφές για τις f_1 και f_2 , τις

$$f_1(L) = L^x \quad (2.42),$$

$$f_2(\mathbf{L}) = \mathbf{L}^y \quad (2.43).$$

Ο Cooper έδειξε όμως το 1968 πως κάτι τέτοιο είναι περιττό [3], [19].

Ένα άλλο ενδιαφέρον σημείο των απόψεων του Kadanoff [3], [19] είναι πως στα πλαίσιά τους προβλέπεται η κλιμάκωση της συνδεδεμένης συνάρτησης συσχέτισης δυο σημείων $\Gamma_c^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{t})$. Για το σκοπό αυτό ορίζουμε τη συνδεδεμένη συνάρτηση συσχέτισης μεταξύ δυο μαγνητικών ροπών κυψελίδων $\tilde{s}_i$ και $\tilde{s}_j$ όμοια με τον τύπο (1.27), δηλαδή

$$\Gamma_c^{(2)}(\tilde{\mathbf{r}}, \mathbf{t}) = \langle (\tilde{s}_a - \langle \tilde{s} \rangle) (\tilde{s}_\beta - \langle \tilde{s} \rangle) \rangle \quad (2.44),$$

όπου

$$\tilde{r} = |\vec{r}_a - \vec{r}_\beta| = \frac{r}{L} \quad (2.45)$$

είναι το μέτρο του διανύσματος διαχωρισμού των δυο κυψελίδων α και β . Κατόπιν, από τους τύπους (1.26) και (2.43) καταλήγουμε στη σχέση κλιμάκωσης της $\Gamma_c^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{t})$, η οποία γράφεται συνήθως στη μορφή

$$\Gamma_c^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{t}) = \mathbf{t}^{2 \cdot (\mathbf{x}-\mathbf{d})} \Gamma_c^{(2)}(\mathbf{L}^{-1}\mathbf{r}, \mathbf{L}^y\mathbf{t}) \quad (2.46),$$

για κάθε $\mathbf{L} \in \mathfrak{R}$.

Χρησιμοποιώντας τώρα όσα ήδη βρήκαμε και εργαζόμενοι όπως και στην περίπτωση της ελεύθερης ενέργειας κατά Gibbs προκύπτουν οι παρακάτω σχέσεις μεταξύ των κρίσιμων εκθετών:

$$\nu' = \nu \quad (2.47),$$

$$(2 - \eta)\nu = \gamma \quad (2.48),$$

$$d\nu' = 2 - \alpha' \quad (2.49),$$

$$d\nu = 2 - \alpha \quad (2.50),$$

$$d\nu = \gamma + 2\beta \quad (2.51).$$

Από αυτές η πρώτη εκφράζει τη συμμετρία του εκθέτη του μήκους συσχέτισης ξ πάνω και κάτω από την κρίσιμη θερμοκρασία, η δεύτερη είναι ο νόμος του Fisher σε μορφή ισότητας ενώ οι δυο επόμενες δεν είναι παρά οι ανισότητες του

Josephson επίσης σε μορφή ισοτήτων. Η (2.51) ονομάζεται και σχέση υπερκλιμάκωσης (hyperscaling).

Κλείνοντας ας έχουμε υπόψη ότι γύρω από τις απόψεις του Kadanoff και γενικότερα τις θεωρίες κλιμάκωσης τριών μεταβλητών υπάρχει αρκετή συζήτηση [3]. Τα αποτελέσματά τους φαίνεται ότι συμφωνούν με τα πειραματικά και θεωρητικά δεδομένα ορισμένων κλάσεων παγκοσμιότητας, όπως του 2-d Ising και του 2-d Potts, ενώ βρίσκονται σε προφανή ασυμφωνία με αντίστοιχα δεδομένα από ορισμένες άλλες (βλέπε §1.4). Οι αιτίες αυτών των ασυμφωνιών δεν έχουν εξηγηθεί ακόμα πλήρως, φαίνεται όμως πως η παρουσία πολύπλοκων αλληλεπιδράσεων, ιδιαίτερα μακράς εμβέλειας, μεταξύ των δομικών λίθων τέτοιων συστημάτων, καθιστά αδύνατο το χωρισμό τους σε υποσυστήματα διάστασης μεγαλύτερης από την εμβέλεια των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των δομικών τους λίθων, έτσι ώστε να ισχύουν οι υποθέσεις του Kadanoff. Θα πρέπει ωστόσο να τονιστεί πως οι απόψεις του τελευταίου αποτέλεσαν σταθμό στην προσπάθεια κατανόησης των κρίσιμων φαινομένων και υπήρξαν ο πρόδρομος των πιο σύγχρονων θεωριών επανακανονικοποίησης.

2.2 Οι συνοριακές συνθήκες στα πεπερασμένα συστήματα

Σε όσα είπαμε μέχρι τώρα είχαμε υποθέσει ότι τα υπό μελέτη συστήματα κατανέμονται ομοιόμορφα σε χώρο d διαστάσεων και ότι έχουν πλήθος δομικών λίθων N που τείνει στο άπειρο. Ωστόσο είναι γνωστό ότι και το άπειρο σύστημα αποτελεί εξιδανίκευση ορισμένων πραγματικών συστημάτων με πολλούς βαθμούς ελευθερίας (της τάξης του αριθμού του Avogadro $N_A = 6,023 \cdot 10^{23}$) ομοιόμορφα κατανεμημένους.

Στους υπολογισμούς μας πάλι συναντάμε συχνά συστήματα που με τον έναν ή τον άλλο τρόπο μπορούν να θεωρηθούν πεπερασμένα. Οι κυριότερες τέτοιες περιπτώσεις είναι [20], [21]:

- το πλήρως πεπερασμένο σύστημα d διαστάσεων (γεωμετρία G_1), όγκου V και κλίμακας μήκους

$$L \sim V^{\frac{1}{d}} \quad (2.52).$$

Κατεξοχήν χρησιμοποιείται στην υπολογιστική φυσική και ιδιαίτερα στις προσομοιώσεις. Το σχήμα του συστήματος δεν επηρεάζει τα περισσότερα μεγέθη που επιθυμούμε να υπολογίσουμε, για αυτό θεωρείται συνήθως υπερκύβος d διαστάσεων με πλευρά μήκους L .

- το σύστημα επιπέδων d διαστάσεων (γεωμετρία G_2), το οποίο εκτείνεται απεριόριστα στις $d' = d - 1$ διαστάσεις αλλά έχει πεπερασμένο πάχος L σε αυτήν που απομένει. Είναι τις περισσότερες φορές η ευκολότερη περίπτωση

πεπερασμένου συστήματος που επιδέχεται αναλυτική λύση. Για $d > 2$ μπορεί να παρουσιάσει αλλαγή φάσης.

- το σύστημα d διαστάσεων το οποίο εκτείνεται απεριόριστα σε μια διάσταση αλλά έχει πεπερασμένο πάχος στις υπόλοιπες $d' = d - 1$ διαστάσεις (γεωμετρία G_3). Η γεωμετρία αυτή μελετάται συχνά με πίνακες μεταφοράς (transfer matrices) και φαινομενολογική επανακανονικοποίηση (phenomenological renormalization), βοηθά δε πολύ τους κβαντομηχανικούς υπολογισμούς αν θεωρηθεί ότι η άπειρη διάσταση ταυτίζεται με τον άξονα των χρόνων. Φυσικά ισοδυναμεί με τη G_2 αν $d = 2$.

Όποια όμως και αν είναι η επιλεγμένη γεωμετρία, η μελέτη ενός κατά οποιονδήποτε τρόπο πεπερασμένου συστήματος απαιτεί να προσδιορίσουμε τι συμβαίνει στα άκρα του, με άλλα λόγια να καθορίσουμε τις συνοριακές συνθήκες. Θεωρητικά αρκεί να εφαρμόσουμε τις απλούστερες δυνατές για κάθε περίπτωση. Ακόμα και έτσι όμως επιβάλλεται ιδιαίτερη προσοχή γιατί οι συνοριακές συνθήκες μπορούν να επηρεάσουν τη φυσική του θεωρούμενου πεπερασμένου συστήματος.

Τρία είναι τα κυριότερα είδη των συνοριακών συνθηκών [21]:

- Περιοδικές συνοριακές συνθήκες ($\tau = 0$ ή B_1), κατά τις οποίες κάποια χωρική ποσότητα Φ , συνάρτηση της θέσης, ικανοποιεί τη σχέση

$$\Phi(\vec{r}', x) = \Phi(\vec{r}', x + L) \quad (2.53),$$

όπου το $\vec{r}'$ είναι χωρικό διάνυσμα διαστάσεων d' .

- Αντιπεριοδικές συνοριακές συνθήκες ($\tau = 0,5$ ή B_2), κατά τις οποίες κάποια χωρική ποσότητα Φ , συνάρτηση της θέσης, ικανοποιεί τη σχέση

$$\Phi(\vec{r}', x) = -\Phi(\vec{r}', x + L) \quad (2.54),$$

όπου το $\vec{r}'$ είναι χωρικό διάνυσμα διαστάσεων d' . Μοιάζουν με τις περιοδικές αλλά αλλάζει το πρόσημο του θεωρούμενου φυσικού μεγέθους στη συνοριακή επιφάνεια.

- Συνοριακές συνθήκες ελεύθερης επιφάνειας ($\tau = 1$ ή B_3 -λέγονται και συνοριακές συνθήκες ελεύθερων άκρων αν το σύστημα είναι μονοδιάστατο), κατά τις οποίες κάποια χωρική ποσότητα Φ , συνάρτηση της θέσης, ικανοποιεί τη σχέση

$$\Phi(\vec{r}', x) = 0 \quad (2.55),$$

για $x < 0$ ή $x > L$, όπου το $\vec{F}'$ είναι χωρικό διάνυσμα διαστάσεων d' . Χρησιμοποιούνται σχεδόν αποκλειστικά στη μελέτη των επιφανειακών φαινομένων και η ορθή εφαρμογή τους παρουσιάζει δυσκολίες επειδή είναι απαραίτητο να καθορίσουμε πώς ακριβώς συμπεριφέρεται η ποσότητα Φ στην επιφάνεια (ή στα άκρα, αν το σύστημα είναι μονοδιάστατο) του συστήματος, δηλαδή για $x = 0$ ή $x = L$.

Ένα άλλο σημείο το οποίο χρειάζεται ιδιαίτερη προσοχή είναι ότι τα πεπερασμένα συστήματα δεν παρουσιάζουν πραγματικές αλλαγές φάσης, όπως τις ορίσαμε στις §1.3 και §1.4. Έτσι δεν ορίζεται κρίσιμη θερμοκρασία, αλλά υπάρχουν ψευδοκρίσιμες θερμοκρασίες κατά τις οποίες τα διάφορα φυσικά μεγέθη παρουσιάζουν ακρότατο (μέγιστο ή ελάχιστο). Οι θερμοκρασίες αυτές καθορίζονται όχι μόνο από το χαρακτηριστικό μήκος L του συστήματος αλλά και από την αντίστοιχη φυσική ποσότητα, στο θερμοδυναμικό όριο όμως όλες συγκλίνουν στην ίδια τιμή, την κρίσιμη θερμοκρασία T_c του συστήματος [3], [16].

Με βάση τα προηγούμενα μπορούμε να εισάγουμε δυο χαρακτηριστικά μεγέθη για κάθε ψευδοκρίσιμη θερμοκρασία [3], [16]. Αυτά είναι:

- Το κλάσμα της μεταβολής (fractional shift). Συμβολίζεται με $\epsilon(L)$ και ορίζεται ίσο με το πηλίκο

$$\epsilon(L) = \frac{T_c - T_c(L)}{T_c} \quad (2.56).$$

Εκφράζει πόσο απέχει μια ψευδοκρίσιμη θερμοκρασία από την κρίσιμη σε μονάδες της τελευταίας.

- Το κλάσμα της στρογγυλοποίησης (fractional rounding). Συμβολίζεται με $\delta(L)$ και ορίζεται ίσο με το πηλίκο

$$\delta(L) = \frac{T_c(L) - T^*(L)}{T_c} \quad (2.57).$$

Εκφράζει πόσο απέχει μια ψευδοκρίσιμη θερμοκρασία από τη χαρακτηριστική εκείνη θερμοκρασία $T^*(L)$ κατά την οποία διαφοροποιούνται τα διαγράμματα του αντίστοιχου μεγέθους για άπειρο και πεπερασμένο πλέγμα (σε μονάδες της κρίσιμης θερμοκρασίας).

2.3 Η μέθοδος της κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους (Finite-Size Scaling)

Σε προηγούμενη ενότητα μιλήσαμε για τους κρίσιμους εκθέτες και τη σημασία τους στη μελέτη των συνεχών αλλαγών φάσης. Η εύρεση τέτοιων εκθετών δεν είναι τετριμμένη υπόθεση, ιδιαίτερα στην περίπτωση πραγματικών φυσικών συστημάτων ή όταν το εξεταζόμενο μοντέλο δεν επιδέχεται αναλυτική λύση. Ο προφανής τρόπος εργασίας τότε είναι φυσικά ο απευθείας υπολογισμός τους, με μια μέθοδο που λέγεται και προεκβολή (extrapolation). Αυτό σημαίνει ότι για να υπολογίσουμε λ.χ. την αριθμητική τιμή του εκθέτη β για ένα φυσικό σύστημα ή ένα μοντέλο παριστάνουμε γραφικά την παράμετρο τάξης του A σε συνάρτηση με την ανηγμένη θερμοκρασία t σε λογαριθμικό διάγραμμα και από την κλίση της ευθείας που θα προκύψει υπολογίζουμε τον κρίσιμο εκθέτη, φυσικά εφόσον η συνάρτηση $A = f(t)$ είναι της μορφής (1.46). Βελτίωση της τεχνικής αυτής είναι ο προσδιορισμός περισσότερων σημείων στο αντίστοιχο διάγραμμα με τη χρήση μεθόδων όπως του πολλαπλού ιστογράμματος (multiple histogram method-[16]).

Η παραπάνω τεχνική όμως παρουσιάζει αρκετές δυσκολίες [16] που την καθιστούν ακατάλληλη για γενική χρήση.

- Για να δώσει σωστά και ακριβή αποτελέσματα απαιτείται η χρήση συστημάτων με μεγάλο αριθμό δομικών λίθων, έτσι ώστε η επίδραση του πεπερασμένου αριθμού των τελευταίων να είναι αμελητέα.
- Η διαδικασία εφαρμογής της προϋποθέτει τη γνώση του κρίσιμου σημείου και ιδιαίτερα της κρίσιμης θερμοκρασίας με μεγάλη ακρίβεια, αφού ένα μικρό σφάλμα στην τελευταία μπορεί να οδηγήσει σε μεγάλα σφάλματα στον υπολογισμό των κρίσιμων εκθετών. Βέβαια υπάρχουν και περιπτώσεις κατά τις οποίες το κρίσιμο σημείο είναι γνωστό από την αναλυτική λύση του προτύπου ή μπορεί να βρεθεί με τη χρήση κατάλληλων υπολογιστικών τεχνικών (π.χ. ο invaded-cluster αλγόριθμος Monte Carlo), όμως αυτές δεν είναι ο γενικός κανόνας.
- Το εξεταζόμενο φυσικό μέγεθος μπορεί να θεωρηθεί πως ικανοποιεί έναν απλό νόμο δύναμης μόνο σε μια ορισμένη περιοχή πολύ κοντά στο κρίσιμο σημείο του αντίστοιχου συστήματος (κρίσιμη περιοχή). Έξω από την τελευταία η γραφική παράσταση που προκύπτει παύει να είναι ευθεία σε σύστημα αξόνων με λογαριθμική κλίμακα. Η εύρεση της σωστής καμπύλης, συνεπώς και η τιμή που προκύπτει για τον εκάστοτε κρίσιμο εκθέτη, εξαρτάται από τον ακριβή προσδιορισμό αυτής της κρίσιμης περιοχής. Επιπλέον, υπάρχουν πολύπλοκα μοντέλα, όπως το πρότυπο Ising τυχαίου πεδίου (random-field Ising model), στα οποία η προαναφερθείσα μεθοδολογία οδηγεί σε δυο πιθανές τιμές για κάθε κρίσιμο εκθέτη, με ορθή εκείνη που αντιστοιχεί σε περιοχή πιο κοντά στο κρίσιμο σημείο. Οι συνέπειες τέτοιου είδους φαινομένων, γνωστών και ως φαινομένων

«διασταύρωσης» (“cross-over” effects), είναι πολύ δύσκολο να ελεγχθούν αν δεν είναι ήδη γνωστό σε ποιο ακριβώς σημείο αυτά συμβαίνουν.

Συνέπεια των προηγούμενων είναι προφανώς η ανάπτυξη και χρήση άλλων μεθοδολογιών για τον ακριβή αριθμητικό υπολογισμό κρίσιμων εκθετών από θεωρητικά, υπολογιστικά και πειραματικά δεδομένα. Τέτοιες μέθοδοι είναι η επανακανονικοποίηση Monte Carlo και η κλιμάκωση πεπερασμένου μεγέθους (finite-size scaling), με την οποία θα ασχοληθούμε στη συνέχεια. Το σκεπτικό της στηρίζεται στους ορισμούς των κρίσιμων εκθετών (1.56)- (1.59), από τους οποίους συνάγεται ότι [7], [16]

$$t \sim \xi^{-\frac{1}{\nu}} \quad (2.58),$$

$$\chi_T \sim \xi^{\frac{\gamma}{\nu}} \quad (2.59).$$

Σε ένα πεπερασμένο σύστημα χαρακτηριστικού μήκους L περιμένουμε το μήκος συσχέτισης ξ να είναι το ίδιο με αυτό του αντίστοιχου άπειρου συστήματος. Σε συνθήκες μακριά από το κρίσιμο σημείο του τελευταίου, οπότε $\xi \ll L$, περιμένουμε να ισχύουν και για τα φυσικά μεγέθη του πεπερασμένου συστήματος σχέσεις της μορφής (2.58). Όταν όμως πλησιάζουμε στο κρίσιμο σημείο το μήκος συσχέτισης ξ υπερβαίνει το L , συνεπώς οι τιμές των αντίστοιχων φυσικών μεγεθών εξαρτώνται πλέον από το L .

Οι παραπάνω παρατηρήσεις δηλώνουν ότι οι αποκλίσεις της συμπεριφοράς των πεπερασμένων συστημάτων από εκείνη των άπειρων πιθανόν καθορίζεται μόνο από το λόγο $\frac{L}{\xi}$. Έτσι η ισόθερμη επιδεικτικότητα χ_T (ανά δομικό λίθο) για μηδενικό εξωτερικό πεδίο H θα ικανοποιεί μια σχέση της μορφής

$$\chi_T \sim \xi^{\frac{\gamma}{\nu}} \chi_{T,0} \left(\frac{L}{\xi} \right) \quad (2.60),$$

όπου

$$\chi_{T,0} \left(\frac{L}{\xi} \right) = \begin{cases} \text{σταθ.}, & \text{αν } \xi \ll L \\ \chi_0 \left(\frac{L}{\xi} \right)^{\frac{\gamma}{\nu}}, & \chi_0 = \text{σταθ.}, \text{ αν } \xi > L \end{cases} \quad (2.61).$$

Κάτι τέτοιο δηλώνει όμως πως η ισόθερμη επιδεικτικότητα χ_T είναι γενικευμένη ομογενής συνάρτηση των μεταβλητών L και ξ . Αν θυμηθούμε την έκφραση (1.57), όπου την ανηγμένη θερμοκρασία t τη δίνει ο τύπος (1.51) και T_c η κρίσιμη θερμοκρασία του αντίστοιχου άπειρου συστήματος, προκύπτει με πράξεις πως

$$\chi_{T,L} = L^{\frac{\gamma}{\nu}} \tilde{\chi}_{T,0} \left(t L^{\frac{1}{\nu}} \right) \quad (2.62).$$

Με παρόμοιο τρόπο προκύπτουν οι αντίστοιχες εκφράσεις και για άλλες φυσικές ποσότητες, όπως η παράμετρος τάξης A (ανά δομικό λίθο) και η θερμοχωρητικότητα υπό σταθερό εξωτερικό πεδίο H (ανά δομικό λίθο)

$$A_L = L^{\frac{\beta}{\nu}} \tilde{A}_0 \left(t L^{\frac{1}{\nu}} \right) \quad (2.63),$$

$$c_{H,L} = L^{\frac{\gamma}{\nu}} \tilde{c}_{H,0} \left(t L^{\frac{1}{\nu}} \right) \quad (2.64).$$

Τα προαναφερθέντα δε συνιστούν βέβαια επαρκή τεκμηρίωση της μεθόδου της πεπερασμένης κλιμάκωσης. Κάτι τέτοιο μπορεί να γίνει στα πλαίσια των θεωριών επανακανονικοποίησης (renormalization) και ιδιαίτερα της φαινομενολογικής επανακανονικοποίησης (phenomenological renormalization) του Nightingale ([11], [17], [18]). Η λεπτομερής παρουσίασή τους δεν προβλέπεται στα πλαίσια της εργασίας μας, από αυτές όμως προκύπτει ότι η ελεύθερη ενέργεια κατά Gibbs g_L (ανά δομικό λίθο) ενός πεπερασμένου συστήματος χαρακτηριστικής διάστασης L γράφεται κατά προσέγγιση στη μορφή

$$g_L(T, h) = L^{\theta(\alpha-2)} \tilde{g}(t L^{\theta}, h L^{\theta\beta+\theta\gamma}) \quad (2.65).$$

Αν θυμηθούμε τώρα τους τύπους της θερμοδυναμικής (1.7), (1.8), (1.10) και την ισότητα (2.21) έχουμε για ένα μαγνητικό σύστημα

$$m_L = L^{\theta(\alpha+\beta+\gamma-2)} \tilde{m}_0(t L^{\theta}, h L^{\theta\beta+\theta\gamma}) \quad (2.66)$$

$$\Leftrightarrow m_L = L^{-\beta\theta} \tilde{m}_0(t L^{\theta}, h L^{\theta\beta+\theta\gamma}) \quad (2.67),$$

$$\chi_{T,L} = L^{\gamma\theta} \tilde{\chi}_{T,0}(t L^{\theta}, h L^{\theta\beta+\theta\gamma}) \quad (2.68),$$

$$c_{H,L} = L^{\alpha\theta} \tilde{c}_{H,0}(t L^{\theta}, h L^{\theta\beta+\theta\gamma}) \quad (2.69),$$

$$T_L^* = T_c (1 + x_{0T} L^{-\theta}) \quad (2.70),$$

$$H_L^* = H_c (1 + x_{0H} L^{-\theta\beta - \theta\gamma}) \quad (2.71),$$

όπου x_{0T} , x_{0H} το ακρότατο της περισπώμενης συνάρτησης του αντίστοιχου μεγέθους (μέγιστο ή ελάχιστο). Οι περισπώμενες συναρτήσεις ονομάζονται συναρτήσεις κλιμάκωσης (scaling functions) ενώ τα ορίσματά τους ανακλιμακωμένες ή αλλιώς κλιμακωμένες (scaled) μεταβλητές. Η μορφή των συναρτήσεων αυτών για κάθε φυσικό μέγεθος διαφοροποιείται γενικά για $t > 0$ και για $t < 0$. Ο εκθέτης θ για τα περισσότερα συστήματα προκύπτει [16]

$$\theta = \frac{1}{\nu} \quad (2.72).$$

Ας έχουμε υπόψη μας ότι για αλλαγές φάσης πρώτου είδους ισχύουν τα προαναφερθέντα, όμως τότε οι εκθέτες του L παίρνουν τιμή ίση με τη διάσταση d του πλέγματος [24].

Η εφαρμογή της μεθόδου της πεπερασμένης κλιμάκωσης συνίσταται στον υπολογισμό της αντίστοιχης συνάρτησης κλιμάκωσης του φυσικού μεγέθους που μελετάμε (τύποι (2.62),(2.63),(2.64) ή (2.66),(2.68),(2.69), (2.70), (2.71)) για διάφορες τιμές της L και έπειτα στην κατάλληλη επιλογή των εκθετών α , β , γ , θ ώστε η συνάρτηση κλιμάκωσης να είναι ίδια για κάθε L . Συνήθως ξεκινάμε με τον εύρεση της κρίσιμης θερμοκρασίας T_c αν γνωρίζουμε την ψευδοκρίσιμη θερμοκρασία του αντίστοιχου πεπερασμένου συστήματος ως προς κάποιο φυσικό μέγεθος για μεγάλο αριθμό χαρακτηριστικών διαστάσεων L (το ακρότατο x_0 της συνάρτησης κλιμάκωσης του αντίστοιχου μεγέθους προφανώς είναι ίδιο για κάθε τιμή του L). Στην περίπτωση αυτή στηρίζομαστε στη σχέση κλιμάκωσης (2.70).

Εφαρμόζοντας την ήδη γνωστή τεχνική της προεκβολής (extrapolation) υπολογίζουμε την κρίσιμη θερμοκρασία T_c , τον εκθέτη θ και τα αντίστοιχα σφάλματα. Κατόπιν, αξιοποιώντας το γεγονός ότι η συνάρτηση κλιμάκωσης $\tilde{x}_0$ ενός φυσικού μεγέθους x είναι ανεξάρτητη της χαρακτηριστικής διάστασης L του πλέγματος, παριστάνουμε γραφικά σε λογαριθμική κλίμακα μια από τις συναρτήσεις (2.61),(2.62) ή (2.63), οπότε οι υπόλοιποι κρίσιμοι εκθέτες και τα σφάλματά τους προκύπτουν με τη γνωστή μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων. Η παραπάνω διαδικασία, αν και φαίνεται απλή, προϋποθέτει ακριβή γνώση της θέσης και της τιμής του ακρότατου του εξεταζόμενου φυσικού μεγέθους για πολλές τιμές του L . Υπάρχουν βέβαια και άλλοι πιο πολύπλοκοι τρόποι εφαρμογής της κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους [14], οι οποίοι επιτρέπουν μεγαλύτερη ακρίβεια. Κάποιες φορές μάλιστα, για μικρές τιμές του L ,

χρειάζεται να ληφθούν υπόψη διορθωτικοί όροι, αφού οι σχέσεις (2.61)- (2.69) ισχύουν κατά προσέγγιση [17], [18].

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3: ΤΟ ΠΡΟΤΥΠΟ BAXTER-WU

3.1 Γενικά για το πρότυπο *Baxter-Wu*

Το βασικό αντικείμενο αυτής της εργασίας είναι η μελέτη των αλλαγών φάσης του προτύπου των Baxter και Wu. Κρίνεται λοιπόν αναγκαία μια σύντομη εισαγωγή στα κύρια χαρακτηριστικά του και στις μέχρι τώρα γνώσεις μας για αυτό. Στο κεφάλαιο που ακολουθεί όμως πέρα από τα ιδιαίτερα χαρακτηριστικά του συγκεκριμένου μοντέλου και τις φυσικές του εφαρμογές, γίνεται εκτενής αναφορά στη φαινομενολογική θεωρία για τις κατανομές μαγνήτισης και ενέργειας που εισήγαγαν με τις εργασίες τους οι Kurt Binder, David Landau και Murty Challa τη δεκαετία του 1980 ([22], [23], [24]), αρχικά για το απλό πρότυπο Ising. Ο βασικός λόγος για τούτο είναι πως στα πλαίσια αυτής μπορούμε να ερμηνεύσουμε ικανοποιητικά τα αποτελέσματα της κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους (Finite-Size Scaling) του προτύπου αλλά και να διακρίνουμε με σαφήνεια τις αλλαγές φάσης του, ιδιαίτερα αν αξιοποιήσουμε ορισμένους στατιστικούς σωρευτές (cumulants) που οι παραπάνω επιστήμονες πρότειναν. Με αυτά ακριβώς τα θέματα θα ασχοληθούμε στο μεγαλύτερο μέρος της παρούσας διδακτορικής διατριβής.

Το πρότυπο Baxter-Wu ένα τροποποιημένο spin-1/2 μοντέλο Ising με τριπλή αλληλεπίδραση πρώτων γειτόνων ([25], [26], [27], [28], [29]). Με άλλα λόγια οι θεωρούμενες spin- μαγνητικές ροπές σ_i μπορούν να πάρουν μόνο δυο αντίθετες τιμές, τις ± 1 , καταλαμβάνουν τα πλεγματικά σημεία ενός δισδιάστατου τριγωνικού πλέγματος και αλληλεπιδρούν ανά τρεις εφόσον βρίσκονται στις κορυφές της ίδιας θεμελιώδους κυψελίδας («πρώτοι γείτονες»). Αν θεωρήσουμε επιπλέον και την ύπαρξη ενός εξωτερικού πεδίου H , μετρημένο σε μονάδες J_{B} , όπου μ_{B} η μαγνητόνη του Bohr (για απλότητα λαμβάνεται ίση με 1), τότε η Χαμιλτονιανή $\mathcal{H}$ του συστήματος γράφεται ως εξής:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ijk \rangle} \sigma_i \sigma_j \sigma_k - H \sum_i \sigma_i \quad (3.1),$$

όπου το άθροισμα υπολογίζεται για όλα τα τρίγωνα που σχηματίζουν οι άμεσα γειτονικές κορυφές του τριγωνικού πλέγματος και

$$\sigma_i \sigma_j \sigma_k = \pm 1 \quad (3.2).$$

Το παραπάνω μοντέλο είναι μια ειδική περίπτωση ($J_{\text{B}} = 0$) ενός πιο γενικευμένου μοντέλου που προτάθηκε από τους Wood και Griffiths [30], όπου λαμβάνεται υπόψη όχι μόνο η προαναφερθείσα τριπλή αλληλεπίδραση αλλά και οι αλληλεπιδράσεις ζευγών άμεσα γειτονικών μαγνητικών ροπών του συνηθισμένου προτύπου Ising ([31],[32],[33]), δηλαδή

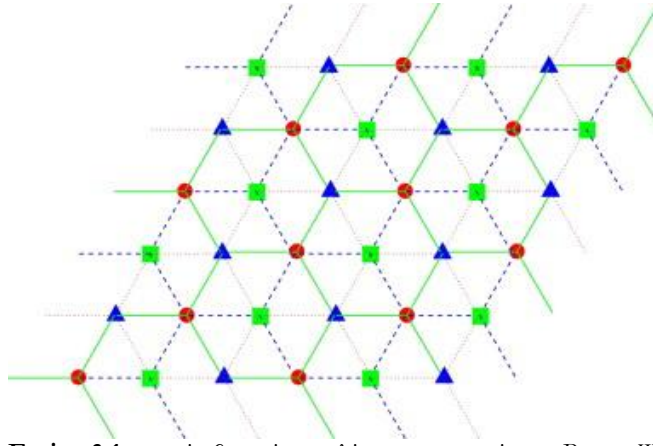
$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ijk \rangle} \sigma_i \sigma_j \sigma_k - J_b \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i \quad (3.3).$$

Με τη βοήθεια της σχέσης (1.22), στην περίπτωση που ισχύει η (3.1) και $H = 0$ η συνάρτηση επιμερισμού γράφεται στη μορφή

$$Z = \sum_{i,j,k} \exp \left(-\beta J \sum_i \sigma_i \sigma_j \sigma_k \right) \quad (3.4),$$

όπου το β δίνεται από τον τύπο (1.20).

Το πιο ενδιαφέρον στοιχείο [29] του προτύπου Baxter-Wu είναι η απουσία της παγκόσμιας συμμετρίας πάνω-κάτω αντιστροφής όλων των μαγνητικών ροπών που παρατηρείται στο απλό spin-1/2 πρότυπο Ising με αλληλεπίδραση πρώτων γειτόνων απουσία εξωτερικού πεδίου ([31], [32], [33]). Εμφανίζει όμως ημιπαγκόσμιες (semi-global) συμμετρίες. Το τριγωνικό πλέγμα μπορεί να χωριστεί σε τρία υποπλέγματα (βλέπε εικόνα 3.1) έτσι ώστε οι τρεις μαγνητικές ροπές κάθε θεμελιώδους τριγωνικής κυψελίδας να μπορεί να θεωρηθεί ότι ανήκουν σε διαφορετικό υπόπλεγμα [29]. Η Χαμιλτονιανή (3.2) απουσία εξωτερικού πεδίου H παραμένει αμετάβλητη αν αναστραφούν οι μαγνητικές ροπές δύο οποιονδήποτε από τα παραπάνω υποπλέγματα και οι μικροκαταστάσεις που προκύπτουν έχουν την ίδια ενέργεια και πιθανότητα με την αρχική.



Εικόνα 3.1: τα τρία βασικά υποπλέγματα στο πρότυπο Baxter-Wu.

Συνεπώς η θεμελιώδης ενεργειακή κατάσταση του προτύπου παρουσιάζει τετραπλό ενεργειακό εκφυλισμό για $H = 0$. Περιλαμβάνει μια θεμελιώδη σιδηρομαγνητική κατάσταση στην οποία όλες οι μαγνητικές ροπές έχουν τιμή $+1$ και τρεις ισοδύναμες θεμελιώδεις σιδηρομαγνητικές καταστάσεις στις οποίες οι μαγνητικές ροπές ενός μόνο από τα τρία θεωρούμενα υποπλέγματα έχουν τιμή $+1$ ενώ οι υπόλοιπες -1 . Έτσι έχουμε [29]

$$\varepsilon = -2J \text{ και } m = 1 \text{ (θεμελιώδης σιδηρομαγνητική κατάσταση)} \quad (3.5),$$

$$\varepsilon = -2J \text{ και } m = -\frac{1}{3} \text{ (θεμελιώδεις σιδηριμαγνητικές καταστάσεις)} \quad (3.6),$$

δηλαδή η μαγνήτιση (ανά δομικό λίθο) της θεμελιώδους σιδηρομαγνητικής κατάστασης είναι $+1$ ενώ καθεμιάς από τις θεμελιώδεις σιδηριμαγνητικές καταστάσεις είναι $-\frac{1}{3}$. Για ευκολία, στη συνέχεια η θεμελιώδης σιδηρομαγνητική κατάσταση θα συμβολίζεται με $(++)$, ενώ καθεμιά από τις τρεις σιδηριμαγνητικές με $(+-)$, $(-+)$ και $(--)$.

Το ενδιαφέρον για πρότυπα με πολλαπλή αλληλεπίδραση μαγνητικών ροπών, όπως αυτό των Baxter-Wu, εντάθηκε από την περίοδο 1971- 1972, οπότε ο Baxter έλυσε αναλυτικά μοντέλο των οκτώ κορυφών (eight vertex-model) σε δυο διαστάσεις απουσία εξωτερικού πεδίου H [29]. Λίγο αργότερα επιλύθηκε από τους Baxter και Wu το ομώνυμο πρότυπο στις ίδιες συνθήκες, είτε αντιμετωπιζόμενο σαν υποπερίπτωση του μοντέλου των οκτώ κορυφών είτε με άλλες αναλυτικές μεθόδους ([27], [29]). Έτσι βρέθηκε ότι παρουσιάζει κρίσιμη αλλαγή φάσης απουσία εξωτερικού πεδίου για θερμοκρασία ίδια με αυτήν του δισδιάστατου spin-1/2 προτύπου Ising με αλληλεπίδραση πρώτων γειτόνων, δηλαδή

$$\beta_c = \frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})} \approx 2,269 \quad (3.7).$$

Υπολογίστηκε ακόμα [26], [27], [28] η αναλυτική έκφραση της συνάρτησης της μαγνήτισης ως προς τη θερμοκρασία με $H = 0$ και βρέθηκαν οι τιμές των κρίσιμων εκθετών α , β , γ , δ , η και ν , από όπου προέκυψε ότι η αντίστοιχη «Κλάση Παγκοσμιότητας» (“Universality Class”) είναι αυτή του μοντέλου Potts δύο διαστάσεων και τεσσάρων καταστάσεων και όχι αυτή του δισδιάστατου spin-1/2 προτύπου Ising με αλληλεπίδραση πρώτων γειτόνων [6]. Ωστόσο, από αυτό απουσιάζουν οι λογαριθμικές διορθώσεις [34] που δυσκολεύουν τη μελέτη του μοντέλου Potts δύο διαστάσεων και τεσσάρων καταστάσεων. Η απουσία αυτή ερμηνεύτηκε θεωρητικά από τους Alcaraz και Xavier [35], [36] με τη βοήθεια των σύμμορφων αναλλοίωτων (conformal invariance). Επιπλέον, βρέθηκε [29] ότι για $T < T_c$ και $H = 0$ το πρότυπο Baxter-Wu παρουσιάζει αλλαγή φάσης 1^{ης} τάξης μεταξύ των σιδηριμαγνητικών καταστάσεων $(+-)$, $(-+)$ ή $(--)$ και της σιδηρομαγνητικής $(++)$. Η καμπύλη αλλαγής φάσης 1^{ης} τάξης συμπίπτει με τον κατακόρυφο άξονα $H = 0$, ξεκινώντας από το απόλυτο μηδέν ($T = 0$) και τερματίζοντας στην κρίσιμη θερμοκρασία T_c .

Άλλοι πάλι ερευνητές χρησιμοποίησαν αριθμητικές μεθόδους Monte Carlo για να μελετήσουν τη συμπεριφορά του είτε στην καθαρή του μορφή είτε όταν

εισάγονται προσμίξεις ([37], [38], [39], [40], [101], [42], [43], [44], [45], [46], [47]). Το 2010 δημοσιεύτηκε από την ερευνητική ομάδα του Deng [48] επιστημονική εργασία που αφορούσε τη συμπεριφορά του γενικότερου προτύπου με Χαμιλτονιανή της μορφής

$$\mathcal{H} = -J_{\Delta}^I \sum_{\langle ijk \rangle, \Delta} \sigma_i \sigma_j \sigma_k - J_{\nabla}^I \sum_{\langle ijk \rangle, \nabla} \sigma_i \sigma_j \sigma_k \quad (3.8),$$

απουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, όπου οι σταθερές σύζευξης J_{Δ}^I , J_{∇}^I διαφέρουν ανάλογα με το αν αναφερόμαστε σε «πάνω» (Δ) ή σε «κάτω» (∇) τριγωνα. Σε αυτήν δείχτηκε ότι όταν ο λόγος των σταθερών σύζευξης $\frac{J_{\Delta}^I}{J_{\nabla}^I}$ διαφέρει από τη μονάδα, η παρουσιαζόμενη αλλαγή φάσης είναι ασυνεχής (1^{ης} τάξης).

Παράλληλα με τις μελέτες του παραπάνω προτύπου απουσία μαγνητικού πεδίου, δημοσιεύτηκαν εργασίες για τη συμπεριφορά του υπό την επίδραση εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Από την εξίσωση (3.1) είναι εύκολο να διαπιστώσει κανείς πως οι σιδηριμαγνητικές καταστάσεις $(+ - -)$, $(- + -)$ και $(- - +)$ είναι ενεργειακά προτιμητέες για $T = 0$ και $-6 < H < 0$. Αν το αρνητικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο υπερβαίνει κατά απόλυτη τιμή το -6 , χαμηλότερης ενέργειας και επομένως ενεργειακά προτιμητέα είναι η κατάσταση με όλες τις spin- μαγνητικές ροπές αρνητικές, δηλαδή η $(- - -)$. Συνεπώς, αναμένεται να λαμβάνει χώρα αλλαγή φάσης για $T = 0$ και $H = -6$, ενώ για $T > 0$ προφανώς αυτή η αλλαγή φάσης θα λαμβάνει χώρα για διαφορετικές τιμές του μαγνητικού πεδίου. Έτσι προκύπτει μια φασική γραμμή στο επίπεδο T - H (απόλυτης θερμοκρασίας- εξωτερικού μαγνητικού πεδίου) μεταξύ της $(- - -)$ κατάστασης και των αντίστοιχων σιδηριμαγνητικών.

Το μεγαλύτερο μέρος των επιστημονικών ερευνών παρουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου αφορά το γενικευμένο πρότυπο των Wood και Griffiths [30], το οποίο περιγράφεται όπως είδαμε από τη Χαμιλτονιανή (3.3). Η παρουσία μόνο τριπλών αλληλεπιδράσεων, δηλαδή το απλό πρότυπο Baxter-Wu, εξετάζεται απλώς σαν μια ειδική περίπτωση. Στα 1976, ο Froyen και οι συνεργάτες του [49] προσπάθησαν να αποδώσουν το πλήρες διάγραμμα φάσεων του μοντέλου Baxter-Wu, βασιζόμενοι στα αποτελέσματα των Θεωριών Μέσου Πεδίου, ενώ, το 1981, οι Dóczy-Réger και Hemmer [50] επανέλαβαν την παραπάνω εργασία χρησιμοποιώντας θεωρία αλληλεπιδράσεων (interface theory). Περίπου την ίδια εποχή, ο ερευνητής Α. Μαλάκης ([51], [52]) έδωσε ένα ακριβέστερο φασικό διάγραμμα, στηριγμένος στην μέθοδο παραλλαγής (variational approximation). Ακολούθησε η αριθμητική εργασία των Chin και Landau στα 1987 [53], η οποία, με τη βοήθεια προσομοίωσης Monte Carlo βασισμένης σε τυπικό αλγόριθμο απλής αναστροφής spin, έδωσε ένα πλήρες και ακριβέστερο φασικό διάγραμμα, δείχνοντας επιπλέον ότι η προσέγγιση μέσου πεδίου ήταν ανακριβής όχι μόνο ποσοτικά αλλά και ποιοτικά. Από την άλλη, τα

άλλα δυο προαναφερθέντα διαγράμματα ήταν μεν ποιοτικά σωστά, παρουσίαζαν όμως σημαντικές διαφορές τόσο από τα αποτελέσματα της προσομοίωσης Monte Carlo όσο και μεταξύ τους. Σχετικά πρόσφατα, οι Tsai, Wang και Landau ([54], [55], [56]), χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο Wang- Landau Εντροπικής Δειγματοληψίας (Entropic Sampling), έδωσαν ένα πλήρες διάγραμμα φάσεων του γενικευμένου μοντέλου των Wood και Griffiths, υπολογίζοντας και τους αντίστοιχους κρίσιμους εκθέτες και δείχνοντας ότι τα κρίσιμα σημεία που βρίσκονται στην αριστερή φασική γραμμή (βλέπε διάγραμμα 3.1) ανήκουν όλα στην ίδια Κλάση Παγκοσμιότητας (μοντέλο Potts δυο διαστάσεων και τριών καταστάσεων), ενώ το κρίσιμο σημείο στο οποίο τερματίζεται η γραμμή ασυνεχών αλλαγών φάσης σε άλλη (διδιάστατο πρότυπο Ising), ωστόσο αγνόησαν εντελώς τη συμπεριφορά του απλούστερου μοντέλου Baxter-Wu.

Η επιλογή της παραμέτρου τάξης του μοντέλου Baxter-Wu αποτελεί επίσης ένα σημείο προβληματισμού μεταξύ των επιστημόνων. Ορισμένοι, όπως οι Santos και Figueiredo [42] επέλεξαν την απόλυτη τιμή της συνολικής μαγνητικής ροπής (ανά δομικό λίθο) ολόκληρου του πλέγματος $|\mathbf{m}|$, όπως και στο σιδηρομαγνητισμό. Άλλοι πάλι (όπως οι M.A. Novotny και D.P. Landau- [38], [39], [40]) διάλεξαν ως παράμετρο τάξης τα τετράγωνα ή τις απόλυτες τιμές των συνολικών μαγνητικών ροπών (ανά δομικό λίθο) για καθένα από τα τρία προαναφερθέντα υποπλέγματα. Τόσο η συμμετρία του συστήματος όσο και οι αριθμητικοί υπολογισμοί υποδεικνύουν ότι απουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου η μέση τιμή της (σιδηρομαγνητικής) παραμέτρου τάξης στην πρώτη περίπτωση μεταβάλλεται σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας με τον ίδιο τρόπο που μεταβάλλεται και η αντίστοιχη μέση τιμή για τη σιδηρομαγνητική κατάσταση, δηλαδή είναι $-\frac{1}{3}\mathbf{m}_{sp}$ αν για την αντίστοιχη σιδηρομαγνητική

κατάσταση είναι $\mathbf{m}_{sp}$. Αυτές οι τιμές δείχνουν να αντιστοιχούν σε καταστάσεις που προκύπτουν από αυθόρμητο σπάσιμο συμμετρίας, όπως στο spin-1/2 πρότυπο Ising με αλληλεπίδραση πρώτων γειτόνων.

Οι παραπάνω επιλογές όμως έχουν νόημα μόνο για $\mathbf{H} = 0$. Παρουσία αρνητικού εξωτερικού μαγνητικού πεδίου τα πράγματα διαφέρουν. Ο λόγος είναι ότι καμιά από τις παραπάνω προτεινόμενες παραμέτρους τάξης δε μηδενίζεται στις φάσεις $(+ - -)$ ή $(- - -)$. Για να αντιμετωπίσουν το πρόβλημα αυτό, οι Tsai, Wang και Landau ([54], [55], [56]) προσδιόρισαν μια «διανυσματική» παράμετρο τάξης $\mathcal{P}$ όμοια με αυτή που χρησιμοποιείται για το $q = 3$ διδιάστατο μοντέλο Potts. Αν $\mathbf{m}_1, \mathbf{m}_2, \mathbf{m}_3$ είναι οι μαγνητίσεις ανά πλεγματοειδές σημείο για καθένα από τα τρία υποπλέγματα, αυτή η παράμετρος τάξης θα δίνεται από τη σχέση

$$\mathcal{P} = \sqrt{\mathcal{P}_1^2 + \mathcal{P}_2^2} \quad (3.9),$$

όπου

$$\mathcal{P}_1 = \frac{1}{2} \left(m_1 - \frac{m_2 + m_3}{2} \right) \quad (3.10),$$

$$\mathcal{P}_2 = \frac{\sqrt{3}}{4} (m_2 - m_3) \quad (3.11).$$

Η παράμετρος τάξης $\mathcal{P}$ είναι μηδέν για τις καταστάσεις (+ + +) και (− − −) ενώ είναι μονάδα για τις σιδηριμαγνητικές.

3.2 Φυσική σημασία και εφαρμογές του προτύπου *Baxter-Wu*

Το πρότυπο Baxter-Wu εισήχθη ως ένα απλουστευμένο δισδιάστατο πρότυπο για την περιγραφή της κρίσιμης συμπεριφοράς, με κύριο πλεονέκτημα τη δυνατότητα ακριβούς επίλυσής του ως προς ορισμένα χαρακτηριστικά του μεγέθους απουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου[29]. Εκτεταμένες αναλυτικές μελέτες και υπολογιστικές προσομοιώσεις έδειξαν ότι η συμπεριφορά του στην περίπτωση αυτή ανήκει στην κλάση παγκοσμιότητας των μοντέλων Potts δυο διαστάσεων και τεσσάρων καταστάσεων[6]. Σημαντικό πλεονέκτημά του σε σχέση με τα αντίστοιχα μοντέλα Potts είναι ότι δεν παρουσιάζει λογαριθμικές διορθώσεις κατά τον υπολογισμό κρίσιμων εκθετών [34]. Ωστόσο, η φυσική του σημασία είναι συζητήσιμη

Γενικά, πρόκειται για ένα απλουστευμένο πρότυπο σιδηριμαγνητισμού, το οποίο θα μπορούσε να περιγράψει μεταβάσεις φάσης σιδηριμαγνητών με ισχυρά ανισότροπη συμπεριφορά, πλην όμως δεν έχει εντοπιστεί ως τώρα κάποιο σχετικό φυσικό μαγνητικό υλικό ή κράμα μετάλλων, αφού οι κύριες αλληλεπιδράσεις στα μαγνητικά συστήματα είναι μεταξύ ζευγών spin. Με τριπλές αλληλεπιδράσεις συνενώνονται ως γνωστόν και τα quark για να σχηματίσουν αδρόνια, πλην όμως η σχετική έρευνα έχει δείξει ότι και εδώ ο παράγοντας διάσταση παίζει καθοριστικό ρόλο, με αποτέλεσμα ούτε και τέτοια συστήματα να ανήκουν στην αντίστοιχη κλάση παγκοσμιότητας. Πιστεύεται όμως ότι κατάλληλες γενικεύσεις αυτού του προτύπου θα μπορούσαν να περιγράψουν και τέτοια συστήματα ([57], [58]).

Το μοντέλο Baxter-Wu έχει ως τώρα χρησιμοποιηθεί για την περιγραφή της συμπεριφοράς εδροκεντρωμένων κυβικών κρυσταλλικών επιφανειών. Μέχρι στιγμής έχουν βρεθεί τουλάχιστον τρία δισδιάστατα φυσικά συστήματα των οποίων η κρίσιμη αλλαγή φάσης θα μπορούσε να περιγραφεί με τη βοήθεια του προτύπου αυτού. Πρόκειται για τη χημική προσρόφηση O (p- 2×2) από Ni (111)[59], O από Ru (0001)[60] και H (2H- 2×2) από Ni (111) [61], πλην όμως η συστηματική πειραματική μελέτη τέτοιων συστημάτων παρουσιάζει σοβαρές δυσκολίες, με αποτέλεσμα λίγες σχετικές εργασίες να έχουν δημοσιευτεί. Σημειώνουμε μάλιστα ότι σχετικές πειραματικές μελέτες παρουσία «μαγνητικού πεδίου» (χημικού δυναμικού) δε φαίνεται να έχουν γίνει ακόμα. Φυσικά, στην

περίπτωση αυτή η Χαμιλτονιανή (3.1) πρέπει να αντικατασταθεί από την ισοδύναμη για πλέγμα- αέριο (lattice-gas) [53]

$$\mathcal{H}_{\mathcal{LG}} = -\varepsilon_t \sum_{\langle i,j,k \rangle} \mathbf{c}_i \mathbf{c}_j \mathbf{c}_k - (\varepsilon_b + \mu) \sum_i \mathbf{c}_i + \mu N_a \quad (3.12),$$

όπου $\mathbf{c}_i$ η μεταβλητή κατάληψης μιας πλεγματοτικής θέσης (παίρνει τις τιμές 0 ή 1), ε_t η ενέργεια των τριπλών αλληλεπιδράσεων, N_a το πλήθος των ετεροατόμων στην προσρόφηση, ε_b η ενέργεια σύνδεσης των ετεροατόμων στην προσρόφηση και μ το χημικό δυναμικό, ενώ

$$N_a = \sum_i \mathbf{c}_i \quad (3.13).$$

Με βάση τα προαναφερθέντα και αφού το μαγνητικό πρότυπο Baxter-Wu στην κανονική συλλογή είναι ισοδύναμο με το αντίστοιχο πλέγμα- αέριο στη μεγαλοκανονική συλλογή [9], από την αντιστοίχιση των συναρτήσεων (3.1) και (3.11) προκύπτει ότι

$$\mathbf{c}_i = \frac{1 - \sigma_i}{2} \quad (3.14),$$

$$\mathbf{J} = \frac{\varepsilon_t}{4} \quad (3.15),$$

$$\mathbf{H} = \frac{(\varepsilon_b + \mu)}{2} - \frac{3\varepsilon_t}{4} \quad (3.16).$$

3.3 Η φαινομενολογική θεωρία του Binder για την κατανομή μαγνήτισης

Από τις αρχές της δεκαετίας του 1980 η γενίκευση της χρήσης προσομοιώσεων Monte Carlo στη λύση των προβλημάτων της στατιστικής φυσικής έδωσε πολλές πληροφορίες για μικροσκοπικές χαρακτηριστικές ποσότητες των συστημάτων που μέχρι τότε ήταν έξω από τις δυνατότητες μελέτης των υπόλοιπων μεθόδων. Μια από αυτές είναι η κατανομή της πιθανότητας $P(\mathbf{m})$ της συνολικής μαγνητικής ροπής $\mathbf{m}$ (ανά δομικό λίθο) ενός μαγνητικού συστήματος. Η κατανομή αυτή, αν και τις περισσότερες φορές δεν μπορεί να μετρηθεί απευθείας, δίνει πολύτιμες πληροφορίες, αφού συνδέει τη συνολική μαγνητική ροπή των διάφορων δυνατών μικροκαταστάσεων με τη μέση τιμή της και με τη μέση τιμή της απόλυτης τιμής της (μακροσκοπική μαγνήτιση-παράμετρος τάξης του συστήματος) για όλο το σύστημα. Επιπλέον, η μορφή της φαίνεται να αλλάζει δραματικά στη διάρκεια μιας αλλαγής φάσης.

Ο Kurt Binder, στηριζόμενος κυρίως σε αποτελέσματα προσομοιώσεων Monte Carlo για το spin-1/2 πρότυπο Ising με αλληλεπίδραση πρώτων γειτόνων [62], πρότεινε με δυο δημοσιεύσεις του το 1981 [22] και το 1984 [23] μια γενική φαινομενολογική θεωρία για την παραπάνω κατανομή όταν τα μαγνητικά συστήματα εμφανίζουν δυο είδη θεμελιωδών καταστάσεων. Σύμφωνα με αυτή για ένα τέτοιο πεπερασμένο σύστημα d χωρικών διαστάσεων και L^d πλεγματικών θέσεων η μορφή της $P(m)$ για οποιαδήποτε θερμοκρασία T διαφορετική από την κρίσιμη θερμοκρασία T_c (του αντίστοιχου άπειρου συστήματος) και εξωτερικό πεδίο H θα είναι, αν αγνοήσουμε την επίδραση των συνοριακών συνθηκών,

$$P_L(m) = \begin{cases} c_1 f_L^+(m) + c_2 f_L^-(m), & \text{αν } T < T_c \\ f_L^0(m), & \text{αν } T > T_c \end{cases} \quad (3.17),$$

με c_1, c_2 πραγματικές σταθερές τέτοιες ώστε να πληρείται η συνθήκη κανονικοποίησης (νορμαλισμού) της πιθανότητας

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P_L(m) dm = 1 \quad (3.18).$$

Οι συναρτήσεις $f_L^\pm(m), f_L^0(m)$ έχουν τη μορφή κανονικοποιημένων κατανομών Gauss, δηλαδή

$$f_L^\pm(m) = \sqrt{\frac{L^d}{2k_B \pi T \chi_{T,L}^\pm}} \exp \left[-\frac{(m \mp m_L^\pm - \chi_{T,L}^\pm H)^2 L^d}{2k_B T \chi_{T,L}^\pm} \right] \quad (3.19),$$

$$f_L^0(m) = \sqrt{\frac{L^d}{2k_B \pi T \chi_{T,L}}} \exp \left[-\frac{(m - \chi_{T,L} H)^2 L^d}{2k_B T \chi_{T,L}} \right] \quad (3.20).$$

Στους παραπάνω τύπους k_B είναι η σταθερά του Boltzmann, $\chi_{T,L}$ η ισόθερμη μαγνητική επιδεικτικότητα (ανά δομικό λίθο) όλου του πεπερασμένου συστήματος, η οποία δίνεται από την έκφραση

$$\chi_{T,L} = \frac{\partial \langle m \rangle_L}{\partial H} \quad (3.21),$$

$\chi_{T,L}^\pm$ οι μαγνητικές επιδεικτικότητες (ανά δομικό λίθο) για κάθε κατάσταση «σπασμένης» συμμετρίας και $m_L^\pm$ οι αντίστοιχες μακροσκοπικές αυθόρμητες μαγνητίσεις (ανά δομικό λίθο), φυσικά για το πεπερασμένο πλέγμα.

Προκύπτει επίσης ότι καθώς μεγαλώνει η διάσταση L του θεωρούμενου πεπερασμένου πλέγματος μπορούμε, με σχετικά μικρό σφάλμα, να αντικαταστήσουμε τις τιμές των $\mathbf{m}_L^\pm, \chi_{T,L}^\pm$ και $\chi_{T,L}$ με τα όριά τους καθώς το L απειρίζεται. Αν λοιπόν ισχύει

$$\lim_{L \rightarrow +\infty} \mathbf{m}_L^\pm = \mathbf{m}_{sp}^\pm \quad (3.22),$$

$$\lim_{L \rightarrow +\infty} \chi_{T,L}^\pm = \chi_T^\pm \quad (3.23),$$

$$\lim_{L \rightarrow +\infty} \chi_{T,L} = \chi_T \quad (3.24),$$

θα έχουμε

$$f_L^\pm(m) = \sqrt{\frac{L^d}{2k_B \pi T \chi_T^\pm}} \exp \left[-\frac{(m \mp \mathbf{m}_{sp}^\pm - \chi_T^\pm \mathbf{H})^2 L^d}{2k_B T \chi_T^\pm} \right] \quad (3.25),$$

$$f_L^0(m) = \sqrt{\frac{L^d}{2k_B \pi T \chi_T}} \exp \left[-\frac{(m - \chi_T \mathbf{H})^2 L^d}{2k_B T \chi_T} \right] \quad (3.26).$$

Τα παραπάνω σημαίνουν ότι η κατανομή πιθανότητας της συνολικής μαγνητικής ροπής ενός μαγνητικού συστήματος έχει τη μορφή κανονικής κατανομής (κατανομής Gauss) με κέντρο το σημείο $\chi_T \mathbf{H}$ για $T > T_c$ ενώ γράφεται σαν γραμμικός συνδυασμός τέτοιων κατανομών (όσων και τα είδη θεμελιωδών καταστάσεων) με κέντρα σημεία της μορφής $\pm \mathbf{m}_{sp}^\pm + \chi_T^\pm \mathbf{H}$ αν $T < T_c$. Στο κρίσιμο σημείο η αναλυτική μαθηματική έκφραση της συνάρτησης κατανομής δεν είναι γνωστή, όμως αποκλίνει τόσο από την κανονική ώστε να μην μπορεί να περιγραφεί με τον ανωτέρω τρόπο.

Στην άμεση γειτονιά του κρίσιμου σημείου για $L \rightarrow +\infty$ ο Kurt Binder [22], στηριγμένος και στα αποτελέσματα των θεωριών επανακανονικοποίησης (renormalization) [6], πρότεινε ότι η προαναφερθείσα κατανομή θα περιγράφεται από μια σχέση κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους της μορφής

$$P_L(m) = L^x p_c \tilde{P} \left(a_c m L^y, \frac{\xi}{L} \right) \quad (3.27),$$

όπου p_c και a_c είναι οι σταθερές που καθορίζουν τις κλίμακες των αντίστοιχων μεταβλητών, η $\tilde{P}(z, z')$ είναι μια παγκόσμια συνάρτηση κλιμάκωσης (scaling), ενώ οι εκθέτες x και y προσδιορίζονται παρακάτω. Εφαρμόζοντας τη συνθήκη κανονικοποίησης (3.18) προκύπτει ότι

$$x = y \quad (3.28),$$

και

$$p_c = \frac{a_c}{c_c} \quad (3.29),$$

με τη c_c να αποτελεί παγκόσμια σταθερά, η οποία δίνεται από τον τύπο

$$c_c = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{P}\left(u, \frac{\xi}{L}\right) du = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{P}(u, +\infty) du \quad (3.30).$$

Άλλοι ερευνητές επιχείρησαν να εξειδικεύσουν τη μορφή της (3.27) σε διάφορα μοντέλα, στηριγμένοι κυρίως στα αποτελέσματα προσομοιώσεων Monte Carlo. Έτσι οι Tsyripin και Blote ([63], [64], [65]) κατέληξαν στο συμπέρασμα ότι η κρίσιμη συμπεριφορά του spin-1/2 μοντέλου Ising, η Χαμιλτονιανή του οποίου είναι η (2.30), περιγράφεται από την κατανομή πιθανότητας

$$\tilde{P}(\psi) = A \exp \left[- \left(\frac{\psi^2}{\psi_0^2} - 1 \right)^2 \left(\frac{a\psi^2}{\psi_0^2} + c \right) \right] \quad (3.31).$$

Στον παραπάνω τύπο ισχύει

$$\psi = m L^{\frac{p}{v}} \quad (3.32),$$

ενώ οι παράμετροι ψ_0 , A και c είναι σταθερές κλιμάκωσης (scale-invariant).

Επιπλέον, ο Kurt Binder υπολόγισε και ορισμένους σωρευτές (cumulants- βλέπε- [22], [23]), η αναλυτική έκφραση των οποίων για μοντέλα τύπου Ising προκύπτει από την απαίτηση η αντίστοιχη Χαμιλτονιανή να παίρνει μακριά από το κρίσιμο σημείο τη μορφή που προβλέπει η θεωρία μέσου πεδίου των Ginsburg, Landau και Wilson [3], δηλαδή

$$\mathcal{H}_{GLW}(s_i) = \sum_i (h_L s_i + r_L s_i^2 + u_L s_i^4 + v_L s_i^6 + \dots) + \sum_{\langle i,j \rangle} \langle m^4 \rangle_L^{con} (s_i - s_j)^2 + \dots \quad (3.33).$$

Από αυτούς ο σπουδαιότερος εξαιτίας των πληροφοριών που παρέχει για τη μορφή της κατανομής $P_L(m)$ είναι ο ανηγμένος σωρευτής 4^{ης} τάξης (4th order reduced cumulant) U_L του K. Binder, ο οποίος δίνεται από τον τύπο

$$U_L = -\frac{\langle m^4 \rangle_L^{con}}{3\langle m^2 \rangle_L^2} \quad (3.34),$$

όπου

$$\langle m^4 \rangle_L^{con} = \langle m^4 \rangle_L - 3\langle m^2 \rangle_L^2 - 4\langle m \rangle_L \langle m^3 \rangle_L + 12\langle m^2 \rangle_L \langle m \rangle_L^2 - 6\langle m \rangle_L^4 \quad (3.35),$$

όπου ο συμβολισμός “con” σημαίνει “conventional”, δηλαδή «συμβατικός» [23]. Στην περίπτωση που έχουμε μηδενικό εξωτερικό πεδίο τις ίδιες πληροφορίες μας δίνει και ένας απλούστερος ανηγμένος σωρευτής, ο U_{L0}

$$U_{L0} = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3\langle m^2 \rangle_L^2} \quad (3.36).$$

Είναι προφανές ότι για $H = 0$ και $L \rightarrow +\infty$ θα ισχύει

$$U_{L0} = U_L \quad (3.37).$$

Ο αναλυτικός υπολογισμός του ανηγμένου σωρευτή 4^{ης} τάξης του K. Binder από τον τύπο της $P_L(m)$ απαιτεί συνήθως πολλές και δύσκολες αριθμητικές πράξεις. Από τη στατιστική γνωρίζουμε ότι αν έχουμε μια κατανομή πιθανότητας όπως η $P_L(m)$ τότε η k -τάξης ροπή αυτής της κατανομής ως προς την αρχή των αξόνων θα δίνεται από τη σχέση

$$\langle m^k \rangle_L = \int_{-\infty}^{+\infty} m^k P_L(m) dm \quad (3.38).$$

Η ροπή 1^{ης} τάξης στην περίπτωσή μας δεν είναι άλλη από τη μέση τιμή της συνολικής μαγνητικής ροπής ανά δομικό λίθο του συστήματος, η οποία ορίζεται και μέσω της σχέσης (1.26) της στατιστικής φυσικής. Επειδή το ολοκλήρωμα κάθε περιττής συνάρτησης από το $-\infty$ στο $+\infty$ κάνει μηδέν, με τη βοήθεια και του ολοκληρώματος

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u^2} du = \sqrt{\pi} \quad (3.39),$$

οι Binder και Landau υπολόγισαν [23] τις k -τάξης ροπές της κατανομής $P_L(m)$ ως προς την αρχή των αξόνων, οι οποίες ορίζονται μέσω της (3.38). Μετά από αρκετές πράξεις που η παρουσίασή τους ξεφεύγει από το σκοπό της παρούσας εργασίας, οι Binder και Landau [23] κατέληξαν για το spin- 1/2 πρότυπο Ising

με αλληλεπίδραση πρώτων γειτόνων στην παρακάτω έκφραση για το U_L όταν η θερμοκρασία είναι μικρότερη της κρίσιμης:

$$U_L = - \frac{6 \left[1 - \tanh^2 \left(\frac{H m_{sp} L^d}{k_B T} \right) \right]^2 - 4 \left[1 - \tanh^2 \left(\frac{H m_{sp} L^d}{k_B T} \right) \right]}{3 \left[m_{sp}^2 + \chi_T^2 H^2 + \frac{k_B T \chi_T}{L^d} + 2 m_{sp} \chi_T H \tanh \left(\frac{H m_{sp} L^d}{k_B T} \right) \right]^2} \quad (3.40).$$

Ο πρώτος είχε ήδη δείξει [22] ότι για θερμοκρασίες διάφορες της κρίσιμης ισχύει η ακόλουθη μαθηματική έκφραση

$$U_L|_{H=0} = U_{L0}|_{H=0} \approx \begin{cases} \left(\frac{2}{3} - \frac{4}{3} \frac{k_B T \chi_T}{m_{sp}^2} \frac{1}{L^d} + O(L^{-2d}) \right), & \alpha \nu \ T < T_c \\ \left(\frac{\sigma \tau \alpha \theta}{L^d} + O(L^{-2d}) \right), & \alpha \nu \ T > T_c \end{cases} \quad (3.41).$$

Αποδεικνύεται ότι οι τύποι (3.40) και (3.41) ταυτίζονται για $T < T_c$ και για μεγάλες τιμές της διάστασης L .

Στην κρίσιμη περιοχή [22], συνδυάζοντας τους τύπους (3.27) και (3.38), προκύπτει με πράξεις πως

$$\langle m^k \rangle_L = L^{-ky} (a_c c_c)^{-1} \tilde{m}_0^k \left(\frac{L}{\xi} \right) \quad (3.42),$$

όπου

$$\tilde{m}_0^k \left(\frac{L}{\xi} \right) = \int_{-\infty}^{+\infty} z^k \tilde{P} \left(z, \frac{L}{\xi} \right) dz \quad (3.43)$$

είναι η παγκόσμια συνάρτηση κλιμάκωσης (scaling) της k -τάξης ροπής της κατανομής $P_L(m)$. Επιπλέον, βρισκόμαστε ότι

$$y = \frac{dv - \gamma}{2v} \quad (3.44)$$

ή

$$y = \frac{\beta}{v} \quad (3.45).$$

αν δεχτούμε την ισχύ της σχέσης υπερκλιμάκωσης (hyperscaling), δηλαδή της (2.51). Με βάση αυτά οι σωρευτές για τους οποίους μιλήσαμε προηγουμένως θα παίρνουν για τώρα τη σταθερή τιμή

$$U_L|_{H=0} = U_{L0}|_{H=0} = 1 - \frac{c_c \tilde{m}_0^4 \left(\frac{L}{\xi}\right)}{3 \left(\tilde{m}_0^2 \left(\frac{L}{\xi}\right)\right)^2} \quad (3.46),$$

$$(3.46) \Rightarrow U_L|_{H=0} = U_{L0}|_{H=0} \xrightarrow{T \rightarrow T_c} U^* = 1 - \frac{c_c \tilde{m}_0^4(+\infty)}{3(\tilde{m}_0^2(+\infty))^2} \quad (3.47).$$

Ο τύπος (3.47) δηλώνει ότι στο κρίσιμο σημείο (H_c, T_c) οι σωρευτές U_L και U_{L0} που ορίσαμε παραπάνω είναι παγκόσμιες συναρτήσεις του λόγου $\frac{L}{\xi}$.

Συνεπώς για $L \rightarrow +\infty$ τείνουν σε μια σταθερή τιμή U^* (3.47), κοινή για όλα τα μέλη μιας κλάσης παγκοσμιότητας (βλέπε τον πίνακα 1.1) αλλά διαφορετική αυτών της έκφρασης (3.41). Τούτο συνδέεται με την αδυναμία περιγραφής της κρίσιμης κατανομής πιθανότητας $P(m)$ σαν γραμμικού συνδυασμού κανονικών κατανομών. Το αποτέλεσμα αυτό για το κρίσιμο σημείο επιβεβαιώθηκε από την εργασία των Burkhardt και Derrida [66] για το μοντέλο Ising, η οποία βασίζεται στη θεωρία των αναλλοίωτων σύμμορφων απεικονίσεων (conformal invariance). Σε μια εργασία τους το έτος 2000 [67], οι Salas και Sokal, χρησιμοποιώντας αυτή τη θεωρία και εξειδικευμένες μαθηματικές μεθόδους, υπολόγισαν τη

σταθερή τιμή του λόγου $\frac{\langle m^4 \rangle_L}{\langle m^2 \rangle_L^2}$ για το απλό μοντέλο Ising, βελτιώνοντας

σημαντικά ένα προηγούμενο σχετικό αποτέλεσμα από την ερευνητική ομάδα του Di Francesco ([68], [69]). Η τιμή στην οποία κατέληξαν και επιβεβαίωσαν στη συνέχεια με ακρίβεια τεσσάρων δεκαδικών ψηφίων μέσω προσομοίωσης Monte Carlo υψηλής ακρίβειας ήταν η

$$\frac{\langle m^4 \rangle_\infty}{\langle m^2 \rangle_\infty^2} = 1,1679229 \pm 0,0000047 \quad (3.48),$$

από την οποία προκύπτει

$$U^* \approx 0,610692 \pm 0,000002 \quad (3.49),$$

ενώ ο Binder [23] είχε υπολογίσει

$$U^* \approx 0,618 \quad (3.50).$$

Για την ιστορία σημειώνεται ότι το αντίστοιχο αποτέλεσμα της ομάδας του Di Francesco ήταν ([68], [69])

$$\frac{\langle m^4 \rangle_\infty}{\langle m^2 \rangle_\infty^2} = 1,168 \pm 0,005 \quad (3.51).$$

Από την άλλη, σχετικά πρόσφατες μελέτες ([67], [70], [71], [72]) στο πρότυπο Ising έδειξαν την ανάγκη εισαγωγής διορθωτικών όρων κλιμάκωσης στην εξίσωση (3.47). Οι όροι αυτοί επηρεάζονται ισχυρά από τις συνοριακές συνθήκες [73], ο σταθερός όρος U^* έχει νόημα για αρκετά μεγάλα πλέγματα. Στην περίπτωση περιοδικών συνοριακών συνθηκών, κατά τους Salas και Sokal [34] η εξίσωση (3.47) θα πρέπει να τροποποιηθεί και να πάρει τη μορφή

$$U_L|_{H=0} = U_{L0}|_{H=0} = U^* + A_S L^{-\Delta} + \dots \quad (3.52),$$

όπου

$$\Delta = \frac{\gamma}{\nu} \quad (3.53)$$

και A_S είναι μια θετική σταθερά. Αντίθετα, άλλοι ερευνητές ([70], [72]) προτείνουν πιο πολύπλοκες διορθώσεις όπως

$$Q_{Lc} = Q^* + A_S L^{-\Delta} + B_1 L^{y_1} + B_2 L^{y_2} + B_3 L^{y_3} \quad (3.54),$$

όπου ο εκθέτης Δ εξακολουθεί να δίνεται από τη σχέση (3.53), οι εκθέτες y_1, y_2, y_3 είναι αρνητικοί ακέραιοι, ενώ

$$Q_L = \frac{\langle m^2 \rangle_L^2}{\langle m^4 \rangle_L} = \frac{1}{3(1 - U_{L0})} \quad (3.55).$$

Συνυπολογίζοντας μάλιστα ([70], [71], [72]) και την κλιμάκωση τριών μεταβλητών του Q στην κρίσιμη περιοχή ο τελευταίος τύπος γράφεται τελικά ως εξής:

$$Q(h, t, L) = Q^* + AL^{-\Delta} + B_1 L^{-y_1} + B_2 L^{-y_2} + B_3 L^{-y_3} + Q^{(1,0)} t L^{y_t} + Q^{(2,0)} t L^{2y_t} + Q^{(0,1)} h L^{y_h} \quad (3.56),$$

όπου y_t , y_h είναι οι εκθέτες των σχέσεων κλιμάκωσης που περιγράφηκαν στο κεφάλαιο 2.

Συγκρίνοντας τις εξισώσεις (3.41), (3.52), (3.56) μπορούμε να συμπεράνουμε ότι οι σωρευτές αυτοί αποτελούν ένα αρκετά ασφαλές κριτήριο για τον εντοπισμό των αλλαγών φάσης ποικίλων θεωρητικών προτύπων, με ιδιότητες λιγότερο ή περισσότερο γνωστές, και την ταξινόμησή τους σε 1^{te} ή ανώτερης τάξης. Το πρόβλημα είναι πως στις περισσότερες περιπτώσεις δεν αποτελούν άμεσα μετρήσιμα φυσικά μεγέθη και έτσι μπορούν να προκύψουν μόνο με θεωρητικούς υπολογισμούς ή αριθμητικές μεθόδους, όπως οι προσομοιώσεις Monte Carlo. Παρόλα αυτά, έχουν γίνει σημαντικές πρόοδοι στον πειραματικό υπολογισμό στατιστικών ροπών μαγνήτισης τάξης μεγαλύτερης από 2 [74], οπότε ίσως είναι δυνατό οι σωρευτές αυτοί να χρησιμοποιηθούν στην εργαστηριακή μελέτη πραγματικών φυσικών συστημάτων και στην ταξινόμηση των αλλαγών φάσης τους.

3.4 Φαινομενολογικός υπολογισμός των σωρευτών Binder 4^{te} τάξης για την κατανομή μαγνήτισης στο πρότυπο Baxter-Wu

Η φαινομενολογική θεωρία των Binder και Landau ([22], [23]) που περιγράψαμε παραπάνω προκάλεσε σύντομα το ενδιαφέρον αρκετών ερευνητών ανά τον κόσμο. Ο κύριος λόγος για αυτό ήταν η ευκολία και η ακρίβεια με την οποία προσέγγιζε και ερμήνευε αποτελέσματα προσομοιώσεων από μεγάλη ποικιλία στατιστικών προτύπων (Ising, Potts κλπ.), συσχετίζοντας μικροσκοπικές και μακροσκοπικές ποσότητες. Παράλληλα, οι στατιστικοί σωρευτές που προτείνονταν στα πλαίσιά της φαίνονταν ένα εξαιρετικό εργαλείο για τη διάκριση και την ερμηνεία αλλαγών φάσης, ιδίως σε περιπτώσεις μοντέλων όπου η εφαρμογή άλλων μεθόδων ήταν πολύ δύσκολη ή αδύνατη. Αρκετοί επιστήμονες μάλιστα θεωρούν ότι η τιμή αυτών των σωρευτών παραμένει σταθερή [70] για όλα τα μοντέλα που ανήκουν στην ίδια κλάση παγκοσμιότητας.

Οι Σ. Μαρτίνος, Α. Μαλάκης και Ι. Χατζηαγαπίου από το Πανεπιστήμιο Αθηνών την εφάρμοσαν [47] στην περίπτωση του προτύπου Baxter-Wu (χωρική διάσταση $d = 2$) με επίδραση εξωτερικού πεδίου H . Όπως έχουμε ήδη δει, το πρότυπο αυτό για $H = 0$ έχει τέσσερις θεμελιώδεις καταστάσεις, μια σιδηρομαγνητική, με μακροσκοπική μαγνήτιση m_L^+ , και τρεις σιδηριμαγνητικές, καθεμιά με μακροσκοπική μαγνήτιση m_L^- . Συνεπώς οι σταθερές C_1 και C_2 της εξίσωσης (3.17) για $T < T_c$ θα συνδέονται με τη σχέση

$$c_2 = 3c_1 \quad (3.57),$$

όταν $\mathbf{H} = 0$, ενώ θα ισχύει επιπλέον

$$\mathbf{m}_{sp}^+ = 3\mathbf{m}_{sp}^- = \mathbf{m}_{sp} \quad (3.58),$$

$$\chi_{\mathbf{T}}^+ = 3\chi_{\mathbf{T}}^- \quad (3.59).$$

Στους τελευταίους τύπους τα μεγέθη $\mathbf{m}_{sp}^\pm$, $\chi_{\mathbf{T}}^\pm$ για το άπειρο πλέγμα ορίζονται ως τα αντίστοιχα άπειρα όρια των μεγεθών $\mathbf{m}_L^\pm$, $\chi_{\mathbf{T},L}^\pm$ του πεπερασμένου πλέγματος, σύμφωνα με τις σχέσεις (3.22) και (3.23).

Εφαρμόζοντας τώρα τη συνθήκη κανονικοποίησης της $P_L(\mathbf{m})$ και κάνοντας πράξεις θα έχουμε

$$P_L(\mathbf{m}) = \begin{cases} cf_L^+(\mathbf{m}) + (1-c)f_L^-(\mathbf{m}), & \text{αν } T < T_c \\ f_L^0(\mathbf{m}), & \text{αν } T > T_c \end{cases} \quad (3.60),$$

όπου

$$c = \frac{1}{1+3b} \quad (3.61),$$

$$b = \exp \left[-\frac{HL^2(4\mathbf{m}_{sp} + \chi_{\mathbf{T}}^+\mathbf{H})}{3k_B T} \right] \quad (3.62).$$

Οι συναρτήσεις $f_L^\pm(\mathbf{m})$ και $f_L^0(\mathbf{m})$ έχουν φυσικά τη μορφή κανονικοποιημένων κατανομών Gauss και δίνονται από τύπους της μορφής (3.25), (3.26) με $d = 2$.

Χρησιμοποιώντας τους παραπάνω τύπους και τη σχέση (3.39) υπολογίζουμε τις $\mathbf{k}$ -τάξης ροπές της κατανομής $P_L(\mathbf{m})$ ως προς την αρχή των αξόνων, οι οποίες ορίζονται μέσω της (3.38). Για να διευκολυνθούμε στις ολοκληρώσεις ορίζουμε επιπλέον τις βοηθητικές σταθερές

$$b_+ = \sqrt{\frac{L^2}{2k_B \pi T \chi_{\mathbf{T}}^+}} \quad (3.63),$$

$$b_- = \sqrt{3}b_+ \quad (3.64).$$

Έτσι με πράξεις προκύπτουν οι μαθηματικές εκφράσεις για τις τέσσερις πρώτες ροπές της κατανομής $P_L(m)$ ως προς την αρχή των αξόνων, οι οποίες είναι

$$\langle m \rangle_L = \frac{(1-b)m_{sp} + (1+b)\chi_T^+ H}{1+3b} \quad (3.65).$$

$$\langle m^2 \rangle_L = \frac{1+b}{2(1+3b)b_+^2} + \frac{(3+b)(m_{sp}^2 + (\chi_T^+ H)^2) + 2m_{sp}\chi_T^+ H(3-b)}{3(1+3b)} \quad (3.66).$$

$$\langle m^3 \rangle_L = \frac{9(\chi_T^+ H + m_{sp})^3 + b(\chi_T^+ H - m_{sp})^3}{9(1+3b)} + \frac{(3-b)m_{sp} + \chi_T^+ H(3+b)}{2(1+3b)b_+^2} \quad (3.67).$$

$$\langle m^4 \rangle_L = \frac{27(\chi_T^+ H + m_{sp})^4 + b(\chi_T^+ H - m_{sp})^4}{27(1+3b)} + \frac{9(\chi_T^+ H + m_{sp})^2 + b(\chi_T^+ H - m_{sp})^2}{3(1+3b)b_+^4} + \frac{(3+b)}{4(1+3b)b_+^4} \quad (3.68).$$

Η μαθηματική έκφραση (3.21) δίνει την ισόθερμη μαγνητική επιδεικτικότητα (ανά δομικό λίθο) όλου του πεπερασμένου συστήματος, οπότε με παραγωγή της (3.65) έχουμε

$$\chi_{T,L} = \frac{(4m_{sp} + 2\chi_T^+ H)^2 L^2 b}{3k_B T(1+3b)^2} + \frac{(1+b)\chi_T^+}{1+3b} \quad (3.69).$$

Από τον κατάλληλο συνδυασμό των σχέσεων (3.65), (3.66) και (3.69) προκύπτει ο τύπος

$$\langle m^2 \rangle_L - \langle m \rangle_L^2 = \frac{k_B T \chi_{T,L}}{L^d} \quad (3.70),$$

με $d = 2$, δηλαδή το γνωστό θεώρημα διακυμάνσεων-απωλειών (1.34). Ο υπολογισμός των οριακών τιμών της μέσης συνολικής μαγνητικής ροπής (ανά δομικό λίθο) και της ισόθερμης μαγνητικής επιδεικτικότητας για $L \rightarrow +\infty$ είναι σχετικά απλός και δίνει την αναμενόμενη συμπεριφορά, δηλαδή

$$\lim_{L \rightarrow +\infty} \langle m \rangle_L = \begin{cases} m_{sp} + \chi_T^+ H, & \text{αν } H > 0 \\ -\frac{m_{sp} + \chi_T^+ H}{3}, & \text{αν } H < 0 \end{cases} \quad (3.71),$$

$$\lim_{L \rightarrow +\infty} \chi_{T,L} = \begin{cases} \chi_T^+, & \text{αν } H > 0 \\ -\frac{\chi_T^+}{3}, & \text{αν } H < 0 \end{cases} \quad (3.72),$$

αφού βέβαια πρώτα δειχτεί πως

$$\lim_{L \rightarrow +\infty} b = \begin{cases} 0, & \text{αν } H > 0 \\ 1, & \text{αν } H = 0 \\ +\infty, & \text{αν } H < 0 \end{cases} \quad (3.73)$$

(μπορούμε να θεωρήσουμε $4m_{sp} + \chi_T^+ H > 0$ ακόμη και για αρνητικά μαγνητικά πεδία, αρκεί να είναι τόσο ασθενή ώστε να μην παρατηρείται αλλαγή φάσης σαν αυτή που περιγράφηκε στην § 3.1).

Από τις εξισώσεις (3.65) και (3.69) μπορούμε να πάρουμε τις σχέσεις κλιμάκωσης ως προς το εξωτερικό πεδίο H για τη μέση μαγνητική ροπή $\langle m \rangle_L$ (ανά δομικό λίθο) και τη μαγνητική επιδεικτικότητα ανά δομικό λίθο χ_L για την περίπτωση των αλλαγών φάσης 1^{ou} είδους. Αν $L \gg \xi$ και το εξωτερικό πεδίο είναι τόσο ασθενές ώστε $m_{sp} \gg \chi_T^+ H$ έχουμε από την (3.62)

$$b \approx \exp\left(-\frac{4HL^2 m_{sp}}{3k_B T}\right) \quad (3.74).$$

Αυτό συνεπάγεται τις σχέσεις

$$\langle m \rangle_L = \tilde{m}_0(HL^2) \quad (3.75),$$

$$\tilde{\chi}_T(HL^2) = \frac{\chi_{T,L}(HL^2)}{L^2} = \frac{(4m_{sp})^2 L^2 \exp\left(-\frac{4m_{sp} HL^2}{3k_B T}\right)}{3k_B T \left[1 + 3 \exp\left(-\frac{4m_{sp} HL^2}{3k_B T}\right)\right]^2} \quad (3.76).$$

Όπως βλέπουμε η μόνη δύναμη του L που εμφανίζεται στις (3.54) και (3.55) είναι η χωρική διάσταση $d = 2$ του πλέγματος, πράγμα το οποίο είναι σε πλήρη συμφωνία με το αντίστοιχο αποτέλεσμα των Binder και Landau [23] στο spin-1/2 πρότυπο Ising με αλληλεπίδραση πρώτων γειτόνων. Θα πρέπει όμως να σημειωθεί πως, σύμφωνα με την (3.55), αν $T < T_c$ το μέγιστο της μαγνητικής

επιδεικνυκότητας στο πρότυπο Baxter-Wu καθορίζεται και από το μέγεθος L του πλέγματος σύμφωνα με την εξίσωση

$$H^* L^2 = \frac{3k_B T \ln 3}{4m_{sp}} \quad (3.77).$$

Αντίθετα, στο spin-1/2 πρότυπο Ising με αλληλεπίδραση πρώτων γειτόνων λόγω της χαρακτηριστικής συμμετρίας του το αντίστοιχο μέγιστο παρατηρείται όταν $H = 0$ ανεξάρτητα από το μέγεθος L του πλέγματος.

Στην ίδια περιοχή τιμών του εξωτερικού πεδίου, όπου $m_{sp} \gg \chi_T^+ H$, οι μαθηματικές εκφράσεις (3.45), (3.46) και (3.47) γράφονται αντίστοιχα

$$\langle m^2 \rangle_L \approx \frac{1+b}{2(1+3b)b_+^2} + \frac{(3+b)m_{sp}^2}{3(1+3b)} \quad (3.78),$$

$$\langle m^3 \rangle_L \approx \frac{(9-b)m_{sp}^3}{9(1+3b)} + \frac{(3-b)m_{sp} + \chi_T^+ H(3+b)}{2(1+3b)b_+^2} \quad (3.79),$$

$$\langle m^4 \rangle_L \approx \frac{(27+b)m_{sp}^4}{27(1+3b)} + \frac{(9+b)m_{sp}^2}{3(1+3b)b_+^4} + \frac{(3+b)}{4(1+3b)b_+^4} \quad (3.80).$$

Με τη βοήθεια των (3.65), (3.66), (3.67) και (3.68) ή των (3.65), (3.78), (3.79) και (3.80) μπορούμε να βρούμε τις τιμές του ανηγμένου σωρευτή 4^{ης} τάξης (4th order reduced cumulant) U_L του Kurt Binder ([22], [23]), ο οποίος ορίζεται από τους τύπους (3.34), (3.35) και (3.36), για τις αντίστοιχες περιοχές τιμών του εξωτερικού πεδίου αν $T < T_c$. Οι μαθηματικές εκφράσεις όμως που προκύπτουν μετά από αρκετές αλγεβρικές πράξεις είναι ιδιαίτερα πολύπλοκες τόσο στη μια όσο και στην άλλη περίπτωση, για το λόγο αυτόν παραθέτουμε μόνο γραφικές παραστάσεις $U_L = f(H)$ που λαμβάνονται με τη βοήθεια ηλεκτρονικού υπολογιστή (πρόγραμμα Excel ή Origin). Έτσι, στο διάγραμμα 3.2 φαίνονται οι γραφικές παραστάσεις των ανηγμένων σωρευτών στο πρότυπο Baxter-Wu σε συνάρτηση με το εξωτερικό πεδίο H σύμφωνα με τα αποτελέσματα της φαινομενολογικής θεωρίας του Kurt Binder ([22], [23]) για θερμοκρασία μικρότερη της κρίσιμης ($\frac{k_B T}{J} = 2,222$) και $L = 60$.

Στην ειδική περίπτωση όμως που $H = 0$ και $T < T_c$ έχουμε αντίστοιχα από τις (3.65), (3.66), (3.67), και (3.68) τις απλές εξισώσεις:

$$\langle m \rangle_L \Big|_{H=0} = 0 \quad (3.81),$$

$$\langle m^2 \rangle_L \Big|_{H=0} = \frac{1}{4b_+^2} + \frac{m_{sp}^2}{3} \quad (3.82),$$

$$\langle m^3 \rangle_L \Big|_{H=0} = \frac{2m_{sp}^3}{9} + \frac{m_{sp}}{4b_+^2} \quad (3.83),$$

$$\langle m^4 \rangle_L \Big|_{H=0} = \frac{7m_{sp}^4}{27} + \frac{5m_{sp}^2}{6b_+^4} + \frac{1}{4b_+^4} \quad (3.84).$$

Με τη βοήθεια των ανωτέρω και των (3.34), (3.35), (3.36) μπορούμε πλέον να δείξουμε, εφαρμόζοντας σειρές Taylor, ότι καθώς το μέγεθος L του πλέγματος μεγαλώνει έχουμε

$$\begin{aligned} U_L|_{H=0} &= U_{L0}|_{H=0} \approx \left\{ \begin{aligned} &\left[\frac{2}{9} - \frac{8}{3} \frac{k_B T \chi_T^+}{m_{sp}^2} \frac{1}{L^2} + O(L^{-4}) \right], \text{ αν } T < T_c \\ &\left[\frac{\sigma_{\text{ταθ.}}}{L^2} + O(L^{-4}) \right], \text{ αν } T > T_c \end{aligned} \right. \quad (3.85). \end{aligned}$$

Σε ότι αφορά την κρίσιμη περιοχή, οι Σ. Μαρτίνος, Α. Μαλάκης και Ι. Χατζηαγαπίου από το Πανεπιστήμιο Αθηνών, αφού διαπίστωσαν την αδυναμία του τύπου για την κατανομή (3.31) να περιγράψει την κρίσιμη συμπεριφορά του προτύπου Baxter-Wu, πρότειναν [44] για αυτό τη συνάρτηση κατανομής

$$\tilde{P}(\psi) = \frac{a_1}{(\psi + \psi_1)^{n_1}} \frac{1}{\exp\left(\frac{b_1}{\psi + \psi_1}\right) - 1} + \frac{a_2}{(\psi_2 - \psi)^{n_2}} \frac{1}{\exp\left(\frac{b_2}{\psi_2 - \psi}\right) - 1} \quad (3.86).$$

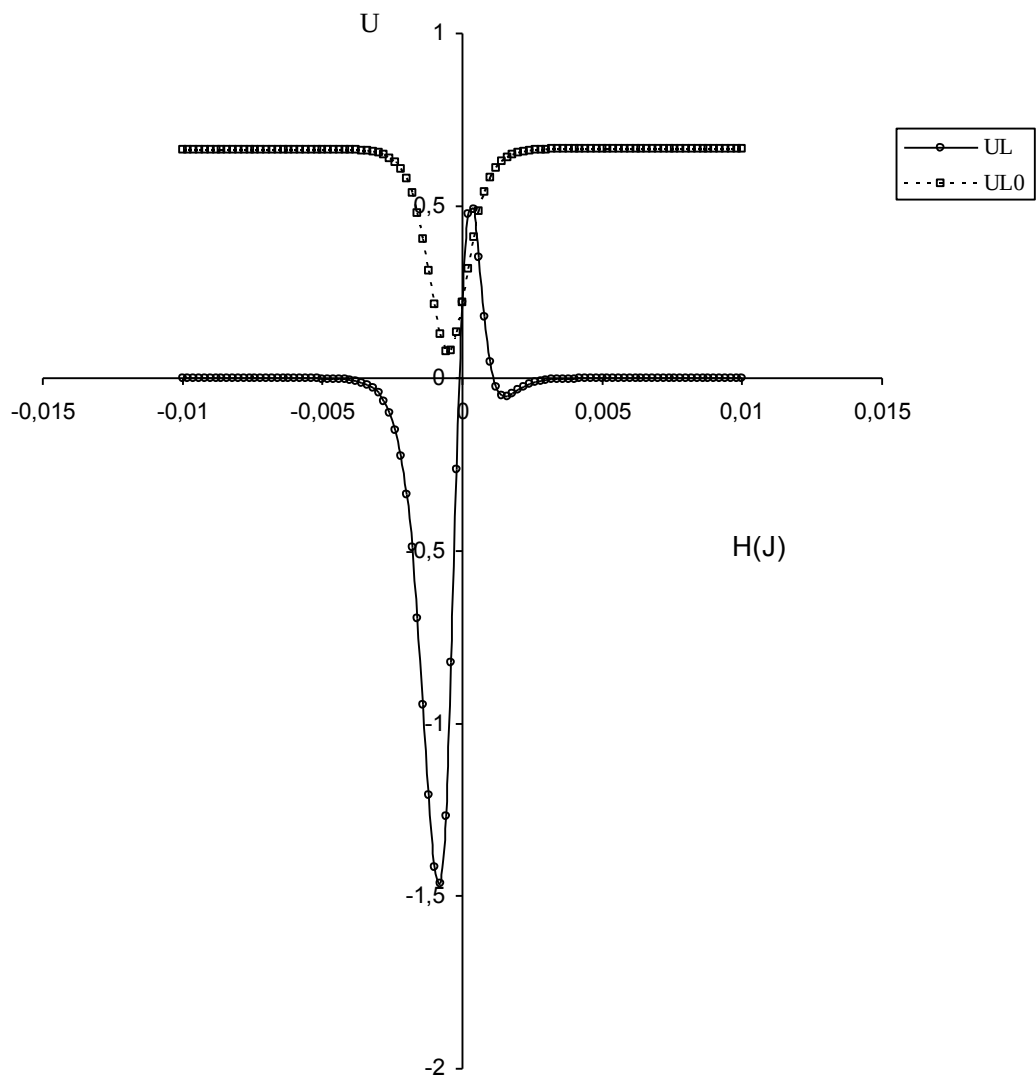
Στον παραπάνω τύπο το ψ εξακολουθεί να δίνεται από τη σχέση (3.32) ενώ οι παράμετροι $\psi_0, \psi_1, \psi_2, a_1, a_2, b_1, b_2, c$ και οι εκθέτες n_1, n_2 είναι σταθερές κλιμάκωσης (scale-invariant).

Αναφορικά με την Κλάση Παγκοσμιότητας του μοντέλου Baxter-Wu λεπτομερείς υπολογισμοί των σωρευτών του Binder σαν τους προαναφερθέντες για το πρότυπο Ising ([67], [68], [69], [70], [71], [72]) γενικά απουσιάζουν. Σε μια εργασία του 2008 των Zhang και Deng [75] μελετήθηκε με τη βοήθεια προσομοιώσεων Monte Carlo ένα πλέγμα-αέριο για το οποίο υπάρχουν αρκετά στοιχεία ότι ανήκει σε αυτήν Κλάση Παγκοσμιότητας. Για το λόγο Q βρέθηκε ότι υπακούει στην με αρκετά καλή ακρίβεια στην διορθωμένη εξίσωση κλιμάκωσης (3.56) με

$$y_1 = \frac{y_2}{2} = \frac{y_3}{3} = -1 \quad (3.87),$$

$$Q^* = 0,823(2) \quad (3.88).$$

Περισσότερα για αυτό το αποτέλεσμα θα έχουμε την ευκαιρία να συζητήσουμε στο κεφάλαιο 7.



Διάγραμμα 3.1: Οι γραφικές παραστάσεις των συναρτήσεων $U_L = f(H)$, $U_{L0} = f(H)$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα της φαινομενολογικής θεωρίας του Binder για θερμοκρασία $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ και $L = 60$.

3.5 Η φαινομενολογική θεωρία του Binder για την κατανομή ενέργειας

Οι πρώτες επιτυχίες της φαινομενολογικής θεωρίας του K. Binder για την κατανομή της συνολικής μαγνητικής ροπής, ώθησαν τους ερευνητές να αναζητήσουν κάτι αντίστοιχο και για την κατανομή πιθανότητας της ενέργειας των μικροκαταστάσεων από τις οποίες περνά ένα φυσικό σύστημα. Το μέγεθος αυτό δεν μπορεί να μετρηθεί πειραματικά αλλά προκύπτει συνήθως από προσομοιώσεις Monte Carlo. Τελικά το 1986 οι Challa, Landau και Binder [24] πρότειναν μια γενική φαινομενολογική προσέγγιση για την κατανομή αυτή, βασισμένη στη θεωρία των θερμοδυναμικών διακυμάνσεων που διατυπώθηκε στο έργο των Landau και Lifschitz [3], η οποία θα μπορούσε θεωρητικά να εφαρμοστεί όχι μόνο στο Baxter-Wu αλλά και σε οποιοδήποτε μοντέλο.

Σύμφωνα με αυτή, το σύστημα σε θερμοδυναμική ισορροπία και μακριά από οποιαδήποτε αλλαγή φάσης περιγράφεται σαν ένα «μαύρο κουτί», η εσωτερική ενέργεια E του οποίου (ανά δομικό λίθο) μετريέται ανά τακτά χρονικά διαστήματα, τα οποία θα μπορούσαν να αντιστοιχούν σε βήματα προσομοίωσης Monte Carlo. Αυτές οι τιμές της ενέργειας ακολουθούν την κατανομή πιθανότητας $P_L(E)$, για την οποία υποθέτουμε ότι είναι μια κατανομή Gauss με κέντρο γύρω από την τιμή της ενέργειας E_0 του συστήματος στο θερμοδυναμικό όριο, η οποία εξαρτάται από τη θερμοκρασία T , με πλάτος ανάλογο της θερμοχωρητικότητας C του συστήματος στο παραπάνω όριο.

Επειδή το κύριο χαρακτηριστικό μιας αλλαγής φάσης 1^{ου} είδους είναι η συνύπαρξη δύο ή περισσότερων φάσεων, οι παραπάνω επιστήμονες πρότειναν ότι στα σημεία αλλαγής φάσης 1^{ου} είδους η κατανομή πιθανότητας $P_L(E)$ θα προκύψει από την υπέρθεση δύο (ή περισσότερων, αν μιλάμε για περισσότερες από δυο διαφορετικές φάσεις) κατανομών Gauss με κέντρα τις τιμές E_+ , E_- των αντίστοιχων εσωτερικών ενεργειών κατά τη μετάβαση από τη φάση της υψηλής σε εκείνη της χαμηλής θερμοκρασίας αντίστοιχα. Μακριά από το σημείο μετάβασης, οι κατανομές Gauss έχουν τα κέντρα τους σε χαρακτηριστικές για κάθε θερμοκρασία ενέργειες. Το πόσο καθεμιά από τις παραπάνω κατανομές Gauss συνεισφέρει στη συνολική κατανομή καθορίζεται από τους παράγοντες Boltzmann των αντίστοιχων ελεύθερων ενεργειών, έτσι ώστε η συμπεριφορά του συνδυασμού κανονικών κατανομών (Gauss) να διατηρείται σε μια σχετικά μικρή περιοχή θερμοκρασιών, αν φυσικά το σύστημα είναι πεπερασμένο.

Τα παραπάνω σημαίνουν ότι η κατανομή ενέργειας $P_L(E)$ σε κάθε φυσικό σύστημα ή αριθμητικό μοντέλο για οποιαδήποτε θερμοκρασία T και αγνοώντας το εξωτερικό πεδίο H , διορθωτικούς όρους (άγνωστους ως τώρα) στο σημείο της αλλαγής φάσης και την επίδραση των συνοριακών συνθηκών θα δίνεται από μια σχέση της μορφής

$$P_L(E) = \begin{cases} cf_L^+(E) + cf_L^-(E), & \alpha \nu T < T_c \\ f_L^0(E), & \alpha \nu T > T_c \end{cases} \quad (3.88),$$

όπου

$$f_L^0(E) = \sqrt{\frac{L^d}{2k_B \pi T^2 C}} \exp \left[-\frac{(E - E_0)^2 L^d}{2k_B T^2 C} \right] \quad (3.89),$$

$$f_L^\pm(E) = \sqrt{\frac{L^d}{2k_B \pi T^2 C_\pm}} a_\pm \exp \left[-\frac{(E \mp E_\pm - C_\pm \Delta T)^2 L^d}{2k_B T^2 C_\pm} \right] \quad (3.90),$$

$$\alpha_+ = \sqrt{C_+} \exp \left(-\frac{\Delta F L^d}{2k_B T} \right) \quad (3.91),$$

$$\alpha_- = \sqrt{C_-} q \exp \left(\frac{\Delta F L^d}{2k_B T} \right) \quad (3.92),$$

Στους παραπάνω τύπους όλες οι ποσότητες με δείκτη «+» αναφέρονται σε θερμοκρασία υψηλότερη από αυτήν της αλλαγής φάσης T^* (αλλαγή φάσης 1^{ου} είδους, όχι κρίσιμη), όλες οι ποσότητες με δείκτη «-» σε θερμοκρασία χαμηλότερη από αυτήν της αλλαγής φάσης. Επίσης F_+ , U_+ και S_+ είναι αντίστοιχα η ελεύθερη ενέργεια κατά Helmholtz, η εσωτερική ενέργεια και η εντροπία ανά spin- μαγνητική ροπή αντίστοιχα σε θερμοκρασία υψηλότερη από εκείνη της αλλαγής φάσης, ενώ

$$\Delta F = F_+ - F_- \quad (3.93),$$

$$\Delta T = T - T^* \quad (3.94).$$

$$E_+ = U_+(T^*) \quad (3.95),$$

$$E_- = U_-(T^*) \quad (3.96).$$

Συνεπώς, η λανθάνουσα θερμότητα της αλλαγής φάσης θα δίνεται από τη σχέση

$$Q_{\text{Lat}} = E_+ - E_- \quad (3.97).$$

Επειδή θεωρούμε το σύστημα κοντά στη θερμοκρασία αλλαγής φάσης, αγνοούμε σε πρώτη προσέγγιση τη μεταβολή των θερμοχωρητικοτήτων C_+ και C_- με τη θερμοκρασία.

Στην εξίσωση (3.88) η c είναι πραγματική σταθερά τέτοια ώστε να πληρείται η συνθήκη κανονικοποίησης (νορμαλισμού) της πιθανότητας ([76], [77])

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P_L(E) dE = 1 \quad (3.98).$$

Από τις (3.88), (3.98) προκύπτει ότι

$$c = \frac{1}{\alpha_+ + \alpha_-} \quad (3.99).$$

Επιπλέον, k_B είναι η σταθερά του Boltzmann, q είναι το πλήθος των διαφορετικών οργανωμένων καταστάσεων που συνυπάρχουν με την κατάσταση υψηλής αταξίας, στην περίπτωση του μοντέλου Baxter-Wu τέσσερις, T η απόλυτη θερμοκρασία του συστήματος και d η διάστασή του (στην περίπτωση μας $d = 2$).

Θα θεωρήσουμε παρακάτω μόνο συστήματα- πλέγματα με διαστάσεις μεγαλύτερες από το μήκος συσχέτισης έτσι ώστε όλες οι ποσότητες να αναφέρονται με την τιμή τους στο θερμοδυναμικό όριο. Οι υπολογιζόμενες ποσότητες σημειώνονται με το μήκος L της διάστασης του πλέγματος. Έτσι, $\langle E \rangle_L$, $\langle E^2 \rangle_L$ κ.λπ. είναι οι ροπές k τάξης της κατανομής ενέργειας σε ένα υπερκυβικό κρυσταλλικό πλέγμα διάστασης d (στη γενική περίπτωση), οι οποίες δίνονται ως γνωστόν από τη μαθηματική έκφραση

$$\langle E^k \rangle_L = \int_{-\infty}^{+\infty} E^k P_L(E) dE \quad (3.100).$$

Με τη βοήθεια των (3.88)- (3.97), της (3.99) και της (3.100) θα έχουμε

$$\langle E \rangle_L = \frac{\alpha_+ E_+ + \alpha_- E_-}{\alpha_+ + \alpha_-} + \frac{(\alpha_+ C_+ + \alpha_- C_-) \Delta T}{\alpha_+ + \alpha_-} \quad (3.101),$$

$$\langle E^2 \rangle_L = \frac{\alpha_+ (E_+ + C_+ \Delta T)^2 + \alpha_- (E_- + C_- \Delta T)^2}{\alpha_+ + \alpha_-} + \frac{(\alpha_+ C_+ + \alpha_- C_-) \Delta T}{\alpha_+ + \alpha_-} \frac{k_B T^2}{L^d} \quad (3.102),$$

$$\langle E^4 \rangle_L = \frac{1}{\alpha_+ + \alpha_-} \left[\alpha_+ \left[3 \left(\frac{k_B T^2 C_+}{L^d} \right)^2 + \left(\frac{6k_B T^2 C_+}{L^d} \right) (E_+ + C_+ \Delta T)^2 + (E_+ + C_+ \Delta T)^4 \right] + \right. \\ \left. \alpha_- \left[3 \left(\frac{k_B T^2 C_-}{L^d} \right)^2 + \left(\frac{6k_B T^2 C_-}{L^d} \right) (E_- + C_- \Delta T)^2 + (E_- + C_- \Delta T)^4 \right] \right] \quad (3.103).$$

Είναι γνωστό ότι η θερμοχωρητικότητα υπό σταθερή εξωτερική μαγνήτιση δίνεται από τη σχέση

$$C_L = \frac{\partial \langle E \rangle_L}{\partial T} \quad (3.104),$$

η οποία, με τη βοήθεια της (3.101) δίνει

$$C_L = \frac{\alpha_+ C_+ + \alpha_- C_-}{\alpha_+ + \alpha_-} + \frac{2a_+ a_- [(E_+ - E_-) + (C_+ - C_-) \Delta T]}{(\alpha_+ + \alpha_-)^2} \frac{dx}{dT} \quad (3.105),$$

όπου

$$x = -\frac{\Delta F L^d}{2k_B T} \quad (3.106).$$

Απουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου ισχύει

$$F_{\pm} = U_{\pm} - TS_{\pm} \quad (3.107),$$

$$dF_{\pm} = -S_{\pm} dT \quad (3.108),$$

ενώ παρατηρώντας επιπλέον ότι

$$F_-(T^*) = F_+(T^*) \quad (3.109),$$

έχουμε

$$2 \frac{dx}{dT} = \frac{L^d (U_+ - U_-)}{k_B T^2} = \frac{L^d [(E_+ - E_-) - (C_+ - C_-) \Delta T]}{k_B T^2 (\alpha_+ + \alpha_-)^2} \quad (3.110).$$

Συνδυάζοντας τις εξισώσεις (3.105) και (3.109) προκύπτει ότι

$$C_L = \frac{\alpha_+ C_+ + \alpha_- C_-}{\alpha_+ + \alpha_-} + \frac{a_+ a_- L^d [(E_+ - E_-) + (C_+ - C_-) \Delta T]^2}{k_B T^2 (\alpha_+ + \alpha_-)^2} \quad (3.111).$$

Από τις (3.101), (3.102) και (3.111) προκύπτει ότι

$$C_L = \frac{L^d}{k_B T^2} (\langle E \rangle_L^2 - \langle E^2 \rangle_L) \quad (3.112),$$

το οποίο είναι το γνωστό θεώρημα διακυμάνσεων- απωλειών (βλέπε εξίσωση (1.35)) για την ενέργεια, με $d = 2$.

Οι Challa, Landau και Binder, παράλληλα με τους υπολογισμούς των ανωτέρω αποτελεσμάτων, εισήγαν στην ίδια εργασία [24] έναν καινούριο στατιστικό σωρευτή (cumulant) για την ενέργεια, αντίστοιχο με εκείνον για τη μαγνήτιση που δίνεται από τη μαθηματική έκφραση (3.63). Ο σωρευτής της ενέργειας ορίζεται ως εξής:

$$V_{L0} = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle_L}{3 \langle E^2 \rangle_L^2} \quad (3.113).$$

Αν και το μέγεθος αυτό δε φαίνεται να έχει κάποια προφανή πειραματική σημασία, είναι μια ιδιαίτερα χρήσιμη ποσότητα στις υπολογιστικές προσομοιώσεις φυσικών συστημάτων, αφού συμπεριφέρεται εντελώς διαφορετικά στην περίπτωση αλλαγών φάσης πρώτου ή δεύτερου είδους.

Μακριά από αλλαγές φάσης η συνάρτηση κατανομής της ενέργειας $P_L(E)$ περιγράφεται από μία κανονική κατανομή (Gauss), η οποία οδηγεί στο θερμοδυναμικό όριο σε μια ιδιομορφία δ- συνάρτησης. Από αυτό, αφού

$$U_{\pm} = E_{\pm} + C_{\pm} \Delta T \quad (3.114),$$

προκύπτει ότι

$$\langle E^2 \rangle = U_{\pm}^2 \quad (3.115),$$

$$\langle E^4 \rangle = U_{\pm}^4 \quad (3.116).$$

Από τον τύπο (3.113), λαμβάνοντας υπόψη και τις σχέσεις (3.102), (3.103), (3.115), (3.116) , έχουμε για το μοντέλο Baxter-Wu υπό μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο, αναπτύσσοντας σε σειρές Taylor και κρατώντας όρους τάξης L^{-2} ,

$$V_{L0}|_{H=0} \approx \begin{cases} 1 - \frac{2(E_+^4 + E_-^4)}{3(E_+^2 + E_-^2)^2} - \frac{4\pi k_B T^2}{L^2} + O(L^{-4}), & \text{αν } T < T_c \\ \frac{2}{3} + O(L^{-4}), & \text{αν } T > T_c \end{cases} \quad (3.117),$$

όπου

$$\begin{aligned} \Pi = & \frac{C_+ E_+^2 + C_- E_-^2}{(E_+^2 + E_-^2)^2} - \frac{(C_+ + C_-)(E_+^4 + E_-^4)}{3(E_+^2 + E_-^2)^3} + \\ & + \frac{2(C_+ E_+^3 + C_- E_-^3) \ln \left(q \sqrt{\frac{C_+}{C_-}} \right)}{3(E_+ - E_-)^2 (E_+^2 + E_-^2)^2} - \\ & - \frac{(E_+^4 + E_-^4)(C_+ E_+ + C_- E_-) \ln \left(q \sqrt{\frac{C_+}{C_-}} \right)}{3(E_+ - E_-)^2 (E_+^2 + E_-^2)^3} \end{aligned} \quad (3.118).$$

Το ερώτημα που φυσιολογικά ανακύπτει από τα παραπάνω είναι πως συμπεριφέρεται ο σωρευτής V_{L0} σε μια κρίσιμη αλλαγή φάσης. Προτάθηκε [24] πως στο κρίσιμο σημείο θα τείνει στο τετριμμένο όριο $\frac{2}{3}$, ωστόσο η συμπεριφορά των πεπερασμένου μεγέθους συστημάτων θα πρέπει να είναι στην περίπτωση αυτή διαφορετική σε σχέση με την απουσία αλλαγής φάσης. Οι Σ. Μαργίνος, Α. Μαλάκης και Ι. Χατζηαγαπίου από το Πανεπιστήμιο Αθηνών πρότειναν [46] ότι στην περιοχή γύρω από το κρίσιμο σημείο θα ισχύει ο τύπος

$$V_{L0} = \frac{2}{3} - L^{\frac{\alpha}{\nu}-d} \tilde{V}(tL^{\frac{1}{\nu}}) \quad (3.119),$$

πράγμα το οποίο σημαίνει ότι η θερμοκρασία μετάβασης θα ακολουθεί τις σχέσεις (2.70) και (2.72). Πώς ακριβώς κατέληξαν στη μαθηματική έκφραση (3.124) δεν είναι απολύτως σαφές, ωστόσο αυτή επαληθεύεται από τα αποτελέσματα υπολογιστικών προσομοιώσεων Monte Carlo [46]. Σε κάθε περίπτωση πάντως, το μέγεθος αυτό είναι ελάχιστα χρήσιμο για έναν πειραματικό επιστήμονα, αφού ακόμα και να κατόρθωνε να μετρήσει με ικανοποιητική ακρίβεια τις αντίστοιχες ροπές της ενέργειας, δε θα μπορούσε να διακρίνει την κρίσιμη αλλαγή φάσης από την απουσία οποιασδήποτε αλλαγής φάσης.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4: ΟΙ ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ

4.1 Γενικά για τις μεθόδους Monte Carlo

Η βασική ιδέα πίσω από την προσομοίωση Monte Carlo ([6], [11], [16], [78]) είναι να προσομοιωθεί η τυχαία θερμική διακύμανση ενός συστήματος από μια κατάσταση σε μια άλλη κατά την εκτέλεση ενός πειράματος. Γνωρίζουμε ότι για τους σκοπούς μας είναι περισσότερο κατάλληλο να θεωρήσουμε τον υπολογισμό της αναμενόμενης τιμής μιας μεταβλητής σαν τη χρονική μέση τιμή αυτής για τις καταστάσεις από τις οποίες περνά ένα σύστημα. Σε μια προσομοίωση Monte Carlo προσομοιώνουμε απευθείας αυτή τη διαδικασία, δημιουργώντας ένα μοντέλο του συστήματος στον υπολογιστή μας και κάνοντάς το να περάσει από μια ποικιλία μικροκαταστάσεων κατά τέτοιο τρόπο, ώστε η πιθανότητα αυτό να βρίσκεται σε μια συγκεκριμένη μικροκατάσταση μ σε ένα δοσμένο χρόνο t να είναι ίση με το στατιστικό βάρος $w_\mu(t)$, το οποίο αυτή η μικροκατάσταση θα είχε στο αντίστοιχο πραγματικό σύστημα.

Για να το πετύχουμε αυτό πρέπει να επιλέξουμε μια δυναμική για την προσομοίωσή μας- έναν κανόνα για να μεταβαίνουμε από μια μικροκατάσταση σε μια άλλη κατά τη διάρκεια της- η οποία θα έχει ως αποτέλεσμα κάθε μικροκατάσταση να εμφανίζεται με την κατάλληλη πιθανότητα. Παρακάτω εξετάζουμε ορισμένες στρατηγικές για να γίνει αυτό, αλλά η βασική ιδέα είναι ότι προσπαθούμε να προσομοιώσουμε την φυσική διαδικασία, η οποία οδηγεί στη θεμελιώδη εξίσωση [16]

$$\frac{dw_\mu(t)}{dt} = \sum_\nu [R(\nu \rightarrow \mu)w_\nu - R(\mu \rightarrow \nu)w_\mu] \quad (4.1),$$

όπου $R(\mu \rightarrow \nu)$, $R(\nu \rightarrow \mu)$ οι ρυθμοί μετάβασης από μια μικροκατάσταση μ του συστήματος σε μια άλλη, έστω ν , και από τη ν στη μ αντίστοιχα και $w_\mu(t)$, $w_\nu(t)$ τα στατιστικά βάρη των καταστάσεων αυτών τη χρονική στιγμή t . Επιλέγουμε μια σειρά από ρυθμούς $R(\mu \rightarrow \nu)$ για τις μεταβολές από τη μια κατάσταση στην άλλη κατά τέτοιο τρόπο ώστε η λύση της ανταποκρινόμενης σε αυτούς θεμελιώδους εξίσωσης (4.1) στην κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας να είναι ακριβώς η κανονική κατανομή του Gibbs, δηλαδή

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} w_\mu(t) = p_\mu \quad (4.2),$$

με την p_μ να έχει τη μορφή της κανονικής πιθανότητας

$$p_\mu = \frac{1}{Z} \exp(-\beta E_\mu) \quad (4.3),$$

όπου Z η κανονική συνάρτηση επιμερισμού, η οποία δίνεται από τον τύπο (1.22). Έπειτα χρησιμοποιούμε τους παραπάνω ρυθμούς για να επιλέξουμε τις

μικροκαταστάσεις από τις οποίες περνά το προσομοιούμενο σύστημα κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης και από αυτές τις καταστάσεις κάνουμε εκτιμήσεις για όλες τις ποσότητες που μας ενδιαφέρουν.

Ο συνήθης στόχος κατά την προσομοίωση ενός συστήματος σε ισορροπία είναι ο υπολογισμός της αναμενόμενης τιμής $\langle Q \rangle$ κάποιας παρατηρούμενης ποσότητας Q , όπως η εσωτερική ενέργεια σε ένα μοντέλο αερίου ή η μαγνήτιση σε ένα μοντέλο μαγνήτη. Σύμφωνα με τα όσα ειπώθηκαν στην §1.2, ο ιδανικός τρόπος υπολογισμού μιας τέτοιας αναμενόμενης τιμής είναι η εύρεση της μέσης τιμής της ποσότητας που μας ενδιαφέρει για όλες τις δυνατές μικροκαταστάσεις του συστήματος, αποδίδοντας σε κάθε κατάσταση τη δική της πιθανότητα Boltzmann [16]

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_{\mu} Q_{\mu} \exp(-\beta E_{\mu})}{\sum_{\mu} \exp(-\beta E_{\mu})} \quad (4.4).$$

Προφανώς κάτι τέτοιο είναι εφικτό μόνο στα πολύ μικρά συστήματα. Στα μεγαλύτερα συστήματα, το καλύτερο που έχουμε να κάνουμε είναι να πάρουμε το μέσο όρο ενός υποσυνόλου των μικροκαταστάσεων, παρά το ότι κάτι τέτοιο αναπόφευκτα εισάγει σφάλματα στους υπολογισμούς.

Οι τεχνικές Monte Carlo δουλεύουν επιλέγοντας ένα υποσύνολο των μικροκαταστάσεων τυχαία από κάποια προσδιορισμένη κατανομή πιθανοτήτων. Έστω ότι διαλέγουμε M τέτοιες καταστάσεις $\{\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_M\}$. Η καλύτερη εκτίμηση της ποσότητας Q δίνεται τότε από τον εκτιμητή της Q_M , ο οποίος ορίζεται με τον τύπο

$$Q_M = \frac{\sum_{i=1}^M Q_{\mu_i} p_{\mu_i}^{-1} \exp(-\beta E_{\mu_i})}{\sum_{i=1}^M p_{\mu_i}^{-1} \exp(-\beta E_{\mu_i})} \quad (4.5),$$

όπου η p_{μ_i} έχει τη μορφή της κανονικής πιθανότητας, δίνεται δηλαδή από την (4.3). Ο εκτιμητής Q_M έχει την ιδιότητα, καθώς ο αριθμός των μικροκαταστάσεων του δείγματος αυξάνει, να οδηγεί σε καλύτερη εκτίμηση του Q και μάλιστα

$$\lim_{M \rightarrow +\infty} Q_M = \langle Q \rangle \quad (4.6).$$

Το κρίσιμο ερώτημα τώρα είναι πώς πρέπει να επιλέξουμε τις M μικροκαταστάσεις έτσι ώστε ο Q_M να δίνει μια ακριβή εκτίμηση της $\langle Q \rangle$. Με άλλα λόγια, πώς θα πρέπει να διαλέξουμε την κατανομή πιθανοτήτων p_{μ} . Η

απλούστερη επιλογή είναι να θεωρήσουμε όλες τις μικροκαταστάσεις με την ίδια πιθανότητα p_μ . Αυτή η επιλογή δίνει

$$Q_M = \frac{\sum_{i=1}^M Q_{\mu i} \exp(-\beta E_{\mu i})}{\sum_{i=1}^M \exp(-\beta E_{\mu i})} \quad (4.7).$$

Στους περισσότερους αριθμητικούς υπολογισμούς όμως είναι δυνατό μόνο να πάρουμε ένα δείγμα από έναν πολύ μικρό αριθμό μικροκαταστάσεων σε σχέση με το συνολικό αριθμό αυτών. Ας θεωρήσουμε για παράδειγμα το μοντέλο Ising. Ένα τρισδιάστατο κυβικό σύστημα από $10 \times 10 \times 10$ spin θα έχει $2^{1000} \approx 10^{300}$ μικροκαταστάσεις και ένας τυπικός αριθμητικός υπολογισμός μπορεί μόνο να ελπίζει να συμπεριλάβει 10^8 από αυτές σε λίγες ώρες, με τη βοήθεια ενός καλού υπολογιστή, που σημαίνει ότι συμπεριλαμβάνεται μία σε κάθε 10^{292} μικροκαταστάσεις του συστήματος, δηλαδή ένα πολύ μικρό μέρος αυτών. Κάτω από τέτοιες συνθήκες ένας εκτιμητής που δίνεται από τη σχέση (4.7) είναι συνήθως ένας κακός οδηγός για την τιμή της $\langle Q \rangle$. Ο λόγος είναι ότι ένα ή και τα δύο αθροίσματα που εμφανίζονται στην εξίσωση (4.7) μπορούν να καθοριστούν από ένα μικρό αριθμό μικροκαταστάσεων, οι οποίες πιθανότατα δε συμπεριλαμβάνονται σε αυτές που έχουμε επιλέξει, ενώ η συνεισφορά όλων των υπολοίπων μπορεί να θεωρηθεί αμελητέα ακόμα και αν συνυπολογιστούν. Κάτι τέτοιο συμβαίνει συχνά σε χαμηλές θερμοκρασίες, αφού δεν υπάρχει αρκετή θερμική ενέργεια για να περάσει το σύστημα από τις υψηλότερες διεγερμένες ενεργειακές καταστάσεις. Έτσι παραμένει τον περισσότερο χρόνο του στη θεμελιώδη κατάσταση ή σε κάποιες από τις χαμηλότερες διεγερμένες ενεργειακές καταστάσεις, οπότε τα παραπάνω αθροίσματα μπορεί να καθοριστούν από εκατό, δέκα ή ακόμα και μια μικροκατάσταση [16].

Από την άλλη, αν βρούμε κάποιον τρόπο να μάθουμε ποιες από τις μικροκαταστάσεις καθορίζουν τα αθροίσματα της εξίσωσης (4.6) και να πάρουμε ένα δείγμα M μικροκαταστάσεων μόνο από αυτές, αγνοώντας όλες τις άλλες, θα έχουμε έναν πολύ καλό εκτιμητή της $\langle Q \rangle$ μόνο με ένα μικρό αριθμό όρων. Η τεχνική να επιλέγονται οι σημαντικότερες μικροκαταστάσεις από έναν πολύ μεγάλο αριθμό πιθανών μικροκαταστάσεων λέγεται αντιπροσωπευτική δειγματοληψία (importance sampling). Αυτή είναι και η βασική ιδέα όχι μόνο πίσω από τις μεθόδους Monte Carlo αλλά και από άλλες αριθμητικές μεθόδους.

Σε γενικές γραμμές η στρατηγική μας είναι να επιλέξουμε M μικροκαταστάσεις με τέτοιο τρόπο ώστε η πιθανότητα καθεμιάς από αυτές να δίνεται από τη σχέση (4.3). Έτσι ο εκτιμητής μας για την ποσότητα $\langle Q \rangle$ παίρνει τη μορφή

$$Q_M = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M Q_{\mu i} \quad (4.8).$$

Παρατηρούμε ότι οι παράγοντες Boltzmann έχουν απλοποιηθεί τόσο στον αριθμητή όσο και στον παρονομαστή, δίνοντας μια πολύ απλή εξίσωση. Η εξίσωση αυτή είναι αποτελεσματικότερη από την (4.7), ιδιαίτερα στην περίπτωση που το σύστημα περνά μεγάλο μέρος του χρόνου του σε ένα μικρό αριθμό καταστάσεων (π.χ. στις θεμελιώδεις όταν βρίσκεται σε πολύ χαμηλές θερμοκρασίες), αφού από αυτές τις καταστάσεις θα προκύπτει συνήθως το στατιστικό δείγμα μας και η σχετική συχνότητα της δειγματοληψίας θα αντιστοιχεί ακριβώς στη χρονική διάρκεια που το σύστημα παραμένει σε αυτές τις καταστάσεις. Από εκεί και πέρα το ερώτημα είναι πως ακριβώς θα επιλέξουμε τις μικροκαταστάσεις έτσι ώστε καθεμιά από αυτές να εμφανίζεται με την αντίστοιχη πιθανότητα Boltzmann. Αυτός ακριβώς είναι και ο σκοπός των περισσότερων αλγορίθμων Monte Carlo.

Οι αλγόριθμοι Monte Carlo δεν είναι τίποτε άλλο παρά διαδικασίες Markov [16], δηλαδή κανόνες τυχαίας δημιουργίας μιας νέας μικροκατάστασης του υπό εξέταση συστήματος ξεκινώντας από μια άλλη. Επιλέγουμε ένα σύνολο πιθανοτήτων επιλογής $p(\mu \rightarrow \nu)$, ένα για κάθε πιθανή μετάβαση από μια μικροκατάσταση μ σε μια άλλη ν ($\mu \rightarrow \nu$) και έπειτα διαλέγουμε ένα σύνολο λόγων αποδοχής $A(\mu \rightarrow \nu)$ (acceptance ratios), έτσι ώστε

$$\sum_{\nu} p(\mu \rightarrow \nu) A(\mu \rightarrow \nu) = 1 \quad (4.9).$$

Το γινόμενο της πιθανότητας επιλογής μιας μετάβασης $\mu \rightarrow \nu$ επί τον αντίστοιχο λόγο αποδοχής ονομάζεται πιθανότητα μετάβασης $P(\mu \rightarrow \nu)$, δηλαδή

$$P(\mu \rightarrow \nu) = p(\mu \rightarrow \nu) A(\mu \rightarrow \nu) \quad (4.10).$$

Ο αλγόριθμος δουλεύει διαλέγοντας μια καινούρια μικροκατάσταση, την οποία έπειτα δέχεται ή απορρίπτει τυχαία, με βάση την επιλεγμένη πιθανότητα αποδοχής. Αν η μικροκατάσταση γίνει δεκτή, ο υπολογιστής αλλάζει το σύστημα στη νέα κατάσταση ν . Αν όχι, απλώς το αφήνει όπως είναι. Στη συνέχεια η διαδικασία επαναλαμβάνεται ξανά και ξανά.

Οι πιθανότητες επιλογής $p(\mu \rightarrow \nu)$ πρέπει να διαλεχτούν έτσι ώστε να πληρείται η συνθήκη της εργοδικότητας ή της προσβασιμότητας, η απαίτηση δηλαδή κάθε μικροσκοπική κατάσταση να είναι προσπελάσιμη από οποιαδήποτε άλλη, έστω και με ένα μεγάλο αριθμό επαναλήψεων του δοσμένου αλγορίθμου. Επίσης ο λόγος αποδοχής $A(\mu \rightarrow \nu)$ χρειάζεται να ικανοποιούν τη συνθήκη της μικροαντιστρεψιμότητας ή της λεπτομερούς ισορροπίας (detailed balance), πράγμα που εκφράζεται με τη συνθήκη ([11], [16], [78])

$$p_{\mu}p(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu) = p_{\nu}p(\nu \rightarrow \mu)A(\nu \rightarrow \mu) \quad (4.11).$$

Όσο και αν αυτό φαίνεται παράξενο, υπάρχουν αρκετά περιθώρια για την επιλογή των p και A . Έτσι, αν δοθεί μια αρχική μικροκατάσταση μ ενός μαγνητικού συστήματος, μπορούμε να δημιουργήσουμε έναν αριθμό υποψηφίων καταστάσεων ν αναστρέφοντας απλώς διαφορετικά σύνολα μαγνητικών ροπών του. Ωστόσο, όπως γνωρίζουμε από τη στατιστική μηχανική, οι ενέργειες των συστημάτων στις μικροκαταστάσεις θερμικής ισορροπίας εκτός από την κρίσιμη παραμένουν σε μια πολύ στενή περιοχή τιμών, αφού οι διακυμάνσεις της ενέργειας είναι πολύ μικρές σε σχέση με την ολική ενέργεια του συστήματος. Με άλλα λόγια, το σύστημα περνά το μεγαλύτερο μέρος του χρόνου του σε ένα σύνολο μικροκαταστάσεων με ενέργειες μέσα σε μια στενή περιοχή τιμών και σπάνια πραγματοποιεί μεταβάσεις που αλλάζουν δραματικά την ενέργειά του. Αυτό μας λέει ότι πιθανόν να μη χρειάζεται όταν προσομοιώνουμε φυσικά συστήματα σε κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας να ξοδεύουμε πολύ χρόνο στην προσομοίωσή μας θεωρώντας μεταβάσεις σε μικροκαταστάσεις των οποίων η ενέργεια διαφέρει σημαντικά από την ενέργεια της αρχικής.

Ο απλούστερος τρόπος για να το πετύχουμε αυτό σε ένα μοντέλο μαγνητικού συστήματος είναι να ασχοληθούμε μόνο με εκείνες τις μικροκαταστάσεις που διαφέρουν από την αρχική κατά την αναστροφή (flip) μιας μόνο μαγνητικής ροπής (spin). Ένας αλγόριθμος που κάνει αυτό λέμε ότι έχει δυναμική ενός spin-flip. Από τους αλγόριθμους που θα εξετάσουμε στη συνέχεια ([11], [16], [78]), ο αλγόριθμος Metropolis και ο αλγόριθμος του Heat-Bath (κλουτρώ θεرمότητα) έχουν δυναμική ενός spin-flip και χαρακτηρίζονται από ορισμένο για τον καθένα λόγο αποδοχής. Αντίθετα, οι αλγόριθμοι Wolff-Niedermayer και Swendsen-Wang εξετάζουν την αναστροφή μεγάλων ομάδων spin (πλειάδες ή clusters), τα οποία δημιουργούνται με βάση ορισμένες κατάλληλες συνθήκες.

Το πλεονέκτημα της προσομοίωσης Monte Carlo είναι ότι για να πάρουμε ακριβείς εκτιμήσεις φυσικών ποσοτήτων χρειαζόμαστε μόνο ένα δείγμα αποτελούμενο από κάποιο σχετικά μικρό σύνολο μικροκαταστάσεων του συστήματος, δηλαδή δεν χρειάζεται να συμπεριλάβουμε κάθε μικροκατάσταση του συστήματος για να έχουμε μια ικανοποιητική εκτίμηση ενός φυσικού μεγέθους. Το βασικό μειονέκτημά της είναι ότι υπάρχουν στατιστικά σφάλματα στους υπολογισμούς εξαιτίας ακριβώς του γεγονότος ότι δεν συμπεριλαμβάνουμε κάθε δυνατή μικροκατάσταση, αλλά μόνον ένα μικρό σύνολο αυτών. Αυτό σημαίνει ότι θα υπάρχει στατιστικός θόρυβος, ιδιαίτερα στη συνάρτηση επιμερισμού, που δίνεται από τη σχέση (1.22). Λόγω αυτού του θορύβου η παραγωγή της συνάρτησης επιμερισμού είναι πάντοτε προβληματική, επομένως ο υπολογισμός μέσων τιμών από παραγώγους της συνάρτησης επιμερισμού δεν είναι στην περίπτωση μας καλή μέθοδος. Αντίθετα είναι συνήθως καλύτερα στις προσομοιώσεις να υπολογίζουμε όσο περισσότερες αναμενόμενες τιμές μπορούμε απευθείας, χρησιμοποιώντας εξισώσεις όπως οι (1.25), (1.26), (1.27). Μπορούμε επίσης να χρησιμοποιήσουμε τις σχέσεις (1.34)

και (1.35) για την εύρεση της ισόθερμης επιδεικτικότητας και της θερμοχωρητικότητας υπό σταθερό H (ανά δομικό λίθο) χωρίς παραγωγίσεις.

4.2 Ο αλγόριθμος Metropolis

Ο πρώτος αλγόριθμος Monte Carlo που θα παρουσιάσουμε σε αυτήν την εργασία είναι ένας από τους πιο διάσημους και πλέον χρησιμοποιούμενους, ο αλγόριθμος Metropolis, ο οποίος εισήχθη από το Nicolas Metropolis και τους συνεργάτες του σε μια δημοσίευση του 1953 [79] με αντικείμενο τις προσομοιώσεις αερίων σκληρών σφαιρών. Χρησιμοποιούμε πολύ αυτόν τον αλγόριθμο στις προσομοιώσεις Monte Carlo της παρούσας εργασίας. Ας δούμε λοιπόν πώς λειτουργεί.

Η επιλογή της δυναμικής ενός spin-flip εξασφαλίζει ότι ο αλγόριθμός μας υπακούει στη συνθήκη της εργοδικότητας, αφού είναι φανερό ότι μπορούμε να μεταβούμε από μια οποιαδήποτε μικροκατάσταση σε κάθε άλλη σε ένα πεπερασμένο μαγνητικό ή άλλο ισοδύναμο σύστημα με αναστροφή όλων των spin ως προς τα οποία διαφέρουν οι δύο καταστάσεις. Στον αλγόριθμο Metropolis ([11], [16], [78]) οι πιθανότητες επιλογής $p(\mu \rightarrow \nu)$ για καθεμιά από τις δυνατές μικροκαταστάσεις ν διαλέγονται να είναι όλες ίσες, ενώ οι υπόλοιπες θεωρούνται μηδέν. Υποθέτουμε ότι υπάρχουν N μαγνητικές ροπές στο μαγνητικό σύστημα το οποίο προσομοιώνουμε. Με δυναμική ενός spin-flip, υπάρχουν τότε N διαφορετικά spin που μπορούμε να αναστρέψουμε και επομένως N δυνατές μικροκαταστάσεις ν στις οποίες μπορούμε να φτάσουμε από δοσμένη μικροκατάσταση μ . Υπάρχουν επομένως N πιθανότητες επιλογής $p(\mu \rightarrow \nu)$ που είναι μη μηδενικές και καθεμιά από αυτές παίρνει την τιμή

$$p(\mu \rightarrow \nu) = \frac{1}{N} \quad (4.12).$$

Με αυτές τις πιθανότητες επιλογής, η συνθήκη της λεπτομερούς ισορροπίας (4.11) γράφεται

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = \exp[-\beta(E_\mu - E_\nu)] \quad (4.13).$$

Τώρα έχουμε να διαλέξουμε τους λόγους αποδοχής $A(\mu \rightarrow \nu)$ ώστε να ικανοποιούν αυτήν την εξίσωση. Η συνθήκη λεπτομερούς ισορροπίας (4.13) όπως είπαμε δεν απαιτεί μια συγκεκριμένη συναρτησιακή μορφή για το λόγο αποδοχής. Η ισότητα καθορίζει μόνο το λόγο των ζευγών των λόγων αποδοχής, κάτι το οποίο μας δίνει αρκετά περιθώρια ελιγμών.

Στην πράξη ([11], [16], [78]) ένας αποτελεσματικός τρόπος μεγιστοποίησης του λόγου αποδοχής (και επομένως παραγωγής ενός αποτελεσματικού αλγορίθμου) όταν δίνεται ένας περιορισμός σαν τον (4.13) είναι πάντοτε να

δίνουμε στο μεγαλύτερο από τους δύο λόγους $A(\mu \rightarrow \nu)$ τη μέγιστη δυνατή τιμή-τη μονάδα- και έπειτα να ρυθμίζουμε την άλλη έτσι ώστε να ικανοποιεί τον περιορισμό αυτό. Για να δούμε πώς αυτό δουλεύει στην περίπτωση μας, υποθέτουμε ότι από τις δύο εξεταζόμενες μικροκαταστάσεις μ και ν , η μ έχει τη μικρότερη ενέργεια και η ν τη μεγαλύτερη, δηλαδή $E_\mu < E_\nu$. Τότε μεγαλύτερος των δυο λόγων αποδοχής είναι ο $A(\nu \rightarrow \mu)$, επομένως τον θέτουμε ίσο με ένα. Στην περίπτωση αυτή, για να ικανοποιείται η ισότητα (4.13), ο $A(\mu \rightarrow \nu)$ πρέπει να παίρνει την τιμή $\exp(\beta(E_\mu - E_\nu))$. Επομένως ο επιλεγμένος αλγόριθμος είναι αυτός στον οποίο

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} \exp[-\beta(E_\nu - E_\mu)], & \text{αν } E_\nu - E_\mu > 0 \\ 1, & \text{αν } E_\nu - E_\mu \leq 0 \end{cases} \quad (4.14).$$

Με άλλα λόγια, αν επιλέξουμε μια νέα μικροκατάσταση η οποία έχει ενέργεια μικρότερη ή ίση της αρχικής, θα πρέπει πάντοτε να αποδεχόμαστε τη μετάβαση σε αυτήν. Αν αυτή έχει μεγαλύτερη ενέργεια τότε ίσως αποδεχτούμε τη μετάβαση, με την πιθανότητα που δίνεται παραπάνω.

Αυτός είναι ο αλγόριθμος Metropolis για μοντέλα όπως το Ising ή το Baxter-Wu με δυναμική ενός spin-flip. Είναι η ισότητα (4.14) η οποία τον κάνει αλγόριθμο Metropolis. Αυτό είναι το σημείο στο οποίο έγιναν πρωτοπόροι ο Metropolis και οι συνεργάτες του στη δημοσίευσή τους πάνω στα αέρια σκληρών σφαιρών. Κάθε αλγόριθμος που εφαρμόζεται σε οποιοδήποτε μοντέλο, ο οποίος διαλέγει πιθανότητες αποδοχής σύμφωνα με έναν κανόνα σαν τον (4.12) μπορεί να λέγεται αλγόριθμος Metropolis. Κατ' αρχήν, αυτός ο κανόνας μπορεί να φαίνεται λίγο παράξενος, ιδιαίτερα το μέρος όπου πάντοτε διαλέγουμε μια μετάβαση που χαμηλώνει την ενέργεια του συστήματος. Ωστόσο, όπως έχουμε ήδη δείξει, ο αλγόριθμος Metropolis ικανοποιεί τη λεπτομερή ισορροπία και είναι αρκετά αποτελεσματικός στις περισσότερες περιπτώσεις προσομοιώσεων. Έτσι έχει γίνει η πιο συνηθισμένη επιλογή αλγορίθμου για τη μεγάλη πλειοψηφία των μελετών απλών μοντέλων της στατιστικής μηχανικής με μεθόδους Monte Carlo τα τελευταία σαράντα χρόνια ([11], [16], [78]).

4.3 Ο αλγόριθμος Heat-Bath («λουτρού θερμότητας»)

Ο αλγόριθμος Heat-Bath είναι επίσης ένας αλγόριθμος ενός spin-flip, αλλά πιο αποτελεσματικός στο να βρίσκει ενεργειακά επιθυμητές μικροκαταστάσεις ([11], [16], [78]). Χρησιμοποιείται ιδιαίτερα στα μοντέλα Potts, τα οποία μοιάζουν με το απλό μοντέλο Ising, αλλά υπάρχουν περισσότερες από δυο επιτρεπτές τιμές του spin. Στην περίπτωση μοντέλων όπου υπάρχουν δυο μόνο επιτρεπτές τιμές του spin, όπως το Ising, ο αλγόριθμος θα περιλαμβάνει την τυχαία επιλογή ενός spin και έπειτα, ανεξάρτητα από την τρέχουσα κατάσταση του, την τοποθέτησή του είτε προς τα πάνω είτε προς τα κάτω με αντίστοιχες πιθανότητες p_{up} και p_{down} , τις

$$p_{up} = \frac{\exp(-\beta E_{up})}{\exp(-\beta E_{up}) + \exp(-\beta E_{down})} \quad (4.15),$$

$$p_{down} = \frac{\exp(-\beta E_{down})}{\exp(-\beta E_{up}) + \exp(-\beta E_{down})} \quad (4.16).$$

Οι τελευταίες θα είναι πιθανότητες κατά Boltzmann και οι τιμές τους θα προκύπτουν από το λεγόμενο «λουτρό θερμότητας» (Heat-Bath). Είναι φανερό ότι ο ανωτέρω αλγόριθμος ικανοποιεί τόσο την εργοδικότητα, αφού σε ένα σύστημα N spins με κατάλληλη ακολουθία spin-flips μπορούμε να μεταβούμε από μια κατάσταση σε οποιαδήποτε άλλη με N το πολύ βήματα, όσο και τη συνθήκη λεπτομερούς ισορροπίας στη μορφή

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = \exp[-\beta(E_{down} - E_{up})] \quad (4.17).$$

Τώρα υποθέτουμε ότι η αρχική κατάσταση του spin είναι κάτω. Τι λόγο αποδοχής A θα δίνουν αυτές οι εξισώσεις για την κίνηση κατά την οποία το spin αναστρέφεται και πηγαίνει στην πάνω κατάσταση; Είναι φανερό πως ο λόγος αποδοχής θα είναι απλώς $A = p_{up}$. Αν πολλαπλασιάσουμε τον αριθμητή και τον παρονομαστή της (4.17) με την ποσότητα $\exp[0,5\beta(E_{up}+E_{down})]$, μπορούμε να τον γράψουμε με όρους εξαρτώμενους από την αλλαγή της ενέργειας $\Delta E = E_{up} - E_{down}$:

$$A = \frac{1}{1 + \exp(\beta \Delta E)} \quad (4.18).$$

Είναι εύκολο να δείξουμε ότι η ίδια έκφραση εφαρμόζεται και στην περίπτωση της κίνησης (αναστροφής) του spin από πάνω προς τα κάτω. Επομένως, για μοντέλα με δυο μόνο επιτρεπτές τιμές του spin, ο αλγόριθμος Heat-Bath μπορεί να θεωρηθεί σαν ένας αλγόριθμος ενός spin-flip, με λόγο αποδοχής που είναι συνάρτηση της αλλαγής στην ενέργεια ΔE , όπως ο αλγόριθμος Metropolis, αν και η ακριβής συναρτησιακή εξάρτηση του A από τη ΔE είναι διαφορετική από την αντίστοιχη Metropolis ([11], [16], [78]).

4.4 Αλγόριθμοι πλειάδων (cluster)

Όπως έχει ήδη συζητηθεί στο κεφάλαιο 1, καθώς πλησιάζουμε την κρίσιμη περιοχή, στο σύστημα παρουσιάζονται ολόκληρες περιοχές με την ίδια τιμή της spin- μαγνητικής ροπής, γνωστές και ως “domains”. Επίσης, εμφανίζονται περιοχές του συστήματος στις οποίες οι τιμές των spin-μαγνητικών ροπών είναι ισχυρά συσχετισμένες. Οι περιοχές αυτές των ισχυρά συσχετισμένων

μαγνητικών ροπών καλούνται πλειάδες (clusters) και διαφέρουν από τα domains στο ότι οι μαγνητικές ροπές δεν έχουν υποχρεωτικά την ίδια τιμή αλλά οι τιμές τους συσχετίζονται ισχυρά μεταξύ τους. Η λέξη πλειάδα αποτελεί μια απόδοση στα ελληνικά του αγγλικού όρου cluster, η οποία προτάθηκε από τους Λυκουργιώτη και Κορδούλη ([13], [14]), χωρίς όμως να έχει γίνει πλήρως αποδεκτή, ενώ εναλλακτικά έχουν προταθεί και οι όροι συσσωμάτωμα και σύμπλεγμα, πλην όμως δε θεωρούμε ότι αποδίδουν ορθά το περιεχόμενο της έννοιας αυτής. Πάντως οι πλειάδες επηρεάζουν τόσο την παράμετρο τάξης όσο και την ενέργεια του συστήματος, οπότε η αναστροφή τους στο κρίσιμο σημείο προκαλεί ισχυρές διακυμάνσεις στις τιμές των παραπάνω φυσικών ποσοτήτων. Καθώς μάλιστα οι διακυμάνσεις αυτές συσχετίζονται με την ισόθερμη μαγνητική επιδεκτικότητα και τη θερμοχωρητικότητα με τις σχέσεις (1.34) και (1.35), συμπεραίνουμε ότι και αυτές θα αποκλίνουν κοντά στα κρίσιμα σημεία. Οι κρίσιμες διακυμάνσεις είναι ένα φυσικό φαινόμενο που έχει προκαλέσει την προσοχή πολλών ερευνητών και συνεπώς τη συστηματική διερεύνησή τους, ιδίως με τεχνικές Monte Carlo.

Η προσομοίωση φυσικών συστημάτων όπως το πρότυπο του Baxter-Wu και οι γενικεύσεις του σε τριγωνικά πλέγματα επιτυγχάνεται στις περισσότερες περιπτώσεις αξιοποιώντας απλώς τον τυπικό αλγόριθμο Metropolis, ο οποίος περιλαμβάνει μόνο μεμονωμένες αναστροφές spin. Όμως, μεγάλο μέρος της παρούσας εργασίας είναι αφιερωμένο στη μελέτη αλλαγών φάσης και μάλιστα κρίσιμων, για τις οποίες ο παραπάνω αλγόριθμος και γενικότερα οι αλγόριθμοι ενός spin-flip είναι γενικά ακατάλληλοι ([11], [16], [78]). Ένας λόγος για αυτό είναι ότι οι κρίσιμες διακυμάνσεις εισάγουν σημαντικά στατιστικά σφάλματα στην ενέργεια και στην παράμετρο τάξης των φυσικών συστημάτων, τα οποία μεγαλώνουν πλησιάζοντας τα κρίσιμα σημεία. Φυσικά, επειδή στους ηλεκτρονικούς υπολογιστές προσομοιώνεται η συμπεριφορά φυσικών συστημάτων πεπερασμένου μεγέθους, δεν πρόκειται ποτέ να παρατηρήσουμε απευθείας τους απειρισμούς των διακυμάνσεων των φυσικών μεγεθών που αναμένονται στο θερμοδυναμικό όριο, ωστόσο οι μεγάλες διακυμάνσεις συνεπάγονται αντίστοιχα μεγάλα στατιστικά σφάλματα.

Ο μόνος τρόπος να μειώσουμε αυτά τα σφάλματα είναι να αυξήσουμε τον αριθμό των ανεξάρτητων μετρήσεων που λαμβάνουμε σε μια προσομοίωση Monte Carlo. Ο αριθμός αυτός είναι αντίστροφα ανάλογος με ένα μέγεθος που ονομάζεται χρόνος συσχέτισης (correlation time- τ_{cor}) [16], όπως θα δούμε αναλυτικότερα στο κεφάλαιο 6. Στην κρίσιμη περιοχή, ο χρόνος συσχέτισης μεγαλώνει και μάλιστα στο θερμοδυναμικό όριο απειρίζεται. Φυσικά, στα πεπερασμένα συστήματα για τα οποία λαμβάνει χώρα η προσομοίωσή μας δεν παρατηρούνται απειρισμοί του χρόνου συσχέτισης, ωστόσο μπορεί να γίνει αρκετά μεγάλος ώστε ο αριθμός των ανεξάρτητων μετρήσεων που μπορούν να ληφθούν για ορισμένη χρονική διάρκεια της προσομοίωσής μας να μειωθεί δραστικά. Το φαινόμενο αυτό της απόκλισης του χρόνου συσχέτισης στην κρίσιμη περιοχή ονομάζεται κρίσιμη επιβράδυνση (critical slowing-down effect) [16] και θα μπορούσε από μόνο του να προκαλέσει σημαντική αύξηση

των σφαλμάτων των υπολογιζόμενων φυσικών μεγεθών. Οι συνέπειές του φυσικά γίνονται σημαντικότερες αν συνδυαστούν με τις κρίσιμες διακυμάνσεις του αντίστοιχου συστήματος.

Ενώ όμως οι κρίσιμες διακυμάνσεις είναι ένα φυσικό φαινόμενο που δεν μπορεί και δεν πρέπει να εξαλειφθεί από κανέναν αλγόριθμο Monte Carlo, δε συμβαίνει το ίδιο και με την κρίσιμη επιβράδυνση, η οποία συνδέεται αποφασιστικά με το είδος του χρησιμοποιούμενου αλγορίθμου για την προσομοίωση ενός συστήματος ([11], [16], [78]). Για παράδειγμα, ο αλγόριθμος Metropolis αλλά και γενικότερα οι αλγόριθμοι ενός spin-flip παρουσιάζουν ισχυρό τέτοιο φαινόμενο εξαιτίας του τρόπου λειτουργίας τους. Η αναστροφή των domains στα κρίσιμα σημεία απαιτεί μεγάλη υπολογιστική προσπάθεια όταν κάθε spin εξετάζεται ξεχωριστά, αφού υπάρχει μεγάλη πιθανότητα απόρριψης μιας αναστροφής spin εξαιτίας των αλληλεπιδράσεων των όμοια προσανατολισμένων γειτόνων του. Η αναστροφή αυτή γίνεται ακόμα δυσκολότερη για spin- μαγνητικές ροπές στο εσωτερικό των domains. Έτσι λοιπόν, αν θέλουμε να προσομοιώσουμε την κρίσιμη συμπεριφορά ενός προτύπου, οφείλουμε να αναζητήσουμε τους κατάλληλους για την περίπτωση αλγορίθμους.

Ένας περισσότερο αποτελεσματικός αλγόριθμος για προσομοιώσεις στην κρίσιμη θερμοκρασία θα εξέταζε και θα ανέστρεφε ολόκληρες περιοχές τους συστήματος με όμοια προσανατολισμένα spin (domains) ή, ορθότερα, περιοχές του συστήματος στις οποίες οι τιμές των μαγνητικών ροπών είναι ισχυρά συσχετισμένες (πλειάδες ή clusters). Τέτοιοι αλγόριθμοι διατυπώθηκαν σε δυο παραλλαγές που προτάθηκαν ή μια από τους Swendsen και Wang το 1987 [80] και η άλλη από τον Uli Wolff το 1989 [81], βασισμένοι στις ιδέες των Fortuin και Kasteleyn (1972- [82]) και Coniglio και Klein (1980-[83]). Παράλληλα, το 1988 ο Ferenc Niedermayer [84] γενίκευσε τις ιδέες των παραπάνω, διατυπώνοντας τις βασικές αρχές των αλγορίθμων αναστροφής πλειάδων (cluster-flipping algorithms ή απλούστερα cluster algorithms), οι οποίες πλέον είναι εφαρμόσιμες σε μεγάλη ποικιλία φυσικών συστημάτων με εξαιρετικά αποτελέσματα. Παραλλαγές προτάθηκαν από τον Kandel και τους συνεργάτες του (multigrid methods- [85]) αλλά και την ομάδα του Machta [86], η οποία έφτιαξε έναν αλγόριθμο αποκλειστικά για την εύρεση της κρίσιμης θερμοκρασίας (invaded cluster algorithm).

Στην περίπτωση του προτύπου Baxter-Wu και των γενικεύσεών του οι Novotny και Evertz πρότειναν το 1992 [87] έναν αλγόριθμο αναστροφής πλειάδων, ο οποίος χρησιμοποιήθηκε ιδιαίτερα από την ομάδα των Deng και Blöte τις τελευταίες δυο δεκαετίες ([45], [48]). Όλες οι ως τώρα δημοσιευθείσες εφαρμογές του αφορούν συστήματα απουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Το πρώτο βήμα για την κατασκευή του είναι η αντικατάσταση της Χαμιλτονιανής (3.1) για μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο $\mathbf{H} = \mathbf{0}$ με την ισοδύναμή της

$$\mathcal{H} = \mathbf{J} \sum_{ij} [\mathbf{E}_{ij}(1) + \mathbf{E}_{ij}(2) + \mathbf{E}_{ij}(3)] \quad (4.19),$$

όπου

$$\mathbf{E}_{ij}(1) = -\mathbf{J}b(1)\sigma_{ij}\sigma_{ij+1}(\sigma_{i+1j+1} + \sigma_{ij-1}) \quad (4.20),$$

$$\mathbf{E}_{ij}(2) = -\mathbf{J}b(2)\sigma_{ij}\sigma_{i+1j+1}(\sigma_{ij+1} + \sigma_{i+1}) \quad (4.21),$$

$$\mathbf{E}_{ij}(3) = -\mathbf{J}b(3)\sigma_{ij}\sigma_{i+1j}(\sigma_{ij-1} + \sigma_{i+1j+1}) \quad (4.22).$$

Για τις τιμές των $b(1)$, $b(2)$, $b(3)$ υπάρχουν τρεις περιπτώσεις, οι οποίες όλες οδηγούν στην ίδια ενέργεια για το συνολικό πλέγμα [28]:

1. $b(1) = b(2) = b(3) = \frac{1}{3}$
2. $b(1) = b(2) = \frac{1}{2}$ και $b(3) = 0$ αλλά και οι ισοδύναμες που προκύπτουν με κυκλική εναλλαγή των αριθμητικών δεικτών 1, 2, 3.
3. $b(1) = b(2)$ και $b(3) = 1$ αλλά και οι ισοδύναμες που προκύπτουν με κυκλική εναλλαγή των αριθμητικών δεικτών 1, 2, 3. Στην περίπτωση αυτή η ενέργεια κάθε δεσμού μπορεί να πάρει τις τιμές $-2\mathbf{J}$, 0 , $+2\mathbf{J}$

Η τελευταία είναι και η απλούστερη δυνατή, για αυτό χρησιμοποιείται στη συνέχεια.

Οι σχηματιζόμενοι δεσμοί μεταξύ δυο spin-μαγνητικών ροπών μπορούν να διακριθούν στις ακόλουθες κατηγορίες:

1. δεσμοί με ενέργεια $+2\mathbf{J}$ που δεν ανήκουν στην πλειάδα και αποκτούν ενέργεια $-2\mathbf{J}$ μετά την αναστροφή της. Ο αριθμός τους θα παριστάνεται με $\mathbf{n}_1$.
2. δεσμοί με ενέργεια $-2\mathbf{J}$ που δεν ανήκουν στην πλειάδα και αποκτούν ενέργεια $+2\mathbf{J}$ μετά την αναστροφή της. Ο αριθμός τους θα παριστάνεται με $\mathbf{m}_1$.
3. δεσμοί με ενέργεια $+2\mathbf{J}$ που δεν ανήκουν στην πλειάδα και αποκτούν ενέργεια μηδέν μετά την αναστροφή της. Ο αριθμός τους θα παριστάνεται με $\mathbf{n}_{10}$.
4. δεσμοί με ενέργεια $-2\mathbf{J}$ που δεν ανήκουν στην πλειάδα και αποκτούν ενέργεια μηδέν μετά την αναστροφή του. Ο αριθμός τους θα παριστάνεται με $\mathbf{m}_{10}$.

5. δεσμοί με ενέργεια μηδέν που δεν ανήκουν στην πλειάδα και αποκτούν ενέργεια $+2J$ μετά την αναστροφή της. Ο αριθμός τους θα παριστάνεται με n_{01} .
6. δεσμοί με ενέργεια μηδέν που δεν ανήκουν στην πλειάδα και αποκτούν ενέργεια $-2J$ μετά την αναστροφή της. Ο αριθμός τους θα παριστάνεται με m_{01} .

Στις ίδιες κατηγορίες μπορούμε να διακρίνουμε και τους δεσμούς που ανήκουν στην πλειάδα (και οι δυο συνδεδεμένες spin-μαγνητικές ροπές ανήκουν στη σχηματιζόμενη πλειάδα), οπότε οι αντίστοιχοι αριθμοί συμβολίζονται με $n_2, m_2, m_{10}, n_{20}, m_{02}, n_{02}$. Οι δεσμοί που δεν αλλάζουν πρόσημο κατά την αναστροφή της πλειάδας δε συμμετέχουν στη μεταβολή της ενέργειας ούτε στο πηλίκιο των λόγων αποδοχής, συνεπώς μπορούν να παραλειφθούν.

Πλέον ο αλγόριθμος, αν ακολουθηθεί η λογική του σχηματισμού και αναστροφής μιας πλειάδας κάθε φορά (αλγόριθμος τύπου Wolff), περιλαμβάνει σε κάθε βήμα τα επόμενα βασικά στάδια:

1. Επιλέγουμε τυχαία 1 spin.
2. Ελέγχουμε τα έξι σημεία που το περιβάλλουν και τα εντάσσουμε στην πλειάδα με πιθανότητα $P_{add}(-2J)$, $P_{add}(0)$, και $P_{add}(+2J)$ ανάλογα με την ενέργεια E_{ij} του δεσμού. Στην περίπτωση που απορριφθούν και τα έξι σημεία το spin αναστρέφεται με πιθανότητα 1 και επιστρέφουμε στο προηγούμενο βήμα.
3. Διατρέχουμε ένα-ένα τα πλεγματικά σημεία τα οποία εντάχθηκαν στην πλειάδα στον προηγούμενο κύκλο. Κάθε ένα από αυτά περιβάλλεται με τη σειρά του από άλλα έξι σημεία. Ελέγχουμε και αυτά για ένταξη στην πλειάδα με τις ίδιες πιθανότητες. Από τον έλεγχο εξαιρούνται τα σημεία που έχουν ενταχθεί στην πλειάδα είτε σε προηγούμενο κύκλο είτε στον τρέχοντα (ως περιβάλλοντα προηγούμενου πλεγματικού σημείου).
4. Η συγκρότηση της πλειάδας τελειώνει στον κύκλο στον οποίο δεν εντάσσεται κανένα νέο σημείο.
5. Παρατηρούμε ότι το αρχικό τριγωνικό πλέγμα T μπορεί να διαιρεθεί σε τρία επίσης τριγωνικά ισοδύναμα υποπλέγματα L_{T1} , L_{T2} και L_{T3} . Από τη συνένωση δυο οποιωνδήποτε από τα παραπάνω υποπλέγματα προκύπτει ένα πλέγμα- κηρήθρα L_H το οποίο είναι δυαδικό (dual) με το παραμένον τριγωνικό πλέγμα [48]. Επιλέγουμε με πιθανότητα $\frac{1}{3}$ ένα από τα τρία υποπλέγματα και από τα spin της πλειάδας αναστρέφουμε εκείνα που ανήκουν στα άλλα δύο. Έπειτα η διαδικασία ξεκινά από την αρχή (επόμενο βήμα).

Στην περίπτωση που ακολουθηθεί η λογική των πολλαπλών πλειάδων (αλγόριθμος τύπου Swendsen και Wang- [48], [80]) τότε δημιουργούμε σε κάθε βήμα πολλές πλειάδες ακολουθώντας τα βήματα 1- 4 και στο 5^ο βήμα επιλέγουμε αν αναστρέψουμε τα spin που ανήκουν στο ελάχιστο επιλεγμένο

πλέγμα- κηρήθρα $\mathcal{L}_H$ και σε καθεμιά από τις πλειάδες με πιθανότητα $\frac{1}{2}$. Η προσέγγιση αυτή δείχνει πιο δύσκολη και χρονοβόρα, ωστόσο, όπως θα δούμε, μπορεί να είναι αποτελεσματικότερη για το πρότυπο Baxter-Wu [48], ιδιαίτερα σε παράλληλα υπολογιστικά συστήματα [16].

Φυσικά, κάθε αλγόριθμος Monte Carlo [16] θα πρέπει να υπακούει σε δυο βασικές αρχές, τις οποίες συζητήσαμε στην §4.1, της εργοδικότητας ή προσβασιμότητας και της μικροαντιστρεψιμότητας ή λεπτομερούς ισορροπίας (4.11). Είναι προφανές ότι έτσι όπως διατυπώθηκε ο προαναφερθείς αλγόριθμος υπακούει εξ ορισμού στην πρώτη συνθήκη, αφού από κάθε κατάσταση μπορούμε να πάμε σε οποιαδήποτε άλλη αναστρέφοντας απλώς ένα ή περισσότερα spin. Ο έλεγχος της συνθήκης λεπτομερούς ισορροπίας ωστόσο απαιτεί περισσότερα βήματα.

Σύμφωνα με το 5^ο βήμα από την αναστροφή μιας πλειάδας θα μεταβάλλονται μόνο οι αριθμοί των δεσμών $\mathbf{m}_1, \mathbf{n}_1$ που δεν ανήκουν στην πλειάδα, ενώ ο αριθμός των δεσμών $\mathbf{n}_0$ με μηδενική ενέργεια παραμένει σταθερός. Αν μ είναι μια μικροκατάσταση του συστήματος και ν είναι μια άλλη, η οποία προκύπτει από την αναστροφή μιας σχηματιζόμενης πλειάδας, η πιθανότητα επιλογής της κατάστασης αυτής θα είναι

$$p(\mu \rightarrow \nu) = [I - P_{add}(+2J)]^{n_1} [I - P_{add}(-2J)]^{m_1} [I - P_{add}(0)]^{n_0} \quad (4.23),$$

ενώ η πιθανότητα επιλογής της κατάστασης μ ξεκινώντας από τη ν θα δίνεται από τη σχέση

$$p(\nu \rightarrow \mu) = [I - P_{add}(+2J)]^{m_1} [I - P_{add}(-2J)]^{n_1} [I - P_{add}(0)]^{n_0} \quad (4.24).$$

Η μεταβολή της ενέργειας κατά τη μετάβαση $\mu \rightarrow \nu$ θα είναι

$$\Delta E(\nu \rightarrow \mu) = E_\nu - E_\mu = 4J(m_1 - n_1) \quad (4.25).$$

Συνδυάζοντας τις εξισώσεις (4.21), (4.22) και (4.23) με τη συνθήκη λεπτομερούς ισορροπίας (4.9) θα έχουμε

$$\frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = \left[\frac{1 - P_{add}(-2J)}{1 - P_{add}(+2J)} \right] e^{2\beta J} \Bigg]^{n_1 - m_1} \quad (4.26).$$

Για να ικανοποιείται η παραπάνω συνθήκη η απλούστερη επιλογή είναι

$$A(\mu \rightarrow \nu) = A(\nu \rightarrow \mu) = 1 \quad (4.27),$$

οπότε

$$\frac{1 - P_{add}(-2J)}{1 - P_{add}(+2J)} = e^{-2\beta J} \quad (4.28).$$

Οι περισσότεροι επιλέγουν $P_{add}(-2J) = 1 - e^{-2\beta J}$ και $P_{add}(0) = P_{add}(+2J) = 0$ (επιλογή τύπου Wolff- [81]), αν και υπάρχουν γενικότερες επιλογές (τύπου Niedermayer- [84]).

Έχει βρεθεί ότι αλγόριθμοι Monte Carlo αναστροφής πλειάδων όπως οι παραπάνω, παρά την αυξημένη πολυπλοκότητά τους και τους υπολογιστικούς πόρους που απαιτούν, λειτουργούν σε πολλές περιπτώσεις καλύτερα από εκείνον Metropolis, υπό την έννοια ότι δίνουν ακριβέστερα αποτελέσματα στον ίδιο υπολογιστικό χρόνο, τουλάχιστον στα κρίσιμα σημεία ([88], [89]). Σε ποιο βαθμό θα μπορούσαν να προσομοιώσουν αλλαγές φάσης 1^{ης} τάξης είναι υπό συζήτηση [48]. Περισσότερα για αυτούς και την αποτελεσματικότητά τους, βασισμένοι σε ποσοτικά στοιχεία, θα έχουμε την ευκαιρία να συζητήσουμε στο κεφάλαιο 6.

4.5 Αλγόριθμοι Εντροπικής Δειγματοληψίας (Entropic Sampling)

Σε πολλές από τις υπολογιστικές προσομοιώσεις της παρούσας διδακτορικής διατριβής χρησιμοποιήσαμε τους αλγορίθμους «Εντροπικής Δειγματοληψίας» (“Entropic Sampling”) και μάλιστα στη μορφή των τυχαίων περιπάτων των Wang- Landau ([90], [91]). Ο λόγος ήταν ότι οι συνήθεις αλγόριθμοι ενός spin flip όπως ο Metropolis, ή οι αλγόριθμοι Monte Carlo αναστροφής πλειάδων ([16], [79], [80], [81], [84], [85], [86]), παρά την ακρίβειά τους σε πολλές περιπτώσεις, παρέχουν αποτελέσματα για συγκεκριμένες κάθε φορά συνθήκες θερμοκρασίας και μαγνητικού πεδίου. Όταν αλλάζουν οι συνθήκες, το πρόγραμμα πρέπει να ξαναεκτελεστεί. Φυσικά, η δυσκολία αυτή μπορεί να παρακαμφθεί με μεθόδους όπως εκείνη του μονού ιστογραμμάτος (single histogram method) ή των πολλαπλών ιστογραμμάτων (multiple histogram method), ωστόσο η ακρίβεια των αποτελεσμάτων τους είναι συζητήσιμη [16].

Ο αλγόριθμος «Εντροπικής Δειγματοληψίας» (“Entropic Sampling”) προτάθηκε από τον Lee το 1993 [90]. Αντίθετα από τους συνήθεις αλγορίθμους Monte Carlo ([6], [11], [16]) οι οποίοι δημιουργούν απευθείας μια κανονική κατανομή σε ορισμένη θερμοκρασία T και μαγνητικό πεδίο H , η μέθοδος «Εντροπικής Δειγματοληψίας» (“Entropic Sampling”) εκτιμά απευθείας την πυκνότητα των καταστάσεων $W(E)$. Μπορεί επίσης να χρησιμοποιηθεί για τον υπολογισμό της πυκνότητας καταστάσεων $W(E, M)$ στο χώρο E - M , δηλαδή του αριθμού των μικροκαταστάσεων spin για συγκεκριμένες τιμές της ενέργειας E και της μαγνήτισης M . Ο λόγος που ο συγκεκριμένος αλγόριθμος ονομάζεται έτσι είναι ότι η προαναφερθείσα πυκνότητα των καταστάσεων συνδέεται με την εντροπία κατά Boltzmann στη μικροκανονική συλλογή σύμφωνα με την εξίσωση [10]

$$S(E, M) = k_B \ln [W(E, M)] \quad (4.29),$$

Στο μοντέλο που μελετάμε η μαγνήτιση M και η οφειλόμενη στις μικροκαταστάσεις ενέργεια E δίνονται με βάση τη Χαμιλτονιανή του μοντέλου Baxter-Wu από τις εξισώσεις

$$E = -J \sum_{\langle i,j,k \rangle} \sigma_i \sigma_j \sigma_k \quad (4.30),$$

$$M = \sum_i \sigma_i \quad (4.31),$$

ώστε αυτή να γράφεται ως εξής

$$\mathcal{H} = E - HM \quad (4.32).$$

Στη συνέχεια θα δώσουμε μια σχετικά συνοπτική περιγραφή των βασικών σημείων του αλγορίθμου «Εντροπικής Δειγματοληψίας» (“Entropic Sampling”). Για περισσότερες λεπτομέρειες καλό είναι ο ενδιαφερόμενος αναγνώστης να ανατρέξει στη σχετική ειδική βιβλιογραφία ([16], [78], [90], [91]). Στην έναρξη της προσομοίωσης, η πυκνότητα των καταστάσεων είναι άγνωστη, άρα είναι λογικό να θέσουμε $W(E, M) = 1$ για όλα τα ζεύγη (E, M) . Αν μ και ν είναι δυο καταστάσεις πριν και μετά την αναστροφή ενός spin οι οποίες παριστάνονται στο χώρο E - M με τα σημεία (E_μ, M_μ) και (E_ν, M_ν) , αντίστοιχα, η πιθανότητα μετάβασης $A(\mu \rightarrow \nu)$ θα είναι:

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \min \left[\frac{W(E_\mu, M_\mu)}{W(E_\nu, M_\nu)}, 1 \right] \quad (4.33).$$

Έτσι λοιπόν αρχίζουμε να αναστρέφουμε spins με τυχαίο τρόπο και να αποδεχόμαστε τις αναστροφές σύμφωνα με τον παραπάνω λόγο αποδοχής. Αν η νέα κατάσταση γίνει δεκτή, μεταβάλλουμε την αρχική πυκνότητα των καταστάσεων σύμφωνα με τη σχέση

$$W(E_\nu, M_\nu) \rightarrow h(E_\nu, M_\nu) W(E_\nu, M_\nu) \quad (4.34),$$

ενώ παράλληλα ενημερώνουμε το ιστόγραμμα h σύμφωνα με τη σχέση

$$h(E_\nu, M_\nu) \rightarrow h(E_\nu, M_\nu) + 1.0000 \quad (4.35).$$

Αν η νέα κατάσταση, η οποία παριστάνεται με το σημείο (E_ν, M_ν) δεν είναι αποδεκτή, ενημερώνουμε την πυκνότητα των καταστάσεων και το ιστόγραμμα ως εξής:

$$W(E_\mu, M_\mu) \rightarrow h(E_\mu, M_\mu) W(E_\mu, M_\nu) \quad (4.36),$$

$$h(E_\mu, M_\mu) \rightarrow h(E_\mu, M_\mu) + 1.0000 \quad (4.37).$$

Η προηγούμενη διαδικασία σταματά όταν ολοκληρωθεί η σύγκλιση σε μια σταθερή τιμή της πυκνότητας των καταστάσεων, με άλλα λόγια όταν το ιστόγραμμα $h(E, M)$ γίνει λείο στο χώρο E - M . Στη συνέχεια οι παρατηρήσιμες φυσικές ποσότητες μπορούν να υπολογιστούν εφαρμόζοντας τους τύπους της κανονικής κατανομής από τη στατιστική φυσική.

Σύμφωνα με τους Wang και Landau [91], η προσέγγιση της $W(E, M)$ βελτιώνεται σε κάθε βήμα του τυχαίου περιπάτου, χρησιμοποιώντας έναν προσεκτικά επιλεγμένο συντελεστή μεταβολής f , για να προκύψει ένα αποτέλεσμα το οποίο να συγκλίνει στην πραγματική τιμή, ακόμα και για συστήματα μεγάλων διαστάσεων. Αυτός ο συντελεστής εισάγει ένα συστηματικό σφάλμα για την εκτιμώμενη πυκνότητα καταστάσεων. Το μέγεθος αυτού του σφάλματος για $\ln[W(E, M)]$ είναι ανάλογο του $\ln f$. Για να μειωθεί αυτό το σφάλμα, ο πολλαπλασιαστικός συντελεστής μειώνεται συστηματικά σύμφωνα με τη σχέση [91]

$$f_{i+1} = \sqrt[n]{f_i} \quad (4.38),$$

με $n > 1$ και το i εδώ δηλώνει τον αριθμό των επαναληπτικών εκτελέσεων (iteration) του αλγορίθμου, δηλαδή τον αριθμό των τυχαίων περιπάτων στο διδιάστατο χώρο E - M . Για την ακρίβεια, όταν μια διαταραχή i δημιουργήσει ένα επίπεδο (flat) ιστόγραμμα, τότε σε αυτό αποδίδεται η τιμή μηδέν, και η επόμενη επαναληπτική εκτέλεση ξεκινά με ένα πολλαπλασιαστικό παράγοντα f_{i+1} . Η προσομοίωση τελειώνει όταν ο πολλαπλασιαστικός παράγοντας γίνεται μικρότερος από μια ορισμένη τιμή (όπως η τιμή $f_{\text{final}} = \exp(10^{-8}) \approx 1,00000001$ που χρησιμοποιείται στα πλαίσια της παρούσας εργασίας). Για να επιταχυνθεί η σύγκλιση της πυκνότητας καταστάσεων στην ορθή τιμή, ο αρχικός πολλαπλασιαστικός παράγοντας παίρνει τιμές αρκετά μεγάλες όπως $f = f_0 = e \approx 2,71828$, ενώ στις περισσότερες προσομοιώσεις ισχύει $n = 4$ [91].

Στο σημείο αυτό οφείλουμε να αναφέρουμε ότι δεν είναι δυνατή η κατασκευή ενός απολύτως επίπεδου ιστογράμματος. Ένα ιστόγραμμα θεωρείται επίπεδο αν το $h(E, M)$ για όλα τα δυνατά ζεύγη (E, M) δεν είναι λιγότερο από το $x\%$ της μέσης τιμής του ιστογράμματος, όπου το $x\%$ επιλέγεται ανάλογα με το μέγεθος και την πολυπλοκότητα του συστήματος αλλά και την επιδιωκόμενη ακρίβεια κατά τον υπολογισμό της πυκνότητας των καταστάσεων. Ωστόσο, οι Tsai, Wang and Landau εισήγαγαν ένα λιγότερο αυστηρό κριτήριο ([54], [55], [56]), με τη βοήθεια του οποίου επιτυγχάνεται ταχύτερη σύγκλιση: το ιστόγραμμα θεωρείται επίπεδο όταν ο αριθμός των βημάτων- διαταραχών είναι μεγαλύτερος ή ίσος από το 2000 και παραμένει αμετάβλητος για $10^6 L \times L$ απόπειρες μεταβολής spin-μαγνητικών ροπών, όπου L είναι η διάσταση του

συστήματος. Στα πλαίσια της παρούσας διδακτορικής διατριβής, όπου εργαζόμαστε σε φασικό χώρο δυο διαστάσεων (ενέργεια- μαγνήτιση), χρησιμοποιήθηκε αυτό το κριτήριο, γιατί κρίθηκε αποτελεσματικότερο.

Η μέθοδος των Wang-Landau έχει αποδειχτεί εξαιρετικά χρήσιμη και αποτελεσματική στη μελέτη μεγάλης ποικιλίας συστημάτων, ακόμα και πολύπλοκων με απότομες μεταβολές στην ενέργεια [16], όπως είναι τα «κνυαλιά-spin» (spin-glasses). Γενικεύσεις και επεκτάσεις της μεθόδου έχουν προταθεί από πολλούς επιστήμονες (π.χ. [91], [94], [95], [95], [96]). Ο Αν. Μαλάκης (π.χ. [91][94][95]) από το Πανεπιστήμιο Αθηνών και οι συνεργάτες του τη χρησιμοποίησαν για τον υπολογισμό κρίσιμων εκθετών, βελτιώνοντάς την με την τεχνική CrMES, όπου αντί να χρησιμοποιούνται όλες οι δυνατές ενέργειες επιλέγεται ο βέλτιστος ενεργειακός υπόχωρος ώστε να έχουμε ακριβή αποτελέσματα σε λιγότερο υπολογιστικό χρόνο ([93], [94]). Σε άλλες περιπτώσεις [92], για μεγάλα πλέγματα, ο φασικός χώρος διαιρείται σε κατάλληλες περιοχές, για καθεμιά από τις οποίες εκτελείται προσομοίωση Εντροπικής Δειγματοληψίας και τα αποτελέσματα συνενώνονται κατάλληλα στη συνέχεια. Ωστόσο, αυτή η τεχνική ενδέχεται να εισαγάγει σφάλματα παγίδευσης στη ζητούμενη πυκνότητα των καταστάσεων ολόκληρου του συστήματος αλλά και στον υπολογισμό διάφορων μεγεθών στα κρίσιμα σημεία ενός συστήματος [91]. Για να ξεπεραστούν αυτά οι Dickman και Cunha-Netto πρότειναν το 2011 [96] μια ακόμα βελτίωση της μεθόδου, γνωστή και ως «Τομογραφική Δειγματοληψία» (Tomographic Sampling). Όμως, επειδή αυτή έχει εισαχθεί σχετικά πρόσφατα, δεν κατέστη δυνατή η δοκιμή της στα πλαίσια της παρούσας εργασίας.

4.6 Πρόσθετα στοιχεία για τις προσομοιώσεις στο πρότυπο Baxter-Wu

Στο πρότυπο Baxter-Wu που μελετάμε στα πλαίσια αυτής της εργασίας οι θεωρούμενες μαγνητικές ροπές s_i μπορούν να πάρουν μόνο δυο αντίθετες τιμές, τις ± 1 . Η Χαμιλτονιανή $\mathcal{H}$ του συστήματος δίνεται από τη σχέση (3.1), συνεπώς με κατάλληλη τροποποίηση της τιμής της σταθεράς $\mathbf{J}$ μπορούμε να θεωρούμε ότι οι δυο αντίθετες τιμές της μαγνητικής ροπής θα είναι οι ± 1 . Έτσι οι μαγνητικές ροπές μπορούν να παρασταθούν στον υπολογιστή με τη βοήθεια δισδιάστατων πινάκων ακεραίων. Το ότι το θεωρούμενο κρυσταλλικό πλέγμα είναι τριγωνικό δε δυσκολεύει ουσιαστικά αυτήν την αναπαράσταση, αφού αν θεωρήσουμε διαγώνιους δεσμούς μεταξύ δεύτερων γειτονικών πλεγματικών θέσεων κατά μήκος της μιας διαγωνίου κάθε τετραγώνου ενός τετραγωνικού πλέγματος προκύπτει η τοπολογία του τριγωνικού πλέγματος (μπορούμε να μεταβούμε από το ένα πλέγμα στο άλλο με απλή αποκοπή πλεγματικών σημείων). Ωστόσο, σε όλες τις προσομοιώσεις της διατριβής επιλέχθηκαν παραλληλόγραμμα πλέγματα Baxter-Wu διαστάσεων $L \times (L+3)$ [16] αντί για τα αντίστοιχα τετραγωνικά πλέγματα $L \times L$ γιατί στην τελευταία περίπτωση το σχήμα του πεπερασμένου συστήματος που προκύπτει είναι το ρομβικό, το οποίο έχει διαφορετικές συμμετρίες από το άπειρο σύστημα. Πιο συγκεκριμένα, ο πρώτος έχει δεύτερης τάξης περιστροφική συμμετρία ενώ το δεύτερο έκτης

τάξης περιστροφική συμμετρία [16]. Φυσικά, για συστήματα κοντά στο θερμοδυναμικό όριο κάτι τέτοιο δεν αποτελεί συνήθως πρόβλημα, για μικρότερα όμως είναι δυνατόν να προκαλέσει ανεπιθύμητα αποτελέσματα, κυρίως στον προσδιορισμό φυσικών μεγεθών των οποίων οι τιμές συνδέονται με τις συμμετρίες του συστήματος. Έτσι, όταν αναφερόμαστε στη διάσταση L του πλέγματος θα εννοούμε πλέγμα $L \times (L+3)$ [16].

Επίσης, επειδή το προσομοιούμενο πλέγμα θα είναι οπωσδήποτε πεπερασμένο, χρειάζεται να επιλέξουμε κατάλληλες συνοριακές συνθήκες. Για τους υπολογισμούς μας καταλληλότερες είναι οι περιοδικές συνοριακές συνθήκες, οι οποίες εφαρμόζονται με τη βοήθεια κατάλληλων διαδικασιών-συναρτήσεων. Σε αυτές κάθε πλεγματική θέση στη μια πλευρά του κρυσταλλικού πλέγματος θεωρείται άμεσα γειτονική με αντίστοιχες πλεγματικές θέσεις στην άλλη πλευρά του πλέγματος. Έτσι κάθε πλεγματική θέση όπου και αν βρίσκεται έχει τον ίδιο αριθμό γειτόνων και την ίδια τοπική γεωμετρία με τις υπόλοιπες, με αποτέλεσμα να είναι όλες ισοδύναμες και το σύστημα να έχει μεταφορική συμμετρία. Η επίδραση των συνοριακών συνθηκών περιορίζεται ακόμα περισσότερο αν θεωρήσουμε ένα μεγάλων διαστάσεων πλέγμα με περιοδικές συνοριακές συνθήκες και μελετήσουμε τη συμπεριφορά κατάλληλων υποπλεγμάτων (blocks) αυτού. Η σχετικά πιο σύνθετη αυτή μέθοδος (μέθοδος των υποπλεγμάτων-blocks) καθιερώθηκε από τον Binder [22].

Ακόμα πρέπει να καθορίσουμε τη θερμοκρασία στην οποία θα προσομοιωθεί η συμπεριφορά του μοντέλου μας καθώς και αρχικές τιμές για όλες τις μαγνητικές ροπές, με άλλα λόγια την αρχική κατάσταση του συστήματος. Στην παρούσα εργασία προτιμήσαμε να χρησιμοποιούμε μια κάθε φορά από τις τέσσερις θεμελιώδεις καταστάσεις ($T = 0$) του προτύπου Baxter-Wu, για τις οποίες μιλήσαμε στην §3.1. Άλλη δυνατή επιλογή θα ήταν η αρχική κατάσταση θερμοκρασίας $T = +\infty$, στην οποία η διαθέσιμη θερμική ενέργεια $k_B T$ για την αναστροφή των μαγνητικών ροπών είναι απεριόριστα μεγάλη σε σχέση με την ενέργεια αλληλεπίδρασης μεταξύ τους, οπότε αυτές είναι ελεύθερες να προσανατολιστούν τυχαία πάνω ή κάτω χωρίς να επηρεάζονται από τις μεταξύ τους συσχετίσεις. Για θερμοκρασίες μεγαλύτερες ή ίσες της κρίσιμης η επιλογή των αρχικών συνθηκών δεν επηρεάζει αποφασιστικά τη συμπεριφορά του συστήματος, μπορεί όμως να συντομεύσει το χρόνο ισορροπίας [16], για τον οποίο θα γίνει λόγος παρακάτω. Για θερμοκρασίες μικρότερες από την κρίσιμη η επιλογή τους καθορίζει ποια από τις δυο καταστάσεις σπασμένης συμμετρίας, τη σιδηρομαγνητική ή τη σιδηριμαγνητική θα προτιμήσει το εξεταζόμενο σύστημα (βλέπε §1.3), ιδιαίτερα αν οι διαστάσεις του είναι αρκετά μεγάλες.

Ένα άλλο σημείο που χρήζει ιδιαίτερης προσοχής είναι οι σιδηριμαγνητικές θεμελιώδεις καταστάσεις του προτύπου Baxter-Wu. Το επιλεγμένο πλέγμα πρέπει να είναι τέτοιο ώστε να επιτρέπονται και οι τρεις, δηλαδή να περιλαμβάνει και τα τρία θεωρούμενα υποπλέγματα για τα οποία έγινε λόγος στην §3.2. Με άλλα λόγια χρειάζεται η χαρακτηριστική διάσταση L τόσο του μεγάλου πλέγματος όσο και των θεωρούμενων υποπλεγμάτων του να είναι

ακέραιο πολλαπλάσιο του τρία. Σε αντίθετη περίπτωση έχουμε ένα διαταραγμένο (frustrated) πρότυπο σιδηριμαγνητισμού [31] και τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων θα διαφέρουν αραιά από τα φυσικά αναμενόμενα. Για τον ίδιο λόγο μια παραλλαγή των περιοδικών συνοριακών συνθηκών, οι ελικοειδείς συνοριακές συνθήκες, οι οποίες επιτρέπουν τη χρήση μονοδιάστατων πινάκων για τη μαγνητική ροπή σε δισδιάστατα και τρισδιάστατα προβλήματα αυξάνοντας την ταχύτητα των υπολογισμών, δεν ενδείκνυται στο παρόν πρότυπο.

Το κύριο σημείο [16] κατά τις συνήθεις μεθόδους Monte Carlo είναι η εύρεση της μεταβολής της ενέργειας $\Delta E_{\mu\nu} = E_\nu - E_\mu$ κατά τη μετάβαση από τη μικροκατάσταση μ στη μικροκατάσταση ν . Αυτή η μεταβολή ταυτίζεται με τη μεταβολή της ενέργειας ΔE_{ij} όταν αναστρέφουμε μια μαγνητική ροπή σ_{ij} στην περίπτωση που αναφερόμαστε σε αλγόριθμους ενός spin-flip όπως εκείνος Metropolis. Η επιλογή της εκάστοτε εξεταζόμενης μαγνητικής ροπής σ_{ij} μπορεί να γίνει με δυο τρόπους, είτε με σειριακή σάρωση (τέτοιιοι αλγόριθμοι λέγονται σειριακής σάρωσης- serial) είτε με τυχαία (τέτοιιοι αλγόριθμοι λέγονται τυχαίας σάρωσης- random). Ύστερα υπολογίζουμε τη μεταβολή της ενέργειας του συστήματος για την αναστροφή της επιλεγμένης ροπής και την απορρίπτουμε ή τη δεχόμαστε, συγκρίνοντας έναν τυχαίο αριθμό r με το λόγο αποδοχής (4.14) (αν έχουμε αλγόριθμο Metropolis) ή (4.18) (αν έχουμε αλγόριθμο Heat-Bath). Αν δεχτούμε την αναστροφή αλλάζουμε τη συνολική μαγνητική ροπή και την ενέργεια της μικροκατάστασης του συστήματος, σύμφωνα με τις σχέσεις:

$$m_\nu = m_\mu - 2\sigma_{ij} \quad (4.39),$$

$$E_\nu = E_\mu + \Delta E_{\mu\nu} \quad (4.40).$$

Συνήθως στους υπολογισμούς μας εργαζόμαστε για μηδενικό εξωτερικό πεδίο H και επεκτείνουμε τα αποτελέσματά μας για άλλες τιμές του H με τη μέθοδο του μονού ιστογράμματος, για την οποία θα γίνει λόγος στη συνέχεια. Σε κάθε περίπτωση όμως επιβάλλεται να επιλεγούν προσεκτικά οι πρώτοι γείτονες τους πλεγματικού σημείου (i,j) , οι οποίοι είναι τώρα έξι, οι $(i \pm 1, j)$, $(i, j \pm 1)$, $(i - 1, j + 1)$, $(i + 1, j - 1)$. Αν θυμηθούμε και τη βασική εξίσωση (3.1) τότε εύκολα προκύπτει ότι η ζητούμενη μεταβολή της ενέργειας ΔE_{ij} θα δίνεται από τον τύπο

$$\Delta E_{ij} = 2J\sigma_{ij}(\sigma_{i+1,j+1}\sigma_{i,j+1} + \sigma_{i+1,j+1}\sigma_{i+1,j} + \sigma_{i+1,j}\sigma_{i,j-1} + \sigma_{i,j-1}\sigma_{i-1,j-1} + \sigma_{i-1,j}\sigma_{i-1,j-1} + \sigma_{i-1,j}\sigma_{i,j+1}) \quad (4.41).$$

Εύκολα συμπεραίνουμε πως η ζητούμενη μεταβολή της ενέργειας ΔE_{ij} δεν μπορεί να πάρει οποιαδήποτε τιμή αλλά μόνο ορισμένες. Αυτές είναι, αν $\sigma_{ij} = \pm 1$,

$$\Delta E_{ij} = 0, \pm 4J, \pm 8J, \pm 12J \quad (4.42).$$

Η τελευταία παρατήρηση μπορεί να συμβάλλει σημαντικά στην εξοικονόμηση υπολογιστικού χρόνου, αν προϋπολογίσουμε τις αντίστοιχες τιμές του λόγου αποδοχής για κάθε δυνατή τιμή του λόγου $\Delta E_{ij} \cdot J^{-1}$ και τις αποθηκεύσουμε σε κατάλληλες κοινόχρηστες μεταβλητές. Η μείωση του χρόνου της προσομοίωσης συνδέεται με τον τρόπο με τον οποίο υπολογίζονται τα εκθετικά στους ηλεκτρονικούς υπολογιστές και στις βελτιωμένες επιδόσεις των τελευταίων στην επεξεργασία ακεραίων. Ας σημειωθεί επιπλέον ότι όταν έχουν πραγματοποιηθεί $L \times L$ βήματα Monte Carlo προσομοίωσης (Monte Carlo steps), κατά μέσο όρο ένα για κάθε θέση του $L \times L$ πλέγματος, θα λέμε ότι έχουμε συμπληρώσει μια σάρωση (sweep) του πλέγματος. Οι χρόνοι της προσομοίωσης μετρώνται συνήθως σε Monte Carlo sweeps.

Σε ότι αφορά τον αλγόριθμο Εντροπικής Δειγματοληψίας των Wang και Landau στις προσομοιώσεις του μοντέλου Baxter-Wu, εκτελέσαμε τυχαίους περιπάτους για όλες τις τιμές των ζευγών (E, M) χρησιμοποιώντας έναν επεξεργαστή ανά προσομοιούμενο πλέγμα για τα μικρότερα πλέγματα. Για μεγάλα πλέγματα ($L \geq 36$), διαιρέσαμε το φασικό χώρο σε κατάλληλες περιοχές, καθεμιά από τις οποίες προσομοιώθηκε ξεχωριστά και τα αποτελέσματά τους συνενώθηκαν αργότερα. Η τεχνική αυτή λέγεται τετριμμένη παραλληλία αλγορίθμου. Ο απαιτούμενος υπολογιστικός χρόνος λήψης της πυκνότητας καταστάσεων $W(E, M)$ πλεγμάτων διάστασης $L = 3, 6, 9, \dots, 54$ κυμαίνεται από λίγα λεπτά ως δυο μέρες σε Υπολογιστικό Σύστημα τύπου Συστοιχίας (Cluster) του Υπολογιστικού Κέντρου του Πανεπιστημίου Αθηνών με 6 επεξεργαστές 2.0 GHz AMD Phenom και σε Υπολογιστικό Σύστημα τύπου Συστοιχίας (Cluster) του Τμήματος Φυσικής του Πανεπιστημίου Αθηνών με 31 επεξεργαστές 2.4 GHz Intel Xeon (βλέπε Παράρτημα Α). Ανάλογοι ήταν οι αναγκαίοι χρόνοι και για αντίστοιχων δυνατοτήτων προσωπικούς υπολογιστές (PC's) ή σταθμούς εργασίας (Workstations). Τούτο το γεγονός αναδεικνύει την αποτελεσματικότητα και τη χρησιμότητα του παραπάνω αλγορίθμου, τη στιγμή που οι συνήθεις αλγόριθμοι είτε ενός spin-flip είτε πλειάδων απαιτούν για αντίστοιχου μεγέθους φυσικά συστήματα εβδομάδες ή και μήνες.

Σε αυτό το σημείο πρέπει να αναφέρουμε πώς εξαιτίας της συμμετρίας της συνάρτησης της εντροπίας $S(E, M)$ έχουμε τη σχέση ([9], [10])

$$S(E, M) = S(-E, -M) \quad (4.43).$$

Έτσι, στην ουσία δεν είναι αναγκαίος ο τυχαίος περίπατος σε όλα τα δυνατά ζεύγη (E, M) αλλά για $M \geq 0$ ή $M \leq 0$. Επίσης, αν ενδιαφερόμαστε να μελετήσουμε το σύστημα μόνο υπό αρνητικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο, τότε ο υπόχωρος (E, M) με $-2N \leq E \leq -\frac{2N}{3}$ δίνει μια πολλή καλή εκτίμηση των θερμοδυναμικών παραμέτρων του συστήματος, εξοικονομώντας επιπλέον υπολογιστικούς πόρους και χρόνο.

Στο Παράρτημα Β παραθέτουμε, για λόγους πληρότητας και καλύτερης κατανόησης, τα διαγράμματα ροής [97] των διαδικασιών των προγραμμάτων προσομοίωσης ([6], [11], [16], [87], [91]) στις οποίες υλοποιείται ο αλγόριθμος Metropolis, ο αλγόριθμος Heat-Bath, οι αλγόριθμοι πλειάδων των Novotny και Evertz καθώς και ο αλγόριθμος εντροπικής δειγματοληψίας Wang-Landau (διαγράμματα B.1- B.5).

4.7 Παράλληλοποιώντας τους αλγορίθμους Monte Carlo

Από τη στιγμή που γενικεύτηκε η αριθμητική επίλυση φυσικών και άλλων προβλημάτων σε ηλεκτρονικούς υπολογιστές είτε με προσομοιώσεις Monte Carlo είτε με άλλες μεθόδους, δεν είναι σπάνιο το γεγονός να απαιτείται η επίλυση ενός συστήματος τόσο μεγάλου ή πολύπλοκου ώστε οι διαθέσιμοι πόροι ενός ηλεκτρονικού υπολογιστή να μην επαρκούν για την επίλυσή του, ακόμη και αν πρόκειται για έναν ισχυρό και τελευταίας τεχνολογίας προσωπικό υπολογιστή (PC), σταθμό εργασίας (workstation) ή κεντρικό σύστημα (mainframe). Στην περίπτωση αυτή υπάρχουν δυο λύσεις: είτε περιμένουμε για ένα μικρό ή μεγαλύτερο διάστημα να προχωρήσει η τεχνολογία και να διατεθούν χρήματα για την αγορά ενός ισχυρότερου υπολογιστικού συστήματος είτε προσπαθούμε να αξιοποιήσουμε τους υπολογιστικούς πόρους περισσότερων του ενός υπολογιστών συνδυάζοντάς τους κατάλληλα. Αυτή η τελευταία προσέγγιση [16], μέσα από μια τεχνική που είναι γνωστή και ως παράλληλος προγραμματισμός (parallel computing), κερδίζει διαρκώς έδαφος τα τελευταία χρόνια και, σε συνδυασμό με τη διαρκή εξέλιξη της μικροηλεκτρονικής, έχει επιτρέψει αριθμητικούς υπολογισμούς και προσομοιώσεις που παλαιότερα ήταν σχεδόν αδύνατο να πραγματοποιηθούν. Στη συνέχεια του κεφαλαίου θα εξετάσουμε βασικές εφαρμογές του παράλληλου προγραμματισμού στις προσομοιώσεις Monte Carlo.



Εικόνα 4.1: Ένας αρκετά σύγχρονος Προσωπικός Υπολογιστής (PC) σε λειτουργία.



Εικόνα 4.2: Προσωπικοί Υπολογιστές (PCs) σε λειτουργία. Αν και είναι αρκετά ισχυροί, λειτουργούν ανεξάρτητα ο ένας από τον άλλο, χωρίς να έχουν διασυνδεθεί κατάλληλα ώστε να αποτελέσουν παράλληλο υπολογιστικό σύστημα.

Με τον όρο «κατανεμημένα υπολογιστικά συστήματα» [97] (distributed computing systems) εννοούμε πολλούς ανεξάρτητους ηλεκτρονικούς

υπολογιστές συνδεδεμένους κατάλληλα μεταξύ τους με σκοπό να επιτελέσουν την ίδια εργασία. Όταν οι υπολογιστές αυτοί (πιο σωστά οι μικροεπεξεργαστές τους- CPU's) βρίσκονται στο ίδιο κουτί, συχνά συνοδευόμενοι από κατάλληλες ηλεκτρονικές διατάξεις ώστε να επικοινωνούν γρήγορα μεταξύ τους, τότε μιλάμε για παράλληλο υπολογιστή ή παράλληλο υπολογιστικό σύστημα (parallel computer). Από τη σκοπιά των προσομοιώσεων Monte Carlo, τα ζητήματα που αφορούν τα κατανεμημένα και τα παράλληλα υπολογιστικά συστήματα είναι κατά βάση τα ίδια, οπότε στη συνέχεια θα εξεταστούν με ενιαίο τρόπο.

Υπάρχουν αυτή τη στιγμή στην αγορά δύο κύριες κατηγορίες παράλληλων υπολογιστών [16]: εκείνοι με διαμοιραζόμενη μνήμη και με κατανεμημένη μνήμη. Στην πρώτη περίπτωση όλοι οι μικροεπεξεργαστές (CPU's) χρησιμοποιούν την ίδια μνήμη, την οποία μπορούν να διαβάζουν και να γράφουν ταυτόχρονα, ενώ τοποθετούνται στην ίδια μητρική πλακέτα. Συχνά σε προσομοιώσεις Monte Carlo βολεύουν αυτά τα μηχανήματα, αφού απαιτούν ελάχιστο χρόνο για την επικοινωνία μικροεπεξεργαστών- μνήμης και ο προγραμματισμός τους είναι απλούστερος, είτε με τη βοήθεια της γλώσσας προγραμματισμού FORTRAN 90/95 ή 2003/2008 (εντολές FORALL... ENDFORALL, WHERE...ENDWHERE) είτε με το εργαλείο γραφής παράλληλων προγραμμάτων (open-) MP [98] που συνοδεύει πλέον πολλούς μεταφραστές (compilers) γλωσσών προγραμματισμού, όπως της C++ και της FORTRAN.

Τα τελευταία χρόνια μάλιστα η ραγδαία πρόοδος της μικροηλεκτρονικής έχει επιτρέψει την τοποθέτηση περισσότερων του ενός πυρήνων μικροεπεξεργαστών πραγματικών ή νοητών (μέχρι 8 ως την ώρα που γράφονται αυτές οι γραμμές) στο ίδιο ολοκληρωμένο κύκλωμα, με συνέπεια οι παραπάνω αρχές να μπορούν να βρουν εφαρμογή και σε αρκετούς προσωπικούς υπολογιστές με λογική τιμή αγοράς. Επιπλέον, στο υπολογιστικό κέντρο του Πανεπιστημίου Αθηνών υπάρχει το Υπολογιστικό Σύστημα διαμοιραζόμενης μνήμης URANUS, με 32 επεξεργαστές. Ωστόσο, η υλοποίηση του παραπάνω μοντέλου σε μεγάλα υπολογιστικά συστήματα είναι γενικά δύσκολη και κοστίζει πολύ.

Έτσι, εκεί βρίσκει εφαρμογή το μοντέλο της κατανεμημένης μνήμης [16], όπου κάθε μικροεπεξεργαστής διαθέτει τη δική του, η οποία δεν μπορεί να προσπελαστεί με οποιονδήποτε τρόπο από τους υπόλοιπους. Αυτό σημαίνει όμως ότι αν ο υλοποιούμενος αλγόριθμος απαιτεί σε κάποια του βήματα να γνωρίζει ο ένας επεξεργαστής τι κάνουν κάποιοι άλλοι, αυτοί πρέπει να επικοινωνήσουν μεταξύ τους ανταλλάσσοντας κατάλληλα (συνήθως δικτυακά) μηνύματα. Ίσως κάποια στιγμή, με την εξέλιξη της σχετικής τεχνολογίας, αυτή η διαδικασία τυποποιηθεί και ενσωματωθεί στους μεταφραστές (compilers) γλωσσών προγραμματισμού, ωστόσο προς το παρόν χρειάζεται να χρησιμοποιηθούν για το σκοπό αυτόν κατάλληλα εργαλεία όπως το (open-) MPI (Message Passive Interface), όχι πάντοτε επαρκώς τυποποιημένα. Το γεγονός αυτό περιορίζει σημαντικά τη φορητότητα του αντίστοιχου κώδικα ενώ αυξάνει την πολυπλοκότητά του. Επιπλέον, η ανταλλαγή μηνυμάτων μεταξύ

επεξεργαστών είναι διαδικασία σημαντικά πιο αργή σε σχέση με την επικοινωνία επεξεργαστή- μνήμης. Από την άλλη, οι βασικές αρχές που ισχύουν για τον προγραμματισμό, τη χρήση και τη διαχείριση παράλληλων υπολογιστικών συστημάτων κατανεμημένης μνήμης (συνήθως συστοιχίες- clusters ανεξάρτητων συνεργαζόμενων υπολογιστών) είναι γενικά οι ίδιες με αυτές που ισχύουν για πραγματικά κατανεμημένα υπολογιστικά συστήματα, καθιστώντας κάθε διάκριση μεταξύ τους περιττή, τουλάχιστον για τις ανάγκες αυτού του κεφαλαίου.

Ο απώτερος στόχος κάθε προγραμματιστή παράλληλων υπολογιστικών συστημάτων είναι να εφεύρει για κάθε πρόβλημα έναν κατάλληλο αλγόριθμο ώστε ο απαιτούμενος υπολογιστικός χρόνος να μειώνεται γραμμικά με το διαθέσιμο αριθμό μικροεπεξεργαστών [16]. Με άλλα λόγια θέλουμε, αν είναι δυνατόν, ο αναγκαίος χρόνος να μειώνεται κατά την ίδια τιμή όταν διπλασιάζεται ο αριθμός των διαθέσιμων μικροεπεξεργαστών. Συχνά γίνεται λόγος για την ικανότητα (efficiency) ενός παράλληλου αλγορίθμου, δηλαδή το κλάσμα του ποσοστού αύξησης της ταχύτητας εκτέλεσης ενός προγράμματος προς το ποσοστό αύξησης του αριθμού των χρησιμοποιούμενων μικροεπεξεργαστών. Το ιδεώδες θα ήταν αυτό το ποσοστό να γίνει 100%. Κάτι τέτοιο όμως σπάνια καθίσταται εφικτό. Ο κύριος λόγος είναι, όπως συζητήθηκε παραπάνω, η ανάγκη ανταλλαγής μηνυμάτων μεταξύ των συνεργαζόμενων μικροεπεξεργαστών κατά τη διάρκεια εκτέλεσης του προγράμματος, γεγονός το οποίο εισάγει ένα επιπλέον χρόνο επικοινωνίας στο πρόγραμμα. Ειδικά αν ο αριθμός των απαραίτητα ανταλλασσόμενων μηνυμάτων μεταξύ των εμπλεκόμενων μικροεπεξεργαστών αυξάνει με την αύξηση του αριθμού των μικροεπεξεργαστών, πράγμα που συχνά συμβαίνει, η γραμμική μείωση του απαραίτητου υπολογιστικού χρόνου είναι αδύνατο να επιτευχθεί.

Υπάρχουν τρεις μεγάλες κατηγορίες τεχνικών προκειμένου να κατασκευαστεί ένας παράλληλος αλγόριθμος για την επίλυση ενός προβλήματος [16]: η τετριμμένη παραλληλοποίηση (trivial parallelization), η ανάλυση του προβλήματος κατά συναρτήσεις (functional decomposition) και η ανάλυση του προβλήματος κατά περιοχές (domain decomposition). Προβλήματα τετριμμένα παράλληλα είναι εκείνα τα οποία μπορούν να αναλυθούν σε εντελώς ξεχωριστά τμήματα που μπορούν να υλοποιηθούν με διαφορετικά προγράμματα (καλύτερα εκτελέσιμα αρχεία) σε ανεξάρτητους μικροεπεξεργαστές, χωρίς να απαιτείται η μεταξύ τους επικοινωνία. Για πολλούς θεωρητικούς επιστήμονες των παράλληλων αλγορίθμων αυτή η περίπτωση είναι εντελώς αδιάφορη, ωστόσο σε πρακτικές εφαρμογές όπως είναι οι προσομοιώσεις φυσικών συστημάτων δε θα πρέπει να διστάζουμε να τη χρησιμοποιήσουμε [16].

Έτσι, αρκετές φορές απαιτείται να εκτελεστεί ο ίδιος κατά βάση κώδικας υπό διαφορετικές συνθήκες περιβάλλοντος, με διάφορες αρχικές συνθήκες, για διαφορετικά μεγέθη του μελετώμενου συστήματος ή για διαφορετικά σύνολα τυχαίων αριθμών, προκειμένου να ελεγχθούν τα αποτελέσματα που δίνει ή να βγουν ενδιαφέροντα συμπεράσματα. Εξυπακούεται ότι σε περιπτώσεις όπως η παραπάνω χρησιμοποιούνται όλοι οι κατάλληλοι και κάθε φορά διαθέσιμοι μικροεπεξεργαστές και σε καθένα εκτελείται ο ίδιος κώδικας υπό συγκεκριμένες

κάθε φορά παραμέτρους. Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει στην περίπτωση αυτή η χρήση του αλγορίθμου Εντροπικής Δειγματοληψίας των Wang και Landau για μεγάλα πλέγματα, οπότε υπολογίζουμε την εντροπία για ξεχωριστά τμήματα του χώρου φάσεων (E, M) και στη συνέχεια ενώνουμε κατάλληλα τα αποτελέσματα. Μερικές φορές μάλιστα, ιδίως σε λειτουργικά συστήματα UNIX/ LINUX ή Z- OS, η όλη διαδικασία μπορεί να αυτοματοποιηθεί, με τη χρήση κατάλληλων διαδικασιών (jobs). Δε λείπουν ωστόσο και οι περιπτώσεις που η ανωτέρω λογική δε λειτουργεί. Παράδειγμα, όταν ένας αλγόριθμος προσομοίωσης απαιτεί για την ολοκλήρωσή του 10^8 βήματα, αυτά πρέπει να εκτελεστούν σειριακά στον ίδιο επεξεργαστή, όχι σε πέντε, δέκα ή περισσότερες ανεξάρτητες σειρές, αφού κάθε νέα δημιουργούμενη κατά την εκτέλεση μικροκατάσταση εξαρτάται και από τις προηγούμενες [16].

Όταν το προς επίλυση πρόβλημα δεν μπορεί να θεωρηθεί τετριμμένα παράλληλο, υπάρχουν τρόποι για τη βέλτιστη αντιμετώπισή του [16], η ανάλυσή του κατά συναρτήσεις (functional decomposition) και η ανάλυσή του κατά περιοχές (domain decomposition). Κατά την πρώτη, σε κάθε διαθέσιμο επεξεργαστή ανατίθεται διαφορετικό τμήμα κώδικα, συνήθως ομάδες συναρτήσεων ή υποπρογραμμάτων και τα διαφορετικά αποτελέσματά τους συνδυάζονται στο τέλος. Η λογική αυτή συνηθίζεται σε πολλές εφαρμογές όπως η μοντελοποίηση του κλίματος της Γης ή της λειτουργίας ενός αυτοκινήτου, αλλά συχνά δεν είναι αποτελεσματική για αλγορίθμους Monte Carlo. Στην ανάλυση κατά περιοχές, ιδιαίτερα χρήσιμος τρόπος αντιμετώπισης μεγάλων προσομοιούμενων φυσικών συστημάτων, το αρχικό πλέγμα υποδιαιρείται σε μικρότερα τμήματα, καθένα από τα οποία αναλαμβάνει διαφορετικός διαθέσιμος μικροεπεξεργαστής. Στο τέλος κάθε βήματος της προσομοίωσης, τα επιμέρους αποτελέσματα συνενώνονται για να προκύψει το συνολικό [16].

Χαρακτηριστικά παραδείγματα για την κατανόηση των ανωτέρω στο μοντέλο Baxter-Wu αποτελούν ο αλγόριθμος Metropolis [16] αλλά και ο αλγόριθμος πλειάδων που περιγράψαμε σε προηγούμενη υποενότητα. Στον πρώτο, σε κάθε βήμα το προσομοιούμενο πλέγμα διαιρείται σε τμήματα όσα και ο αριθμός των διαθέσιμων μικροεπεξεργαστών. Καθένας από αυτούς ελέγχει για αναστροφή τις spin- μαγνητικές ροπές ενός από αυτά τα τμήματα και στο τέλος του βήματος τα επιμέρους αποτελέσματα συνδυάζονται για να δώσουν το συνολικό. Όσο για τις spin-μαγνητικές ροπές που βρίσκονται στα όρια των δυο ή περισσότερων περιοχών, αυτές αφήνονται όπως είναι, φροντίζουμε όμως ανά δυο με τρία βήματα να αλλάζουμε τα όρια αυτά. Με τον τρόπο αυτόν ο αλγόριθμος πληροί τόσο τη συνθήκη της λεπτομερούς ισορροπίας όσο και της εργοδικότητας.

Για τους αλγορίθμους πλειάδων που περιγράψαμε σε παραπάνω υποενότητα, έχουν προταθεί διάφορες λύσεις [16]. Εκείνη όμως που παρουσιάζει μεγαλύτερο ενδιαφέρον στο κρίσιμο σημείο είναι να ακολουθήσουμε τη λογική των πολλαπλών πλειάδων σε κάθε βήμα (αλγόριθμος τύπου Swendsen-Wang), καθένα από τα οποία αναστρέφεται με πιθανότητα 50%. Στην περίπτωση αυτή η

δημιουργία κάθε πλειάδα ανατίθεται σε διαφορετικό διαθέσιμο επεξεργαστή, ενώ υπάρχει και ένας (master processor) ο οποίος αναλαμβάνει την αναστροφή όσων spin-μαγνητικών ροπών απαιτείται στο τέλος κάθε βήματος, παράγοντας τις αντίστοιχες μικροκαταστάσεις και τα άλλα αποτελέσματα. Αυτή η προσέγγιση δύναται να επιταχύνει το πρόγραμμα κατά ένα παράγοντα ίσο με τρία σε σχέση με το αντίστοιχο σειριακό [16]. Κάτι καλύτερο είναι μάλλον δύσκολο, αφού ο συνολικός χρόνος εκτέλεσης καθορίζεται και από το χρόνο που ο master-processor χρειάζεται για την ολοκλήρωση της δικής του εργασίας, την οποία δεν μπορεί να μοιραστεί με άλλους. Επιπλέον, ο αρκετά απλούστερος αλγόριθμος μιας πλειάδας ανά βήμα (τύπου Wolff), δεν είναι εύκολο να υλοποιηθεί με την προαναφερθείσα λογική.

4.8 Λίγα λόγια για τους τυχαίους αριθμούς

Το κοινό χαρακτηριστικό όλων των προσομοιώσεων Monte Carlo, αυτό δηλαδή που τις κάνει μεθόδους Monte Carlo, είναι το στοιχείο της τυχαιότητας [16]. Στους υπολογισμούς Monte Carlo όλα συμβαίνουν με έναν πιθανοκρατικό τρόπο και μόνο η εξαγωγή του μέσου όρου πολλών απρόβλεπτων γεγονότων μπορεί να δώσει μια προσεγγιστική απάντηση στο εκάστοτε ερωτήματά μας. Για να δημιουργήσουν τέτοια απρόβλεπτα γεγονότα όλοι οι αλγόριθμοι Monte Carlo χρειάζονται τυχαίους αριθμούς. Αρκεί μάλιστα να βρούμε μια σειρά τυχαίων πραγματικών αριθμών r ομοιόμορφα κατανεμημένων στο διάστημα $[0,1)$, αφού αυτή μπορεί σχετικά εύκολα να μετατραπεί σε κάθε άλλη κατανομή τυχαίων αριθμών, πραγματικών ή ακέραιων, σε οποιοδήποτε διάστημα.

Στους ψηφιακούς ηλεκτρονικούς υπολογιστές με τους οποίους εργαζόμαστε μπορούμε να έχουμε στη διάθεσή μας δυο ειδών «τυχαίους» αριθμούς, τους πραγματικά τυχαίους και τους ψευδοτυχαίους αριθμούς [16]. Οι πρώτοι προκύπτουν συνήθως από μετρήσεις προϊόντων ραδιενεργών διασπάσεων και ακολουθίες τους διατίθενται έτοιμες στο εμπόριο σε CD-ROM ή DVD-ROM. Υπάρχει επιπλέον η δυνατότητα προσθήκης μιας κάρτας επέκτασης στον ηλεκτρονικό υπολογιστή η οποία με τη βοήθεια μιας ασθενούς πηγής ραδιενέργειας παράγει ακολουθίες τυχαίων αριθμών οποιουδήποτε μεγέθους. Η χρήση πραγματικά τυχαίων αριθμών επιβάλλεται για ειδικού τύπου στρατιωτικές και πολιτικές εφαρμογές, όπως η κωδικοποίηση και η κρυπτογράφηση, δεν προσφέρει όμως πολλά πράγματα στις προσομοιώσεις ή στις άλλες επιστημονικές εφαρμογές.

Τις περισσότερες φορές οι «τυχαίοι» αριθμοί που εμφανίζονται σε προσομοιώσεις Monte Carlo είναι στην πραγματικότητα ψευδοτυχαίοι [16]. Αυτό σημαίνει πως δημιουργούνται από μια κατάλληλη διαδικασία-συνάρτηση (γεννήτρια τυχαίων αριθμών) με έναν ντετερμινιστικό αλγόριθμο. Ο τελευταίος επιλέγεται έτσι ώστε να προκύπτουσα κάθε φορά ακολουθία τυχαίων αριθμών να καλύπτει ομοιόμορφα το διάστημα $[0,1)$ και να μην είναι εμφανής η συσχέτιση μεταξύ των μελών της με μια απλή παρατήρηση. Αν και ορισμένες γεννήτριες βασίζονται σε εξεζητημένους αλγόριθμους και οι ακολουθίες που προκύπτουν

είναι εξαιρετικές προσεγγίσεις ακολουθιών πραγματικά τυχαίων αριθμών δεν παύουν να χρησιμοποιούν ντετερμινιστικές μεθόδους, με άλλα λόγια η παραγόμενη ακολουθία μπορεί να προβλεφτεί πλήρως αν κάποιος γνωρίζει τον χρησιμοποιούμενο αλγόριθμο και τις αρχικές συνθήκες (τον ακέραιο αριθμό-σπόρο που πρέπει να δοθεί στη γεννήτρια για να πάρει τυχαίους αριθμούς). Χαρακτηριστικά αναφέρουμε ότι κατά τον υπολογισμό σφαλμάτων και διακυμάνσεων των αποτελεσμάτων των προσομοιώσεών μας χρειάζεται να μεταβάλλουμε το «σπόρο», δηλαδή των πραγματικό αριθμό με τον οποίο τροφοδοτούμε κάθε φορά τη γεννήτρια των τυχαίων αριθμών, αλλιώς οι εξεταζόμενες ποσότητες παραμένουν κατά παραπλανητικό τρόπο αναλλοίωτες.

Γεννήτριες ψευδοτυχαίων αριθμών διατίθενται σαν εσωτερικές συναρτήσεις σε όλες σχεδόν τις γλώσσες προγραμματισμού. Άλλες πάλι, γραμμένες σε διάφορες γλώσσες προγραμματισμού, μπορούν να βρεθούν σε βιβλιοθήκες προγραμμάτων ή σε ειδικά βιβλία αριθμητικών μεθόδων φυσικής ([16], [99], [100]). Το πρόβλημα είναι ότι οι συσχετίσεις μεταξύ των μελών των παραγόμενων από αυτές ακολουθιών, αλληλεπιδρώντας με το χρησιμοποιούμενο αλγόριθμο ή ακόμα και με τον τρόπο σάρωσης των πλεγματοειδών θέσεων (σειριακό ή τυχαίο), μπορούν σε κάποιες περιπτώσεις να αλλοιώσουν τα αποτελέσματα των αριθμητικών υπολογισμών μας ([101], [102]). Τέτοιες αλλοιώσεις παρατηρήθηκαν ιδιαίτερα κατά τη χρήση της εσωτερικής συνάρτησης RAN(ISEED) η οποία διατίθεται στις διάφορες εκδόσεις της γλώσσας προγραμματισμού FORTRAN [16].

Για το λόγο αυτό στις προσομοιώσεις της παρούσας εργασίας αντικαταστάθηκε από πιο βελτιωμένες γεννήτριες ψευδοτυχαίων αριθμών, τις RAN01(ISEED), RAN02(ISEED), RAN03(ISEED), RAN2P(ISEED), RAN00(ISEED) ([16], [99], [100]). Αυτές έχουν περίοδο της τάξης των 10^8 κλήσεων ή και μεγαλύτερη (οι τρεις τελευταίες), αριθμός που κρίνεται αρκετός για τις ανάγκες των περισσότερων προσομοιώσεων Monte Carlo ([16], [99], [100]), ιδίως όταν συνδυάζεται με τυχαία σάρωση (random αλγόριθμους). Χρειάζεται όμως ο σπόρος ISEED με τον οποίο την τροφοδοτούμε να είναι ένας αρνητικός ακέραιος. Τονίζουμε ότι από τις παραπάνω η RAN2P(ISEED) διαθέτει και «διανυσματική» εκδοχή, πράγμα που την καθιστά κατάλληλη για την περίπτωση παράλληλου προγραμματισμού. Στο παράρτημα C παραθέτουμε τους κώδικες των προαναφερθέντων συναρτήσεων σε γλώσσα προγραμματισμού FORTRAN 90/95, χωρίς να επεκταθούμε σε λεπτομέρειες σχετικές με τον αλγόριθμο που καθεμιά από αυτές υλοποιεί. Σημειώνουμε όμως πως στα συγγράμματα από τα οποία προέρχονται ([99], [100]) μπορούν να βρεθούν αυτά και άλλα τέτοια υποπρογράμματα μαζί με τις επεξηγήσεις τους.

4.9 Η μέθοδος του μονού ιστογράμματος (single histogram method) για το εξωτερικό πεδίο και τη θερμοκρασία

Στα προηγούμενα αναφερθήκαμε στις βασικές αρχές των μεθόδων Monte Carlo και στην όσο το δυνατόν αποτελεσματικότερη εφαρμογή τους στο πρότυπο Baxter-Wu. Με τη βοήθεια τέτοιων προσομοιώσεων μπορούμε σε

διάφορες συνθήκες να υπολογίσουμε ένα πλήθος μεγεθών, παρατηρήσιμων και μη, είτε με άμεσο είτε με έμμεσο τρόπο. Τα αποτελέσματά τους αντιμετωπίζονται ως ένα βαθμό σαν πειραματικά δεδομένα [16], για τα οποία μπορεί να βρεθεί μέση τιμή και σφάλμα.

Στην παρούσα ενότητα θα γίνει σύντομη αναφορά σε μια υπολογιστική τεχνική που μας επιτρέπει ξεκινώντας από τα αποτελέσματα προσομοιώσεων για ορισμένες τιμές θερμοκρασίας και μαγνητικού πεδίου να βρούμε αποτελέσματα για άλλες, χωρίς να επαναλάβουμε την προσομοίωση, εξοικονομώντας έτσι πολύτιμο υπολογιστικό χρόνο. Αυτή λέγεται μέθοδος του μονού ιστογράμματος (single histogram method) γιατί χρησιμοποιεί την κατανομή πιθανότητας κάποιου μεγέθους (π.χ. ενέργειας μικροκαταστάσεων ή συνολικής μαγνητικής ροπής) σε ορισμένες συνθήκες, η οποία παίρνει τη μορφή ιστογράμματος όταν οι τιμές του αντίστοιχου μεγέθους είναι συνεχείς. Η τεχνική αυτή προτάθηκε από τους Valleau και Card το 1972 αλλά ο σημερινός τρόπος εφαρμογής της [16] οφείλεται στις εργασίες των Ferrenberg και Swendsen στα 1988. Βέβαια η παρουσίαση όλων των λεπτομερειών αυτής της μεθόδου για διάφορες περιπτώσεις ξεφεύγει από τους στόχους μας. Έτσι στη συνέχεια θα εξετάσουμε μια απλουστευμένη εκδοχή της για το εξωτερικό πεδίο H και τη θερμοκρασία T .

Αν είναι γνωστή με οποιονδήποτε τρόπο η κατανομή πιθανοτήτων μαγνήτισης $P_0(m)$ παρουσία εξωτερικού πεδίου H_0 είναι πολύ εύκολο να βρεθεί και η αντίστοιχη κατανομή $P(m)$ για $H \neq H_0$ πολλαπλασιάζοντας τη δοσμένη κατανομή με έναν παράγοντα $\exp[\beta M(H-H_0)]$ οφειλόμενο στον όρο της Χαμιλτονιανής (3.1) που συνδέεται με το εξωτερικό πεδίο H και κανονικοποιώντας τη νέα κατανομή στη μονάδα. Έτσι έχουμε

$$P(m) = \frac{P_0(m) \exp[\beta(H-H_0)Nm]}{\sum_m P_0(m) \exp[\beta(H-H_0)Nm]} \quad (4.44).$$

Βασιζόμενοι στον τύπο (4.44) μπορούμε, εφόσον γνωρίζουμε την $P_0(m)$, να υπολογίσουμε την k -τάξης ροπή της κατανομής $P(m)$ για κάθε τιμή του H , σύμφωνα με τον τύπο

$$\langle m^k \rangle = \frac{\sum_m m^k P_0(m) \exp[\beta(H-H_0)Nm]}{\sum_m P_0(m) \exp[\beta(H-H_0)Nm]} \quad (4.45).$$

Φυσικά η 1^η τάξης ροπή της κατανομής $P(m)$ δεν είναι άλλη από τη μακροσκοπική μαγνήτιση του εξεταζόμενου πρότυπου, ενώ από τις μαγνητικές ροπές ανώτερης τάξης προκύπτουν άλλα ενδιαφέροντα μεγέθη όπως η ισόθερμη μαγνητική επιδεικτικότητα (βλέπε σχέση (1.32) και οι ανηγμένοι σωρευτές Binder 4^{ης} τάξης (4th- order reduced cumulants) U_L και U_{L0} (βλέπε σχέσεις (3.58), (3.59) και (3.60)).

Ομοίως, αν είναι γνωστή με οποιονδήποτε τρόπο η κατανομή πιθανοτήτων ενέργειας $P_0(E)$ σε ορισμένη θερμοκρασία T_0 είναι πολύ εύκολο να βρεθεί και η αντίστοιχη κατανομή $P(E)$ για $T \neq T_0$ πολλαπλασιάζοντας τη δοσμένη κατανομή με έναν παράγοντα $\exp[-E(\beta - \beta_0)]$, όπου ο παράγοντας β δίνεται από τον τύπο (1.20), και κανονικοποιώντας τη νέα κατανομή στη μονάδα. Έτσι έχουμε

$$P(E) = \frac{P_0(E) \exp[-E(\beta - \beta_0)]}{\sum_E P_0(E) \exp[-E(\beta - \beta_0)]} \quad (4.46),$$

ενώ, εφόσον γνωρίζουμε την $P_0(E)$, να υπολογίσουμε την k -τάξης ροπή της κατανομής $P(E)$ για κάθε τιμή του T , σύμφωνα με τον τύπο

$$\langle E^k \rangle = \frac{\sum_E E^k P_0(E) \exp[-E(\beta - \beta_0)]}{\sum_E P_0(E) \exp[-E(\beta - \beta_0)]} \quad (4.47).$$

Φυσικά η 1^η τάξης ροπή της κατανομής $P(E)$ δεν είναι άλλη από την εσωτερική ενέργεια του δοσμένου προτύπου, ενώ από τις ανώτερης τάξης στατιστικές ροπές της προκύπτουν πάλι πολλά χρήσιμα μεγέθη όπως η θερμοχωρητικότητα και ο σωρευτής 4^{ης} τάξης (4th- order reduced cumulant) V_{L0} του Binder (βλέπε σχέσεις (3.112), (3.123)).

Εξετάζοντας επιπόλαια τους τύπους (4.42)- (4.45) θα μπορούσε κανείς να ειπεί ότι αρκεί μια ακριβής προσομοίωση Monte Carlo σε κατάλληλες συνθήκες και στη συνέχεια θα μπορούσε να υπολογιστεί με τη βοήθειά τους κάθε φυσικό μέγεθος για οποιοδήποτε ζεύγος τιμών θερμοκρασίας και εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Ωστόσο, όπως έχει αποδειχθεί [16], οι μαθηματικές αυτές εκφράσεις δίνουν ακριβή αποτελέσματα μόνο σε περιοχές θερμοκρασιών και εξωτερικών πεδίων που καθορίζονται από τις παρακάτω σχέσεις:

$$|\Delta T| = \frac{T_0}{\sqrt{C(T_0)}} \quad (4.48),$$

$$|\Delta H| = \frac{k_B T_0}{\sqrt{\chi_T(T_0)}} \quad (4.49).$$

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5: ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ ΜΕ ΤΟΝ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟ METROPOLIS

Στο κεφάλαιο αυτό χρησιμοποιούμε τις αριθμητικές μεθόδους που περιγράψαμε στο προηγούμενο και ιδίως τον αλγόριθμο Metropolis ([6], [11], [16], [79]) για να μελετήσουμε τη συμπεριφορά του προτύπου Baxter-Wu απουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου σε θερμοκρασίες διαφορετικές από την κρίσιμη ($T_c = 2,269$), ενώ εξετάζουμε σύντομα και τη συμπεριφορά του παραπάνω αλγορίθμου στο κρίσιμο σημείο. Μεγάλο μέρος του αφιερώνεται στη συμπεριφορά των σωρευτών U_L και U_{L0} , οι οποίοι παρέχουν επιπλέον τρόπους διάκρισης των αλλαγών φάσης αλλά και εύρεσης κρίσιμων εκθετών. Αυτό γιατί θέλουμε να επαληθεύσουμε με προσομοιώσεις τα θεωρητικά συμπεράσματα του κεφαλαίου 2 για σημεία μακριά από την κρίσιμη περιοχή αλλά και να εξετάσουμε τη συμπεριφορά αυτών των ποσοτήτων για αλλαγές φάσης ανώτερης τάξης

Για το σκοπό αυτόν εφαρμόζουμε τον αλγόριθμο Metropolis σε 90×93 πλέγμα και τη μέθοδο των υποπλεγμάτων (blocks) που πρότεινε ο Binder [31], συνδυασμός ο οποίος έχει αποδειχτεί ιδιαίτερα αποτελεσματικός για την εύρεση της κατανομής της μαγνήτισης $P_L(m)$ για υποπλέγματα διάφορων διαστάσεων ([22],[47]). Η παραπάνω επιλογή πλέγματος έγινε, όπως είδαμε, γιατί στις αναπαραστάσεις πεπερασμένων τριγωνικών πλεγμάτων, όπως αυτά που χρησιμοποιούμε στις προσομοιώσεις μας, το συνολικό σχήμα του $L \times L$ πλέγματος είναι ρομβικό, οπότε δεν έχει τις ίδιες συμμετρίες με το άπειρο τριγωνικό πλέγμα [16]. Πριν όμως προχωρήσουμε στην πραγματοποίηση προσομοιώσεων και στην επεξεργασία των αποτελεσμάτων τους χρειάζεται να υπολογίσουμε πόσα βήματα προσομοίωσης Monte Carlo (Monte Carlo steps) πρέπει να πραγματοποιηθούν πριν μπορέσουμε να πάρουμε αξιόπιστες μετρήσεις και πόσες τέτοιες χρειαζόμαστε στην κατάσταση ισορροπίας ώστε οι εκτιμητές που θα προκύψουν να δίνουν τη βέλτιστη δυνατή προσέγγιση των αντίστοιχων φυσικών ποσοτήτων. Το πρώτο πρόβλημα συνδέεται με τον υπολογισμό του χρόνου ισορροπίας (equilibration time) ενώ το δεύτερο κυρίως με το χρόνο συσχέτισης (correlation time).

5.1 Έλεγχος του προγράμματος και υπολογισμός του χρόνου ισορροπίας

Όπως έχουμε ήδη δει [10], ένα σύστημα βρίσκεται σε θερμοδυναμική ισορροπία με δεξαμενή σταθερής θερμοκρασίας όταν η μέση πιθανότητα να το βρούμε σε μια οποιαδήποτε μικροκατάσταση του μ είναι ίση με την κανονική πιθανότητα (1.19) αυτής της μικροκατάστασης. Ξεκινώντας το σύστημά μας από κάποια γνωστή αρχική κατάσταση για να πραγματοποιήσουμε προσομοίωση σε μια πεπερασμένη και μη μηδενική θερμοκρασία θα χρειαστεί να περιμένουμε μέχρι αυτό να φτάσει στην κατάσταση ισορροπίας του. Κάτι τέτοιο γίνεται εύκολα αντιληπτό αν θυμηθούμε ότι ένα φυσικό σύστημα σε ισορροπία, αν δε βρίσκεται σε κρίσιμη κατάσταση, περνά τη συντριπτική πλειοψηφία του χρόνου του σε ένα μικρό υποσύνολο μικροσκοπικών καταστάσεων στο οποίο η ενέργεια

και οι υπόλοιπες φυσικές ποσότητες βρίσκονται σε μια μικρή περιοχή τιμών. Έτσι, για να γίνει μια ικανοποιητική εκτίμηση της τιμής που παίρνει μια οποιαδήποτε φυσική ποσότητα στην κατάσταση ισορροπίας, χρειάζεται να περιμένουμε μέχρι η μικροσκοπική ενέργεια του εξεταζόμενου συστήματος να πάρει μια από τις τιμές του υποσυνόλου που αντιστοιχεί σε κατάσταση ισορροπίας. Στη συνέχεια υποθέτουμε ότι ο χρησιμοποιούμενος αλγόριθμος Monte Carlo παράγει σχεδόν αποκλειστικά μικροκαταστάσεις με ενέργειες στο παραπάνω υποσύνολο, πράγμα το οποίο είναι αληθές αν αυτός έχει σχεδιαστεί για την προσομοίωση συστημάτων σε θερμοδυναμική ισορροπία.

Είναι προφανές όμως ότι θα πάρει κάποια ώρα μέχρι η ενέργεια του συστήματος αυτού να βρεθεί μέσα στο υποσύνολο που αντιστοιχεί στην κατάσταση ισορροπίας. Για αλγόριθμους μάλιστα ενός spin-flip, όπως ο Metropolis, είναι δυνατή η επιλογή (με σειριακή ή τυχαία σάρωση) και αναστροφή μιας μόνο μαγνητικής ροπής κάθε φορά, συνεπώς απαιτείται αρκετός χρόνος μέχρι να επιλεγεί και να αναστραφεί εκείνη η ακολουθία μαγνητικών ροπών που θα μας οδηγήσει σε κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας. Ο χρόνος αυτός ονομάζεται χρόνος ισορροπίας (equilibration time) τ_{eq} και μετριέται σε βήματα προσομοίωσης Monte Carlo (Monte Carlo steps). Η μικρότερη δυνατή τιμή του αναμένεται να είναι της τάξης του αριθμού των μαγνητικών ροπών του συστήματος. Ωστόσο, συνήθως η πραγματική τιμή του χρόνου ισορροπίας είναι πολύ μεγαλύτερη της παραπάνω ελάχιστης τιμής.

Ο προσδιορισμός του χρόνου ισορροπίας [16] θα μπορούσε να γίνει οπτικοποιώντας και συγκρίνοντας μεταξύ τους στιγμιότυπα- μικροκαταστάσεις του προσομοιούμενου συστήματος. Ωστόσο, ο καλύτερος τρόπος είναι να σχεδιάσουμε τα διαγράμματα των φυσικών ποσοτήτων που μας ενδιαφέρουν, όπως η μέση ενέργεια και η μέση συνολική μαγνητική ροπή (ανά δομικό λίθο), σε συνάρτηση με το χρόνο από την έναρξη της προσομοίωσης. Παρατηρώντας αυτά τα διαγράμματα (π.χ. διάγραμμα 5.1) είναι εύκολο να διαπιστώσουμε τότε το εξεταζόμενο φυσικό σύστημα έχει φτάσει στην κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας, αφού τότε οι τιμές των παραπάνω φυσικών ποσοτήτων έχουν χρονικά σταθεροποιηθεί. Βέβαια η εύρεση του χρόνου ισορροπίας σε μια προσομοίωση με απλή οπτική εξέταση διαγραμμάτων φυσικών μεγεθών είναι αποτελεσματική μόνο αν γνωρίζουμε πως το σύστημα που εξετάζουμε φτάνει σε κατάσταση ισορροπίας με έναν ομαλό και εύκολα προβλέψιμο τρόπο.

Μια τέτοια συμπεριφορά όμως είναι η εξαίρεση και όχι ο κανόνας. Σε πολλές περιπτώσεις είναι δυνατό ένα φυσικό σύστημα να παγιδευτεί προσωρινά σε μια μετασταθή περιοχή του συνόλου των μικροκαταστάσεων του, δίνοντας σχεδόν σταθερές τιμές για όλες τις παρατηρήσιμες ποσότητες και κάνοντάς μας να θεωρήσουμε πως βρίσκεται σε κατάσταση ισορροπίας. Σύμφωνα με όσα συζητήσαμε στην §1.3 [3] μια μετασταθής κατάσταση, στην οποία το σύστημα μπορεί να παραμείνει για κάποιο χρονικό διάστημα, αντιστοιχεί σε τοπικό ελάχιστο μιας κατάλληλης θερμοδυναμικής συνάρτησης, ενώ η κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας, στην οποία το σύστημα θα μείνει θεωρητικά έπ'

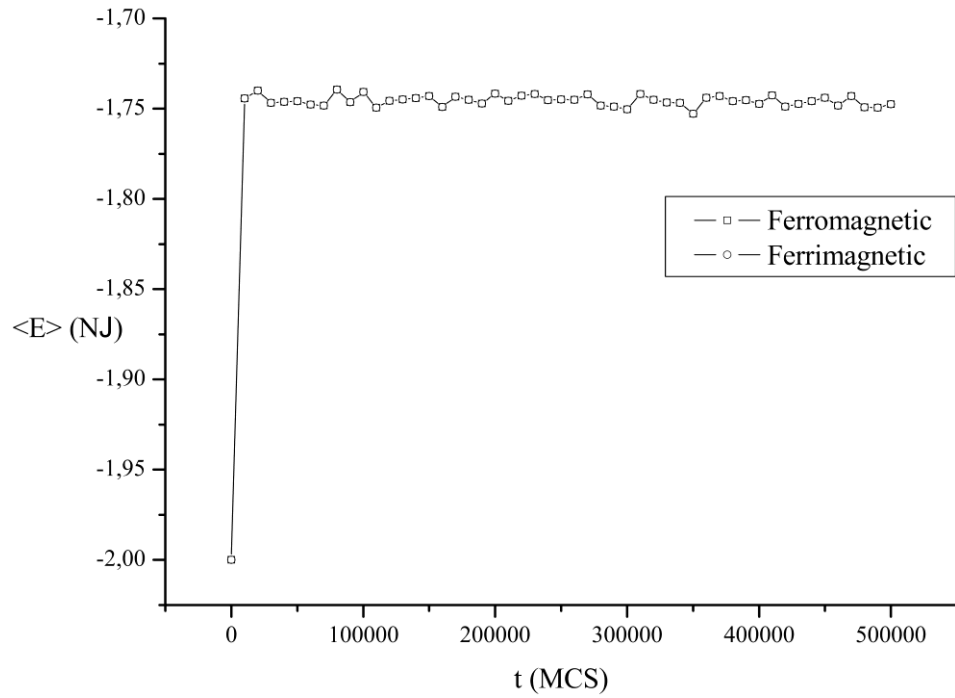
άπειρον, αντιστοιχεί στο ολικό ελάχιστο (ή στα ολικά ελάχιστα, αν έχουμε κρίσιμη αλλαγή φάσης) της θερμοδυναμικής αυτής συνάρτησης.

Για να αποφύγουμε το προαναφερθέν πρόβλημα υιοθετούμε μια ελαφρά διαφορετική στρατηγική για τον προσδιορισμό του χρόνου ισορροπίας, πραγματοποιώντας δύο προσομοιώσεις του ίδιου συστήματος, ξεκινώντας όμως κάθε φορά από διαφορετικές αρχικές καταστάσεις [16]. Στη συνέχεια παριστάνουμε γραφικά τη χρονική εξέλιξη της μέσης ενέργειας και της παραμέτρου τάξης του μοντέλου στις δυο περιπτώσεις και όταν δούμε ότι όλες οι αντίστοιχες ποσότητες έχουν κατά προσέγγιση πάρει την ίδια σταθερή τιμή καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι και τα δυο συστήματα έχουν φτάσει στην κατάσταση ισορροπίας. Με την τεχνική αυτή ξεπερνιούνται τα προβλήματα της προηγούμενης, αφού αν σε μια περίπτωση το εξεταζόμενο φυσικό σύστημα βρεθεί σε μια μετασταθή κατάσταση ενώ στην άλλη φτάσει σε κατάσταση ισορροπίας ή παγιδευτεί σε άλλες μετασταθείς καταστάσεις, αυτό γίνεται αμέσως φανερό επειδή οι παρατηρούμενες φυσικές ποσότητες εμφανίζονται με διαφορετικές τιμές στα αντίστοιχα διαγράμματα. Αν μάλιστα πιστεύουμε ότι είναι δυνατόν δυο διαφορετικές αρχικές καταστάσεις να οδηγήσουν στην παγίδευση του συστήματος στην ίδια μετασταθή κατάσταση μπορούμε να γενικεύσουμε την παραπάνω διαδικασία για τρεις ή περισσότερες.

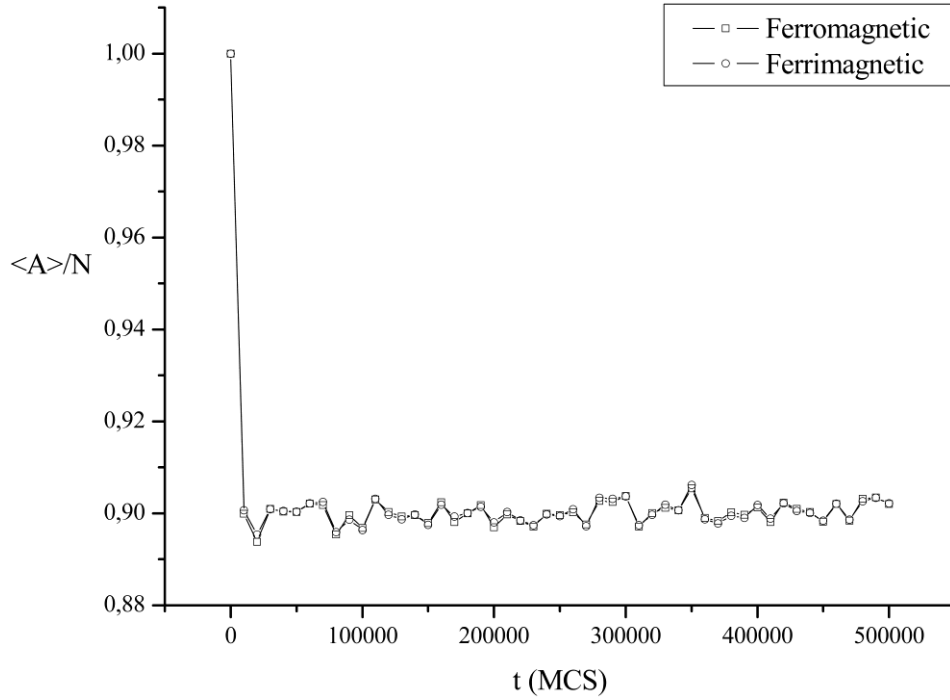
Με τη βοήθεια της προηγούμενης μεθόδου πετυχαίνουμε να εκτιμήσουμε το χρόνο ισορροπίας στην περίπτωση του προτύπου Baxter-Wu για διάφορες θερμοκρασίες. Δυο διαφορετικές αρχικές καταστάσεις, η θεμελιώδης σιδηρομαγνητική κατάσταση και μια εκ των τριών ισοδύναμων θεμελιωδών σιδηριμαγνητικών καταστάσεων ($T = 0$), με κατάλληλη βέβαια κάθε φορά τροποποίηση της παραμέτρου τάξης, κρίνονται αρκετές για τον ασφαλή

προσδιορισμό του. Προκύπτουν διαγράμματα $\frac{\langle E \rangle}{N} = f(t)$ και $\frac{\langle A \rangle}{N} = f(t)$ (A :

η παράμετρος τάξης του προτύπου, όπως ορίστηκε στις §1.3, §1.4 και §3.1, $N = L \times L$) όπως τα 5.1 και 5.2. Με τη βοήθεια αυτών συμπεραίνουμε ότι ο ζητούμενος χρόνος ισορροπίας (equilibration time) τ_{eq} είναι της τάξης των 10^7 Monte Carlo sweeps (1 Monte Carlo sweep = $L \times L$ Monte Carlo steps).



Διάγραμμα 5.1: Γραφική παράσταση $\langle E \rangle = f(t)$ (ο χρόνος μετρημένος σε Monte Carlo sweeps), για $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ και $H = 0$, σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης στο μοντέλο Baxter-Wu, ξεκινώντας τη μια φορά από τη σιδηρομαγνητική θεμελιώδη κατάσταση και την άλλη από μια από τις σιδηριμαγνητικές θεμελιώδεις καταστάσεις.



Διάγραμμα 5.2: Γραφική παράσταση $\frac{\langle A \rangle}{N} = f(t)$ (ο χρόνος μετρημένος σε Monte Carlo

sweeps), για $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ και $H = 0$, σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από

την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης στο μοντέλο Baxter-Wu, ξεκινώντας τη μια φορά από τη σιδηρομαγνητική θεμελιώδη κατάσταση και την άλλη από μια από τις σιδηριμαγνητικές θεμελιώδεις καταστάσεις.

Ένα άλλο πρόβλημα είναι για πόσο χρόνο χρειάζεται να κρατάμε τα αποτελέσματα των προσομοιώσεών μας ώστε οι εκτιμητές που θα προκύψουν να δίνουν τη βέλτιστη δυνατή προσέγγιση των φυσικών ποσοτήτων που μας ενδιαφέρουν. Στο σημείο αυτό καθίσταται αναγκαίος ο προσδιορισμός του χρόνου συσχέτισης (correlation time) τ_{cor} της προσομοίωσης. Αυτός μετριέται επίσης σε βήματα προσομοίωσης Monte Carlo (Monte Carlo steps) και εκφράζει πόσο γρήγορα το προσομοιούμενο σύστημα μεταβαίνει από μια μικροκατάσταση ισορροπίας σε μια άλλη σημαντικά διαφορετική, λ.χ. σε μια μικροκατάσταση στην οποία ο αριθμός των μαγνητικών ροπών που η τιμή τους δεν αλλάζει να μην είναι διαφορετικός από τον αναμενόμενο σε μια εντελώς τυχαία μεταβολή. Ο πλήρης μαθηματικός ορισμός του μεγέθους αυτού [16] γίνεται με τη βοήθεια των χρονικά μετατοπισμένων συναρτήσεων αυτοσυσχέτισης (time-displaced autocorrelation functions) και θα μας απασχολήσει περαιτέρω στο επόμενο κεφάλαιο, επειδή ο κατά το δυνατόν ακριβής υπολογισμός του χρόνου συσχέτισης στις προσομοιώσεις συστημάτων σε κρίσιμη κατάσταση αποτελεί βασικό κριτήριο για την αξιολόγηση των χρησιμοποιούμενων αλγορίθμων.

Η εκτίμησή του επιτυγχάνεται με διάφορους τρόπους [16]. Σε πρώτη προσέγγιση θα μπορούσαμε να δεχτούμε ότι είναι περίπου ίσος με το χρόνο ισορροπίας τ_{eq} . Αυτό το κριτήριο θεωρείται ασφαλές όταν ο χρόνος ισορροπίας είναι σημαντικά μεγαλύτερος του χρόνου συσχέτισης, δηλαδή μακριά από τα κρίσιμα σημεία. Τούτο συμβαίνει επειδή τότε δυο μικροκαταστάσεις κοντά στη θερμοδυναμική ισορροπία είναι ποιοτικά περισσότερο όμοιες συγκριτικά με δυο άλλες που η μια βρίσκεται μακριά από τη θερμοδυναμική ισορροπία ενώ η άλλη κοντά σε αυτήν. Υπάρχουν βέβαια και άλλοι, περισσότερο αυστηροί τρόποι, για τον υπολογισμό του χρόνου συσχέτισης τ_{cor} . Τέτοιοι είναι μέσω της χρονικά μετατοπισμένης συνάρτησης αυτοσυσχέτισης (time-displaced autocorrelation function) και των πινάκων Markov (Markov matrices). Στοιχεία αυτών θα δούμε στο επόμενο κεφάλαιο, όπου θα υπολογίσουμε το χρόνο συσχέτισης αλγορίθμων στην κρίσιμη περιοχή.

Στην περίπτωση μας, επειδή ενδιαφερόμαστε για μετρήσεις κοντά στο κρίσιμο σημείο, είναι αναγκαίο να ληφθούν υπόψη όχι μόνο ο χρόνος συσχέτισης τ_{cor} αλλά επίσης οι κρίσιμες διακυμάνσεις (βλέπε §1.4) και η σημαντική αύξηση του χρόνου συσχέτισης τ_{cor} ορισμένων αλγορίθμων στην κρίσιμη περιοχή. Το τελευταίο φαινόμενο, γνωστό και ως κρίσιμη επιβράδυνση (critical slowing down) [16], είναι ιδιαίτερα έντονο σε αλγόριθμους ενός spin-flip όπως ο Metropolis ή ο Heat-Bath, συνδυαζόμενο δε με τις κρίσιμες διακυμάνσεις οδηγεί σε μεγάλα στατιστικά σφάλματα. Ο περιορισμός αυτών απαιτεί σημαντική αύξηση του χρόνου δειγματοληψίας στην κατάσταση ισορροπίας. Εμείς πάντως παρακάμφαμε σε αυτό το κεφάλαιο το λεπτομερή υπολογισμό του τ_{cor} και αφήσαμε τις προσομοιώσεις μας με τον αλγόριθμο Metropolis να τρέξουν για χρόνο $\Delta t_1 = 10^8$ Monte Carlo sweeps αν $T < T_c$ και $\Delta t_2 = 10^9$ Monte Carlo sweeps αν $T = T_c$ (στην περίπτωση μας ως γνωστόν $T_c = 2,269$), χρονικά διαστήματα τα οποία έχουν κριθεί επαρκώς μεγάλα σε παρόμοιους υπολογισμούς ([45], [47]).

Τέλος ο έλεγχος και η πλήρης εισφαλμάτωση του προγράμματος προσομοίωσης επιτυγχάνονται συγκρίνοντας κάποια αποτελέσματα που προκύπτουν από αυτό με αντίστοιχα από αναλυτικές λύσεις, οι οποίες είναι ως γνωστόν διαθέσιμες για το κρίσιμο σημείο στην περίπτωση του μοντέλου Baxter-Wu. Στο σημείο αυτό δεν επιμένουμε ιδιαίτερα επειδή ένα σημαντικό μέρος του προγράμματος που φτιάξαμε περιέχει τμήματα κώδικα ξαναχρησιμοποιημένα σε παρόμοιους υπολογισμούς για το συγκεκριμένο πρότυπο ([45], [47]).

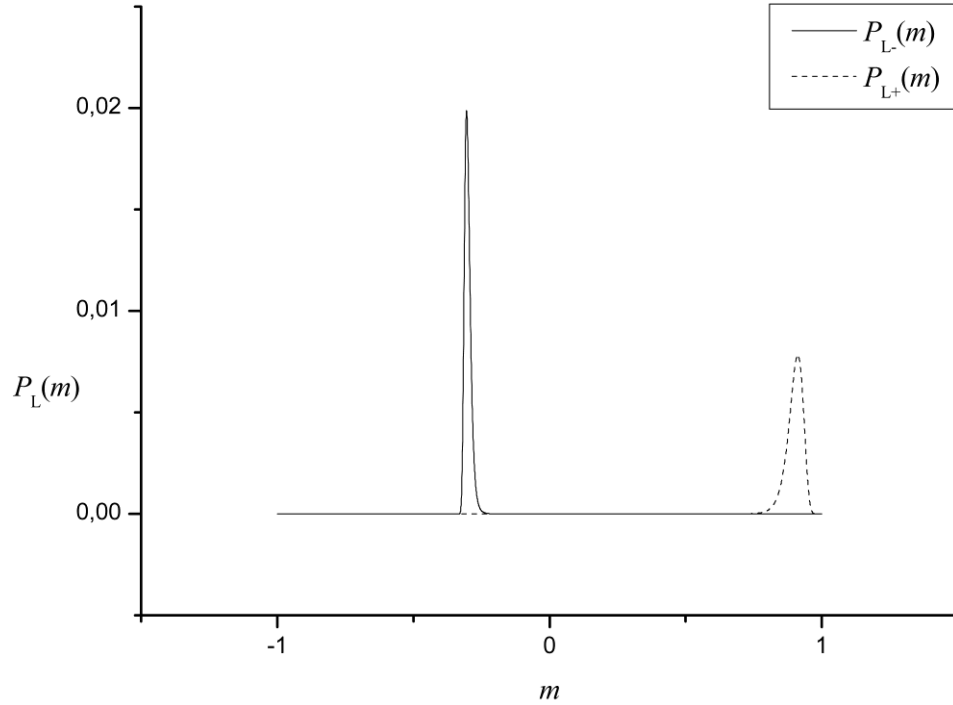
5.2 Αποτελέσματα προσομοιώσεων μακριά από την κρίσιμη θερμοκρασία

Αρχικά βρίσκουμε την κατανομή της συνολικής μαγνητικής ροπής ανά δομικό λίθο $P_{L0}(m)$ σε θερμοκρασία $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ και $H = 0$ χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο Metropolis και θεωρώντας το χρόνο ισορροπίας (equilibration time) τ_{eq} ίσο με 10^7 Monte Carlo sweeps ενώ το

πρόγραμμα αφήνεται να συλλέξει δεδομένα για χρόνο $\Delta t_1 = 10^8$ Monte Carlo sweeps. Η διαδικασία επαναλαμβάνεται για δυο διαφορετικές θεμελιώδεις αρχικές καταστάσεις, τη σιδηρομαγνητική και μια από τις τρεις ισοδύναμες σιδηριμαγνητικές, δίνοντας κατανομές $P_{L0+}(m)$ και $P_{L0-}(m)$ αντίστοιχα, όπως αυτές που παριστάνονται στο διάγραμμα 5.3. Από το διάγραμμα αυτό εύκολα συνάγεται ότι ισχύει

$$P_{L0-\max}(m) \approx 3P_{L0+\max}(m) \quad (5.1),$$

σχέση που συνδέεται με τις συμμετρίες του συστήματος (μία θεμελιώδης σιδηρομαγνητική μικροκατάσταση και τρεις ισοδύναμες θεμελιώδεις σιδηριμαγνητικές μικροκαταστάσεις).

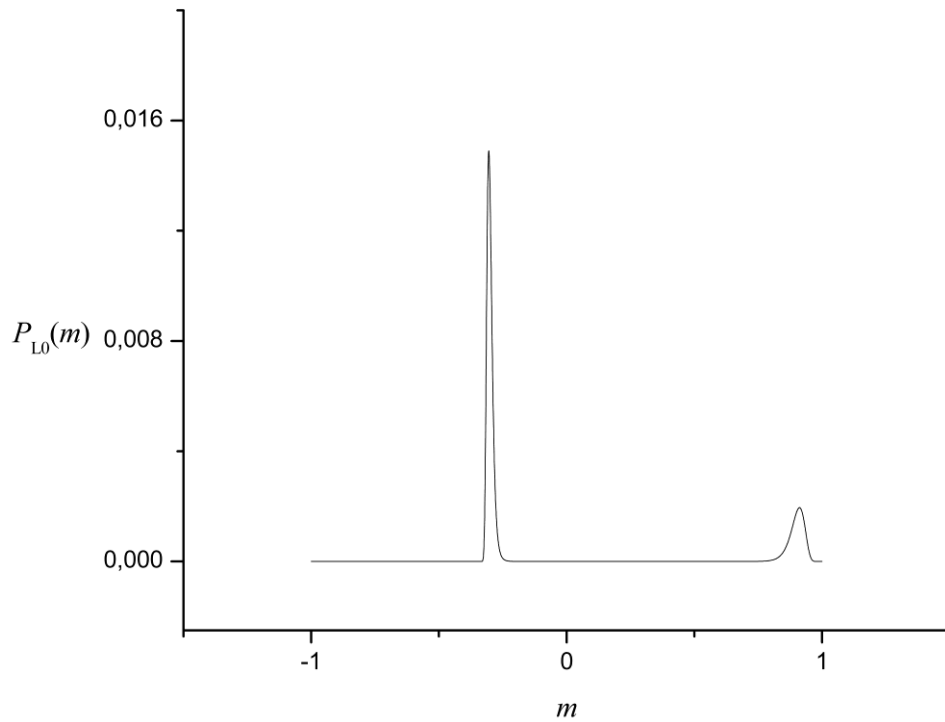


Διάγραμμα 5.3: Γραφική παράσταση $P_{L0\pm} = f(m)$ στο μοντέλο Baxter-Wu, για $\frac{k_B T}{J} = 2,222$, $H = 0$ και $L = 60$, σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης, ξεκινώντας τη μια φορά από τη σιδηρομαγνητική θεμελιώδη κατάσταση ($P_{L0+}(m)$) και την άλλη από μια από τις σιδηριμαγνητικές θεμελιώδεις καταστάσεις ($P_{L0-}(m)$).

Η συνολική πιθανότητα $P_L(m)$ προκύπτει από τον κατάλληλο συνδυασμό τους [47], λαμβάνοντας υπόψη φυσικά και τις συμμετρίες του μοντέλου (μία θεμελιώδης σιδηρομαγνητική μικροκατάσταση και τρεις ισοδύναμες θεμελιώδεις σιδηριμαγνητικές μικροκαταστάσεις), οπότε έχουμε:

$$P_{L0}(m) = \frac{P_{L0+}(m) + 3P_{L0-}(m)}{4} \quad (5.2).$$

Η συνολική κατανομή $P_{L0}(m)$ για $L = 60$ απεικονίζεται στο διάγραμμα 5.4. Παρατηρούμε ότι η κατανομή αυτή, αντίθετα από ότι στο μοντέλο Ising, παρουσιάζει δυο ασύμμετρους λοβούς γύρω από τις θέσεις $m = +1$ και $m = -\frac{1}{3}$, οι οποίες αντιστοιχούν στις συνολικές μαγνητικές ροπές ανά δομικό λίθο των τεσσάρων θεμελιωδών μικροκαταστάσεων για τις οποίες μιλήσαμε παραπάνω.

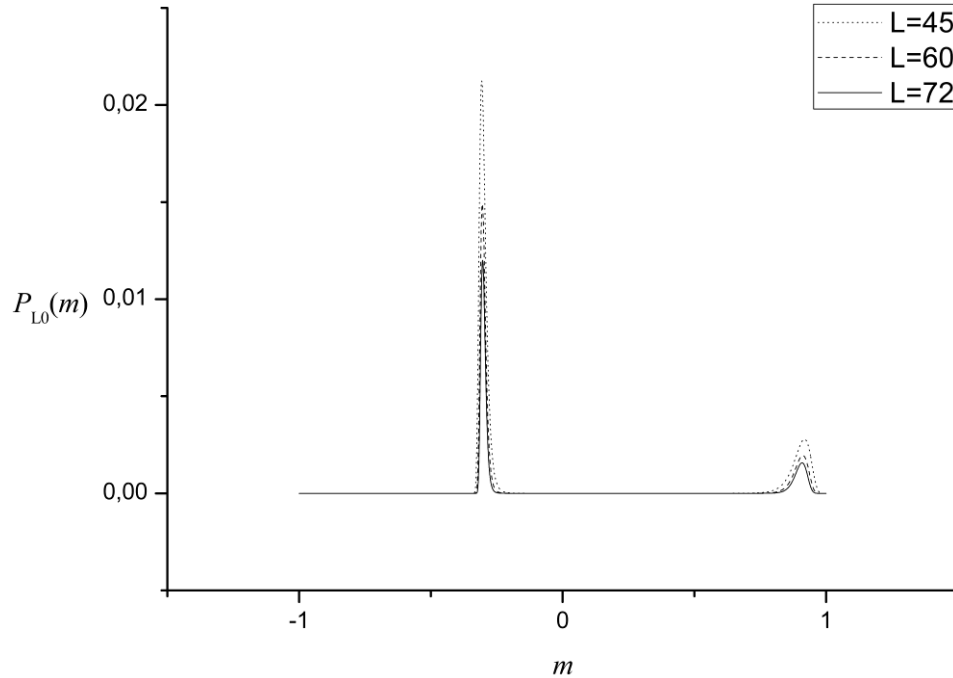


Διάγραμμα 5.4: Γραφική παράσταση $P_{L0} = f(m)$ στο μοντέλο Baxter-Wu, για $\frac{k_B T}{J} = 2,222$,

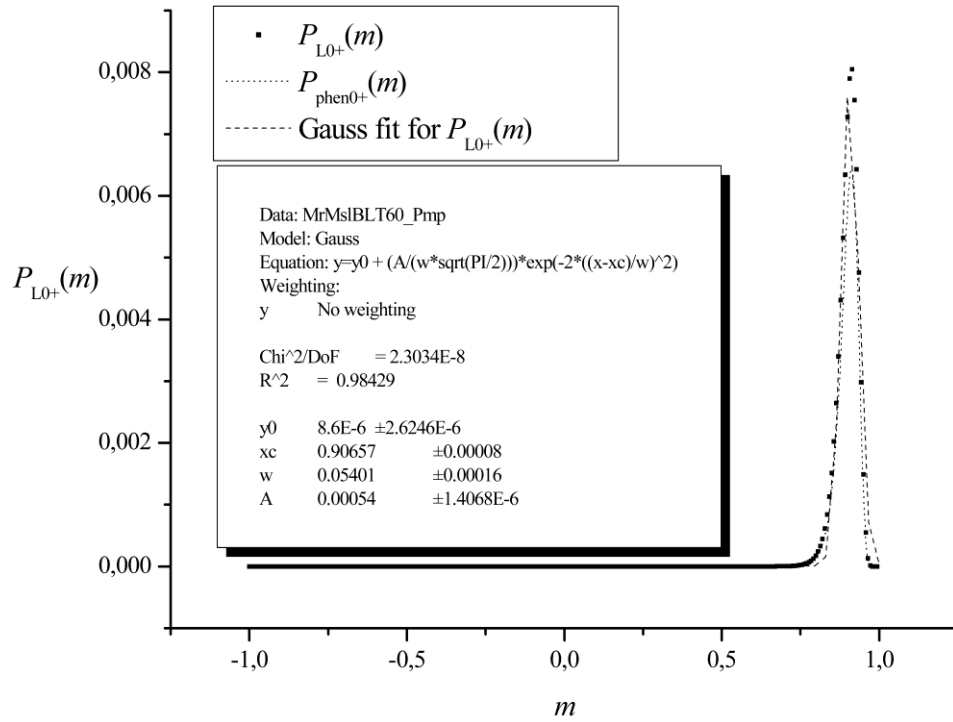
$H = 0$ και $L = 60$, όπως προκύπτει με κατάλληλο συνδυασμό των αποτελεσμάτων του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης. Τα στατιστικά σφάλματα παραλείπονται για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.

Κατόπιν, με βάση τα αποτελέσματα του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης, σχεδιάζουμε στο ίδιο διάγραμμα τις παραπάνω κατανομές για $L = 30$, $L = 45$ και $L = 72$. Η απεικόνιση που προκύπτει (βλέπε διάγραμμα 5.5) δηλώνει πως η κατανομή της συνολικής μαγνητικής ροπής ανά δομικό λίθο υπακούει σε μια σχέση κλιμάκωσης. Για να ελέγξουμε το βαθμό ταύτισής της με τα αποτελέσματα της φαινομενολογικής θεωρίας του Kurt Binder ([22], [23]), όπως αναφέρθηκαν στην §3.2 και προσαρμόστηκαν στο πρότυπο Baxter-Wu στην §3.3, παριστάνουμε γραφικά τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων για σιδηρομαγνητικές και σιδηριμαγνητικές αρχικές καταστάσεις μαζί με τα

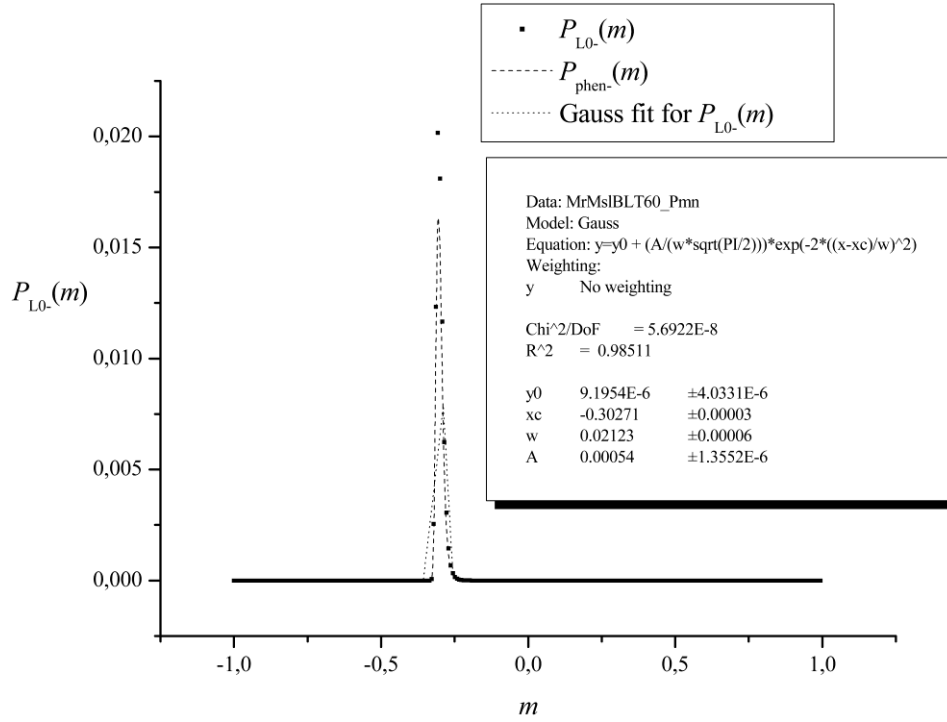
αντίστοιχα φαινομενολογικά στην περίπτωση που $L = 60$ (διαγράμματα 5.6 και 5.7). Η εύρεση των τελευταίων προϋποθέτει γνώση των τιμών των αυθόρμητων μαγνητίσεων (m_L^+, m_L^-) ανά πλεγματικό σημείο και των αντίστοιχων ισόθερμων μαγνητικών επιδεικτικιοτήτων $(\chi_{T,L}^+, \chi_{T,L}^-)$ ανά πλεγματικό σημείο, οι οποίες εύκολα προκύπτουν από τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων, χρησιμοποιώντας τους τύπους (1.34), (3.38), (4.45) σε συνδυασμό και με τις κατανομές $P_{L0+}(m)$, $P_{L0-}(m)$. Έπειτα, με τη βοήθεια του προγράμματος Origin, ελέγχουμε την προσαρμογή (fitting) γραφικών παραστάσεων της κανονικής κατανομής (κατανομής Gauss) στα σημεία των παραπάνω διαγραμμάτων τα οποία προέκυψαν από προσομοιώσεις. Έτσι μπορούμε με ασφάλεια να συμπεράνουμε ότι οι κατανομές πιθανότητας $P_{L0}(m)$ για $T < T_c$ θα έχουν τη μορφή (3.8) που πρότεινε ο Kurt Binder [22].



Διάγραμμα 5.5: Γραφικές παραστάσεις $P_{L0} = f(m)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $L = 45$, $L = 60$, $L = 72$, $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ και $H = 0$, όπως προκύπτουν με κατάλληλο συνδυασμό των αποτελεσμάτων του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης. Τα στατιστικά σφάλματα παραλείπονται για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.

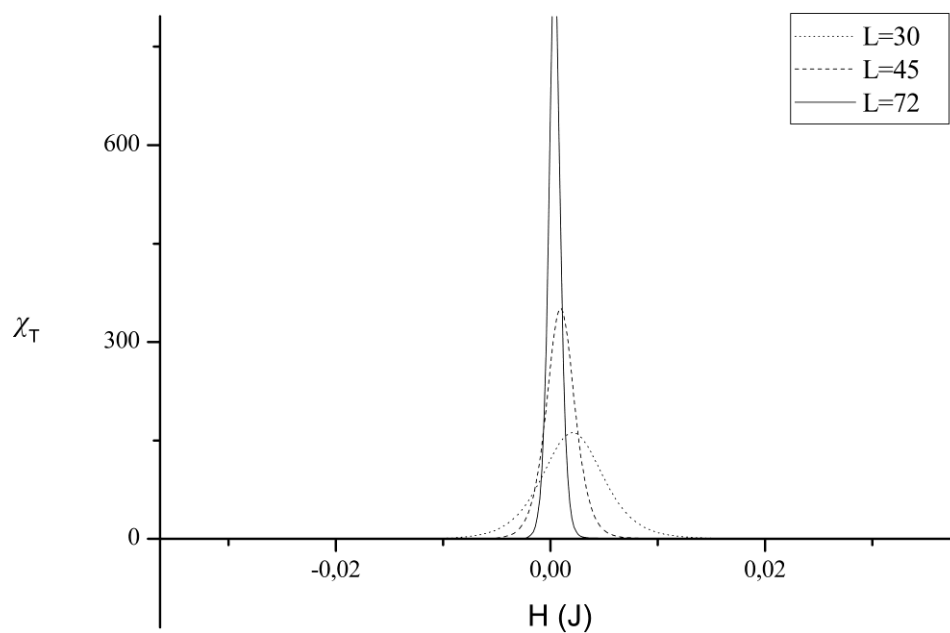


Διάγραμμα 5.6: Γραφική παράσταση $P_{L0+} = f(m)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $L = 60$, $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ και $H = 0$, όπως προκύπτει από τα αποτελέσματα του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης και από τη φαινομενολογική θεωρία του Kurt Binder. Τα στατιστικά σφάλματα παραλείπονται για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.

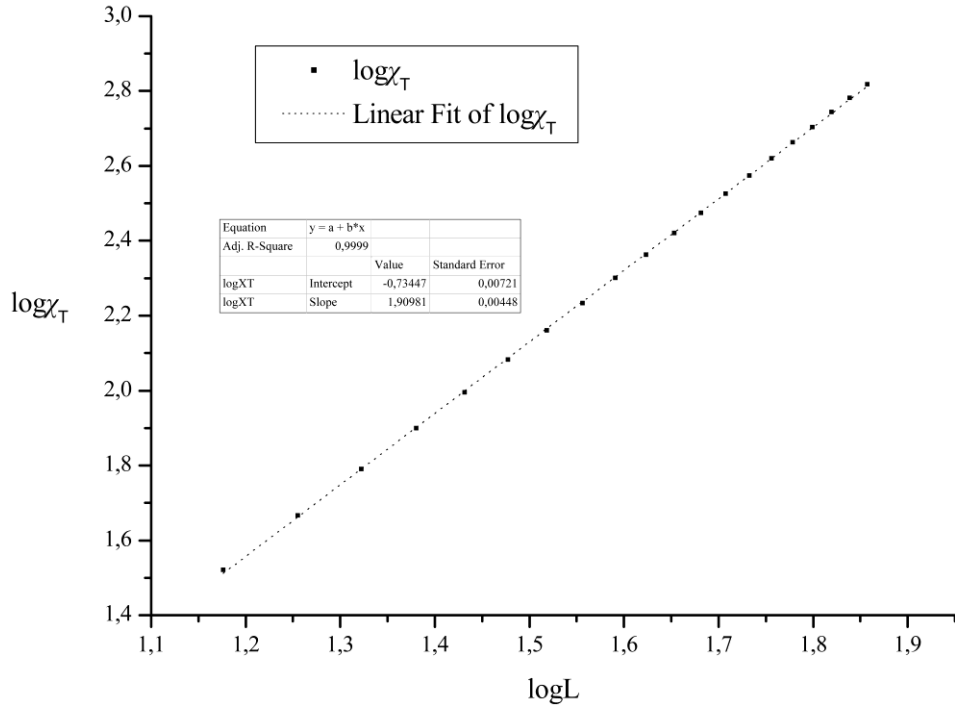


Διάγραμμα 5.7: Γραφική παράσταση $P_{L0-} = f(m)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $L = 60$, $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ και $H = 0$, όπως προκύπτει με κατάλληλο συνδυασμό των αποτελεσμάτων του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης και τη φαινομενολογική θεωρία του Kurt Binder. Τα στατιστικά σφάλματα παραλείπονται για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.

Στη συνέχεια, χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (1.34), (4.44), (4.45) και την κατανομή $P_{L0}(m)$ υπολογίζουμε και κατόπιν παριστάνουμε γραφικά την ισόθερμη μαγνητική επιδεικτικότητα $\chi_{T,L}$ σε συνάρτηση με το εξωτερικό πεδίο H (διάγραμμα 5.8) για $L = 30$, $L = 45$ και $L = 72$. Παρατηρούμε ότι το διάγραμμα $\chi_{T,L} = f(H)$ παρουσιάζει μέγιστο, ενδεικτικό αλλαγής φάσης [18], και τόσο η θέση του μεγίστου όσο και το ύψος του μεταβάλλονται με την αύξηση του μεγέθους του εξεταζόμενου πλέγματος. Για να ελέγξουμε το είδος της πραγματοποιούμενης αλλαγής φάσης παριστάνουμε γραφικά τις τιμές της ισόθερμης μαγνητικής επιδεικτικότητας για μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος χρησιμοποιώντας λογαριθμικό διάγραμμα (διάγραμμα 5.9). Η κλίση της ευθείας που προκύπτει ισούται κατά προσέγγιση, λαμβάνοντας υπόψη και την επίδραση των συνοριακών συνθηκών, με τη διάσταση $d = 2$ του πλέγματος, ενδεικτικό αλλαγής φάσης 1^{ou} είδους σύμφωνα με τη Θεωρία Κλιμάκωσης Πεπερασμένου Μεγέθους (Finite-Size Scaling) [17].



Διάγραμμα 5.8: Γραφικές παραστάσεις $\chi_{T,L} = f(H)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $L = 30$, $L = 45$, $L = 72$, $\frac{k_B T}{J} = 2,222$, σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης. Τα στατιστικά σφάλματα παραλείπονται για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.



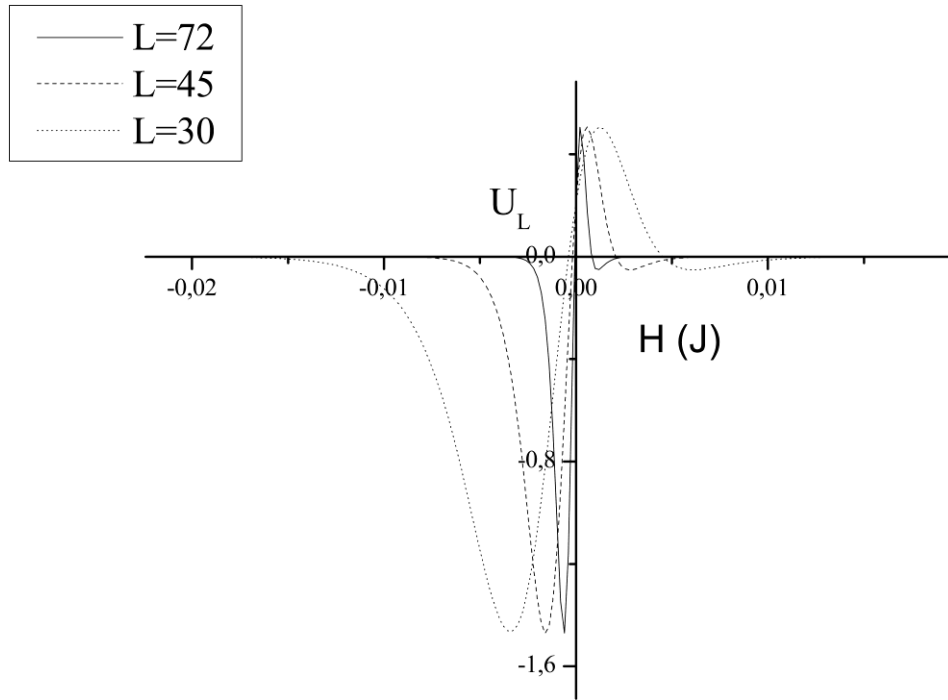
Διάγραμμα 5.9: Διάγραμμα $\log \chi_T = f(\log L)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ και

$H = 0$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης.

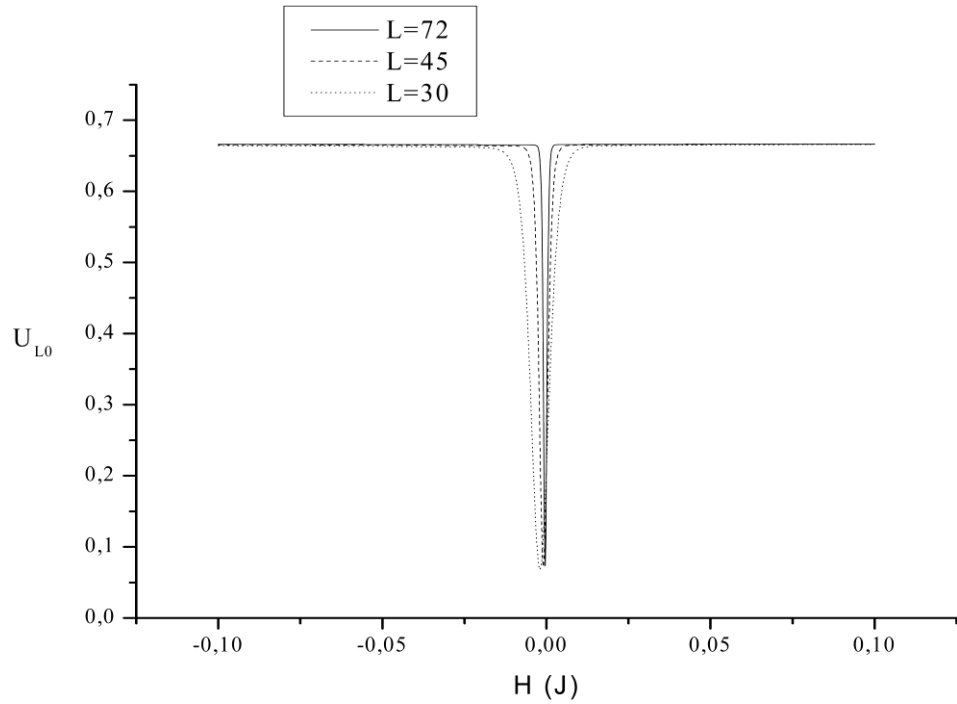
Στη συνέχεια, χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (3.34), (3.35), (3.36), (3.38), (4.45) και την κατανομή $P_{L0}(m)$ βρίσκουμε και παριστάνουμε γραφικά τους σωρευτές Binder U_L (διάγραμμα 5.10) και U_{L0} (διάγραμμα 5.11) σε συνάρτηση με το εξωτερικό πεδίο H για $L = 30$, $L = 45$ και $L = 72$. Στο διάγραμμα 5.10 μπορούμε να δούμε ότι ο σωρευτής U_L τείνει στο μηδέν καθώς η απόλυτη τιμή του εξωτερικού πεδίου H μεγαλώνει. Ακόμα η συνάρτηση $U_L = f(H)$, σε αντίθεση με αυτήν του προτύπου Ising, παρουσιάζει δυο τοπικά ελάχιστα, το ένα για θετικά H ενώ το άλλο, το οποίο είναι και το ολικό ελάχιστό της, για αρνητικά H . Το ολικό της μέγιστο εδώ δεν παρουσιάζεται για $H = 0$ αλλά για $H > 0$. Τούτα προβλέπονται από τη φαινομενολογική θεωρία του Binder, όπως άλλωστε φαίνεται και στο συγκριτικό διάγραμμα 5.12. Ας σημειωθεί μάλιστα ότι τα προαναφερθέντα τοπικά ακρότατα αναμένεται να εξαφανιστούν στο θερμοδυναμικό όριο [23].

Όμοια από το διάγραμμα 5.13 μπορούμε να πούμε ότι ο σωρευτής U_{L0} τείνει στην τιμή $\frac{2}{3} \approx 0,666$ καθώς η απόλυτη τιμή του εξωτερικού πεδίου H μεγαλώνει. Ακόμα η συνάρτηση $U_{L0} = f(H)$ δεν παρουσιάζει τοπικά μέγιστα αλλά μόνο ένα ολικό ελάχιστο για πεπερασμένο πλέγμα. Αντίθετα από ότι στο πρότυπο Ising [23], το ολικό της ελάχιστο στα πεπερασμένα πλέγματα δεν

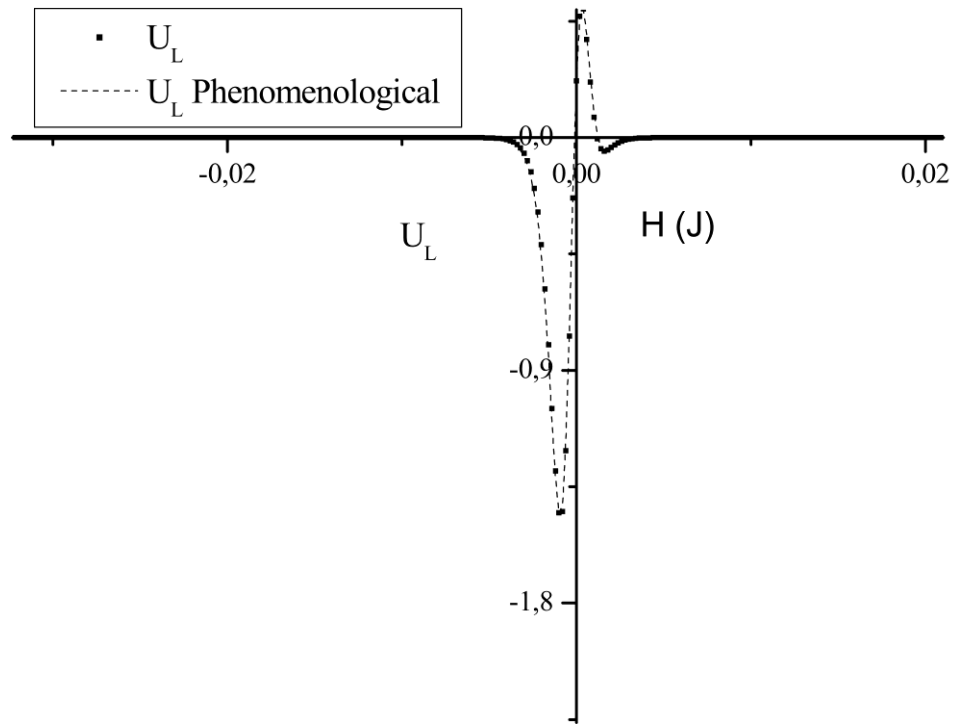
παρουσιάζεται εδώ για $H = 0$ αλλά για $H < 0$, όπως θα φανεί λεπτομερέστερα στη συνέχεια. Τούτα προβλέπονται από τη φαινομενολογική θεωρία του Binder, όπως άλλωστε φαίνεται και στο συγκριτικό διάγραμμα 5.11. Ας σημειωθεί ότι η κατασκευή διαγραμμάτων όπως τα 5.10, 5.11 απαιτεί γνώση των τιμών των αυθόρμητων μαγνητίσεων (m_L^+, m_L^-) ανά πλεγματικό σημείο και των αντίστοιχων ισόθερμων μαγνητικών επιδεκτικότητας $(\chi_{T,L}^+, \chi_{T,L}^-)$ ανά πλεγματικό σημείο.



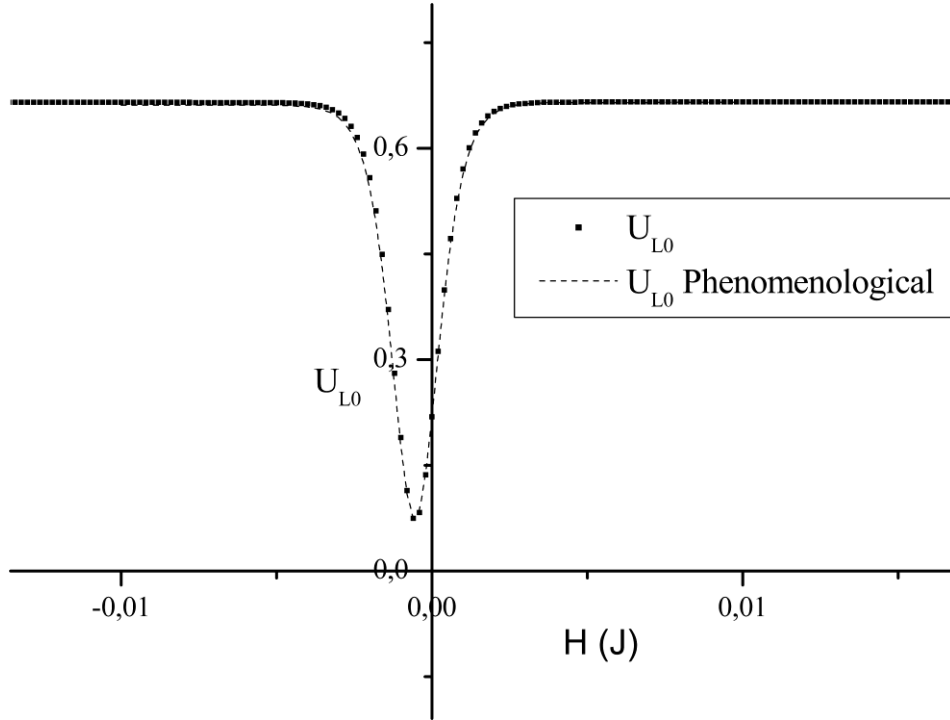
Διάγραμμα 5.10: Γραφικές παραστάσεις $U_L = f(H)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $L = 30$, $L = 45$, $L = 72$, $\frac{k_B T}{J} = 2,222$, σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης. Τα στατιστικά σφάλματα παραλείπονται για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.



Διάγραμμα 5.11:: Γραφικές παραστάσεις $U_{L0} = f(H)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $L = 30$, $L = 45$, $L = 72$, $\frac{k_B T}{J} = 2,222$, σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης. Τα στατιστικά σφάλματα παραλείπονται για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.



Διάγραμμα 5.12: Γραφική παράσταση $U_L = f(H)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $L = 60$, $\frac{k_B T}{J} = 2,222$, σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης και τη φαινομενολογική θεωρία του Kurt Binder. Τα στατιστικά σφάλματα παραλείπονται για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.



Διάγραμμα 5.13: Γραφική παράσταση $U_{L0} = f(H)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $L = 60$, $\frac{k_B T}{J} = 2,222$, σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προέκυψαν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης και τη φαινομενολογική θεωρία του Kurt Binder. Τα στατιστικά σφάλματα παραλείπονται για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.

Με σκοπό να έχουμε μια καλύτερη εικόνα της συμπεριφοράς των σωρευτών U_L και U_{L0} στο πρότυπο Baxter-Wu για $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ και $H = 0$, όπου η φαινομενολογική θεωρία που αναπτύξαμε προβλέπει σταθερό σημείο, παριστάνουμε γραφικά τις τιμές των αντίστοιχων συναρτήσεων $U_L|_{H=0} = f(L)$ και $U_{L0}|_{H=0} = f(L)$ (οι οποίες ταυτίζονται πλήρως όταν $T \neq T_c$) για $L = 15, 18, 21, 24, \dots, 57, 60$, κάνοντας έπειτα προειβολή (extrapolation) των αποτελεσμάτων στο $L \rightarrow +\infty$. Για το σκοπό αυτόν ελέγχουμε διαδοχικά, χρησιμοποιώντας το πρόγραμμα Origin, την προσαρμογή (fitting) των γραφικών παραστάσεων των συναρτήσεων (τη δεύτερη την ονομάσαμε συμβατικά finite-size scaling)

$$f_1(L) = AL^{-1} + BL^{-2} + C \quad (5.3),$$

$$f_2(L) = BL^{-w} + C \quad (5.4),$$

με

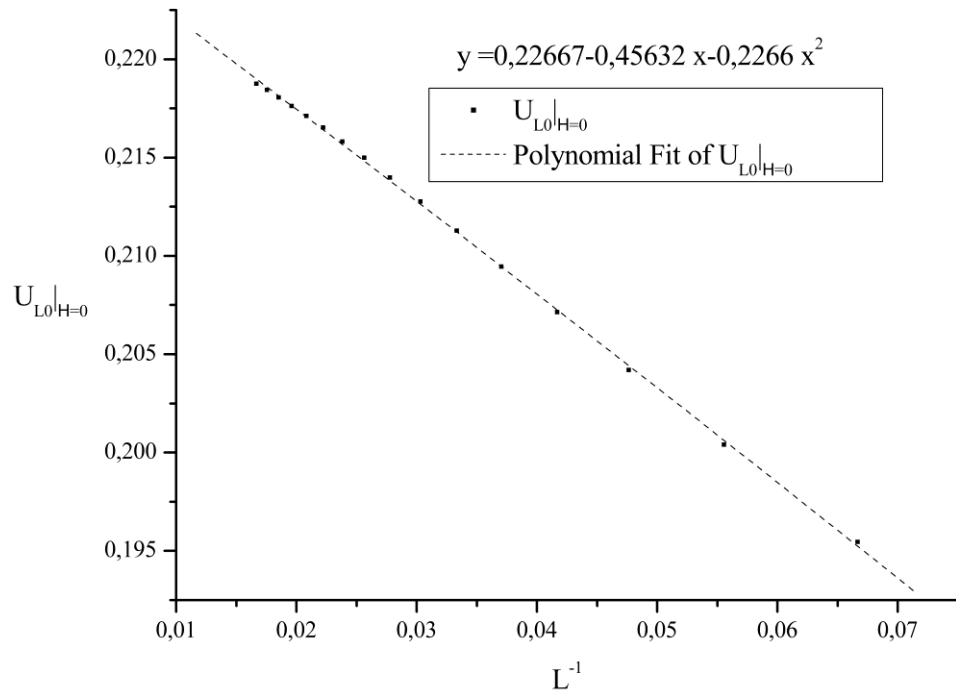
$$C = \lim_{L \rightarrow +\infty} U_L|_{H=0} = \lim_{L \rightarrow +\infty} U_{L0}|_{H=0} \quad (5.5),$$

στο σύνολο των σημείων του παραπάνω διαγράμματος (βλέπε διαγράμματα 5.14, 5.15, 5.16). Τα αποτελέσματα συγκεντρώνονται στον ακόλουθο πίνακα, όπου $R \in [-1,1]$ είναι ο συντελεστής συσχέτισης δυο μεταβλητών x και y , ο οποίος ορίζεται στη στατιστική ([76], [77]) ως μια ποσότητα που εκφράζει σε ποιο βαθμό οι δυο αυτές μεταβλητές συνδέονται μεταξύ τους μέσω μιας ορισμένης μαθηματικής έκφρασης, ενώ το τετράγωνό του $R^2 \in [0,1]$ καλείται συντελεστής προσδιορισμού [77].

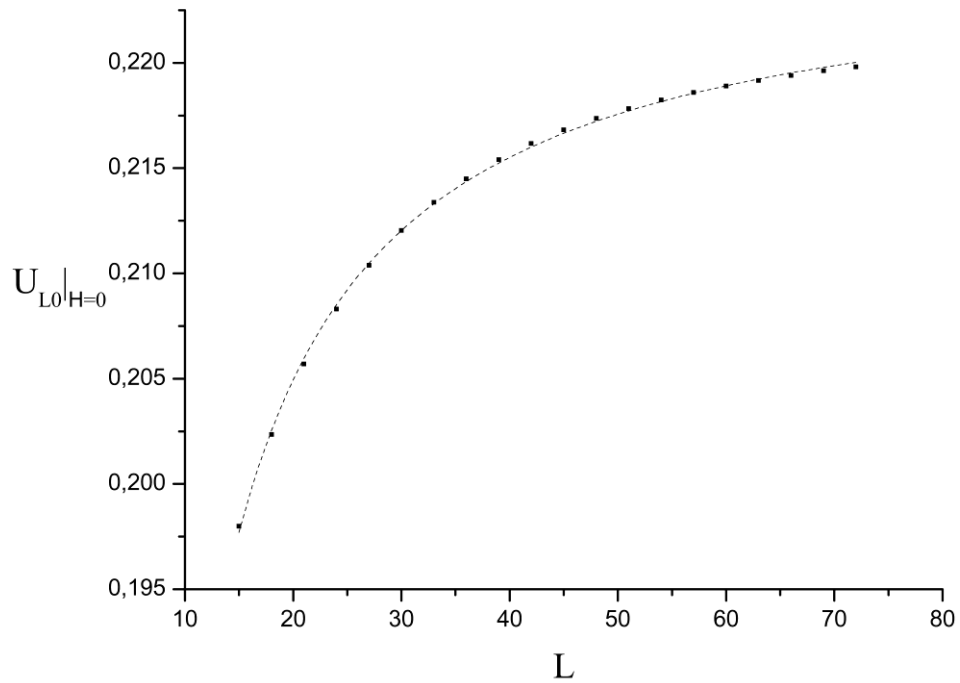
Πίνακας 5.1: Αποτελέσματα των προσαρμογών (fitting) σε θερμοκρασία $\frac{k_B T}{J} = 2,222$.

Συναρτήσεις \ Παράμετροι	-A	δA	-B	δB	C	δC	w	δw	R ²
f_1	0,46	0,02	0,2	0,2	0,2267	0,0003	-	-	0,99950
f_2 (όλα τα L)	-	-	0,52	0,05	0,2263	0,0006	1,04	0,04	0,99951
f_2 (L ≥ 36)	-	-	1,89	0,08	0,22295	0,00005	1,49	0,01	1

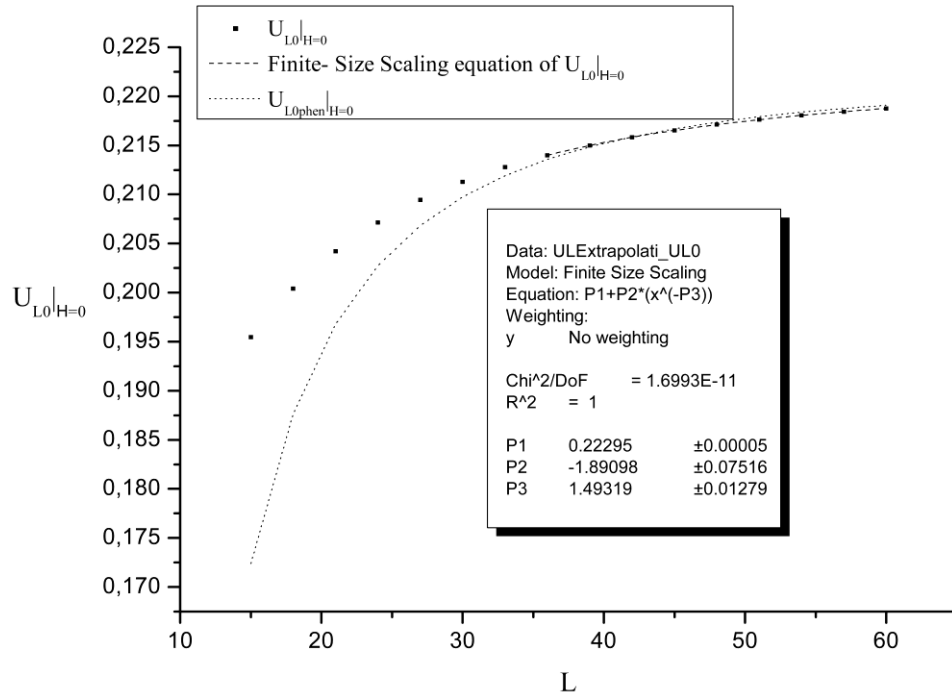
Από τον πίνακα αυτόν παρατηρούμε ότι πέρα από τον όρο τάξης L^{-2} που προβλέπει η φαινομενολογική θεωρία του Binder [78] εμφανίζεται εξίσου σημαντικός και ένας άλλος όρος τάξης L^{-1} , ενώ η τιμή του C είναι κοντά στη θεωρητικά αναμενόμενη $\frac{2}{9} \approx 0,222$ αλλά δεν ταυτίζεται με αυτήν. Αν όμως η προσαρμογή (fitting) γίνει λαμβάνοντας υπόψη μόνο τις τιμές του L που είναι μεγαλύτερες ή ίσες από το 36 τότε η επίδραση του όρου τάξης L^{-1} περιορίζεται δραστικά και η τιμή του C συμπίπτει με τη θεωρητικά αναμενόμενη στα πλαίσια του στατιστικού σφάλματος (βλέπε και διάγραμμα 5.16). Με βάση αυτά μπορούμε με ασφάλεια να συμπεράνουμε πως ο όρος τάξης L^{-1} οφείλεται στις σχετικά μικρές διαστάσεις των χρησιμοποιούμενων υποπλεγμάτων (blocks) και πρακτικά εξαφανίζεται καθώς η διάσταση των τελευταίων μεγαλώνει. Ας σημειωθεί επιπλέον ότι σχεδόν ταυτόσημα αποτελέσματα προκύπτουν και για άλλες θερμοκρασίες μικρότερες από την κρίσιμη, επιβεβαιώνοντας την ορθότητα και τη γενικότητα της φαινομενολογικής θεωρίας των §3.3 και §3.4.



Διάγραμμα 5.14: Γραφική παράσταση $U_{L0|H=0} = f(L^{-1})$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάθρωσης.



Διάγραμμα 5.15: Γραφική παράσταση $U_{L0|H=0} = f(L)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης (εργαστήκαμε με όλα τα δυνατά υποπλέγματα από 12×15 ως 72×75 σε ένα 90×93 πλέγμα Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες).



Διάγραμμα 5.16: Γραφική παράσταση $U_{L0}|_{H=0} = f(L)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης και τη φαινομενολογική θεωρία του Kurt Binder.

Επιπλέον, παριστάνουμε γραφικά της τιμές των αντίστοιχων ισόθερμων μαγνητικών επιδεικτικοτήτων ανά spin- μαγνητική ροπή $\chi_{T+}|_{H=0}$ και $\chi_{T-}|_{H=0}$ στην ίδια θερμοκρασία, όπου $N = L \times (L+3)$, για $L = 15, 18, 21, 24, \dots, 57, 60$, κάνοντας έπειτα προεκβολή (extrapolation) των αποτελεσμάτων στο $L \rightarrow +\infty$ (βλέπε διαγράμματα 5.17, 5.18). Αυτό επιτυγχάνεται όπως προηγουμένως, δηλαδή με προσαρμογή (fitting) της γραφικής παράστασης της συνάρτησης (5.4) στα αντίστοιχα σημεία, λαμβάνοντας όμως υπόψη μόνο τις τιμές του L που είναι μεγαλύτερες ή ίσες του 39. Προκύπτει τελικά ότι

$$\chi_{T+}|_{H=0} = 1,89 \pm 0,02 \quad (5.6),$$

ενώ

$$\chi_{T-}|_{H=0} = 0,28 \pm 0,01 \quad (5.7),$$

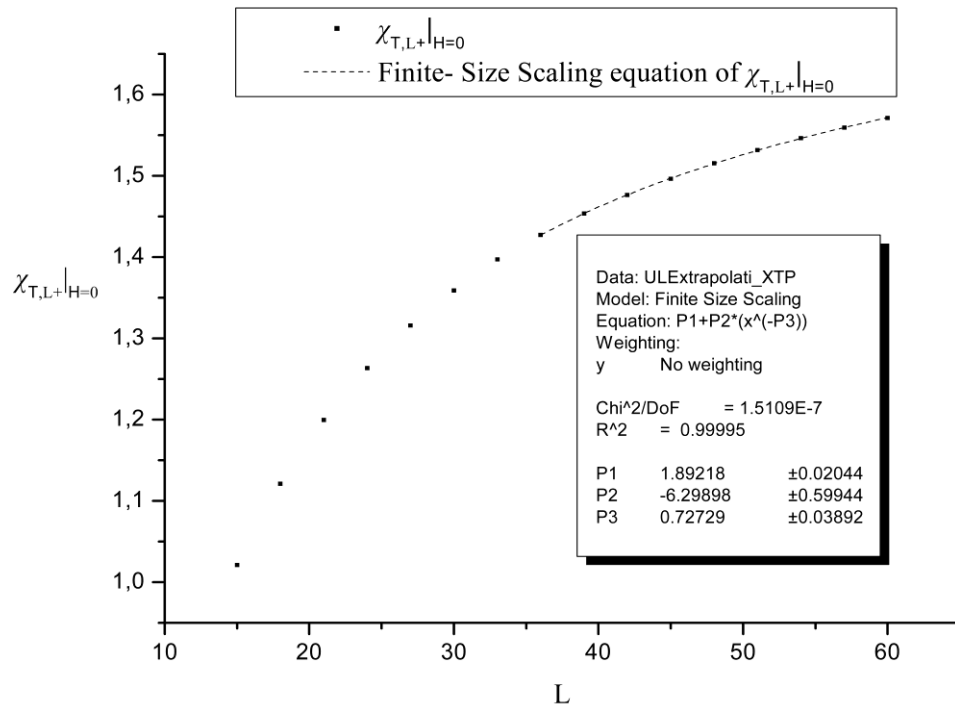
συνεπώς ο λόγος $\frac{\chi_{T+}}{\chi_{T-}}|_{H=0}$ τείνει σε τιμή κοντά στο 6 και όχι στο 3, όπως ίσως θεωρητικά αναμένεται.

Από την άλλη δεν πρέπει να παραβλέπουμε πως ο βαθμός αβεβαιότητας στη δεύτερη περίπτωση είναι αρκετά μεγαλύτερος, πράγμα που άλλωστε φαίνεται από τους συντελεστές προσδιορισμού R^2 (0,99995 και 0,99736 αντίστοιχα). Έτσι, λαμβάνουμε ως ορθό μόνο το αποτέλεσμα (5.6) και το χρησιμοποιούμε για την κατασκευή του διαγράμματος $U_{L0|H=0} = f(L)$ σύμφωνα με τη φαινομενολογική θεωρία του Binder, θεωρώντας όμως ότι $m_{sp}^+ = 1,000[22]$ και κρατώντας όρους μόνο μέχρι την τάξη L^{-2} (βλέπε τον τύπο (3.76)). Ο βαθμός ταύτισής του με τα αντίστοιχα αποτελέσματα των προσομοιώσεων, όπως φαίνεται στο διάγραμμα 5.14, κρίνεται εξαιρετικά ικανοποιητικός για $L \geq 36$.

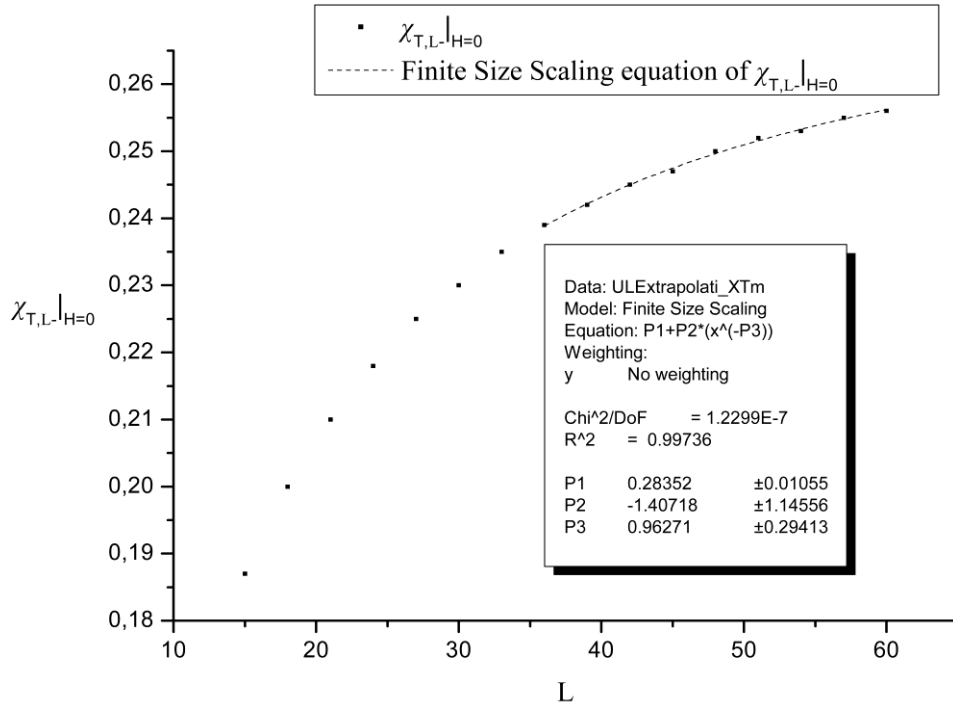
Για να εκλείψει κάθε αμφιβολία αναφορικά με την ορθότητα της φαινομενολογικής θεωρίας που αναπτύξαμε στην §3.4 επιλέγουμε διαδοχικά ομάδες σημείων με πλεγματικά μεγέθη $L = 15-72$, $L = 18-72, \dots$, $L = 45-72$ και ελέγχουμε την προσαρμογή (fitting) της συνάρτησης (5.4) (finite-size scaling) σε καθεμιά από τις παραπάνω ομάδες σημείων, υπολογίζοντας κάθε φορά οριακή τιμή του σωρευτή Binder και τον εκθέτη του μεγέθους πλέγματος L . Τα αποτελέσματα φαίνονται στον Πίνακα 5.2 και παρατηρούμε ότι καθώς αυξάνει το L ο σταθερός όρος παίρνει την τιμή $0,22229 \pm 0,00009$ και ο εκθέτης την τιμή $-1,99 \pm 0,08$, οι οποίες είναι στατιστικά ίσες με τις θεωρητικά προβλεπόμενες $U^* = \frac{2}{9} \approx 0,2222$, όπως φαίνονται στην εξίσωση (3.85).

Πίνακας 5.2: Σύγκλιση των σωρευτών του Binder στο πρότυπο Baxter-Wu σε θερμοκρασία $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ και εξωτερικό μαγνητικό πεδίο $H = 0$.

L	U_{L00}	w
15- 72	0,22526	-1,06017
18- 72	0,22443	-1,15632
21- 72	0,2239	-1,23399
24- 72	0,22353	-1,30044
27- 72	0,22329	-1,3518
30- 72	0,22309	-1,40016
33- 72	0,22294	-1,44218
36- 72	0,22288	-1,46026
39- 72	0,22281	-1,48349
42- 72	0,22275	-1,50532
45- 72	0,22267	-1,53282



Διάγραμμα 5.17: Γραφική παράσταση $\chi_{T,L+}|_{H=0} = f(L)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης.

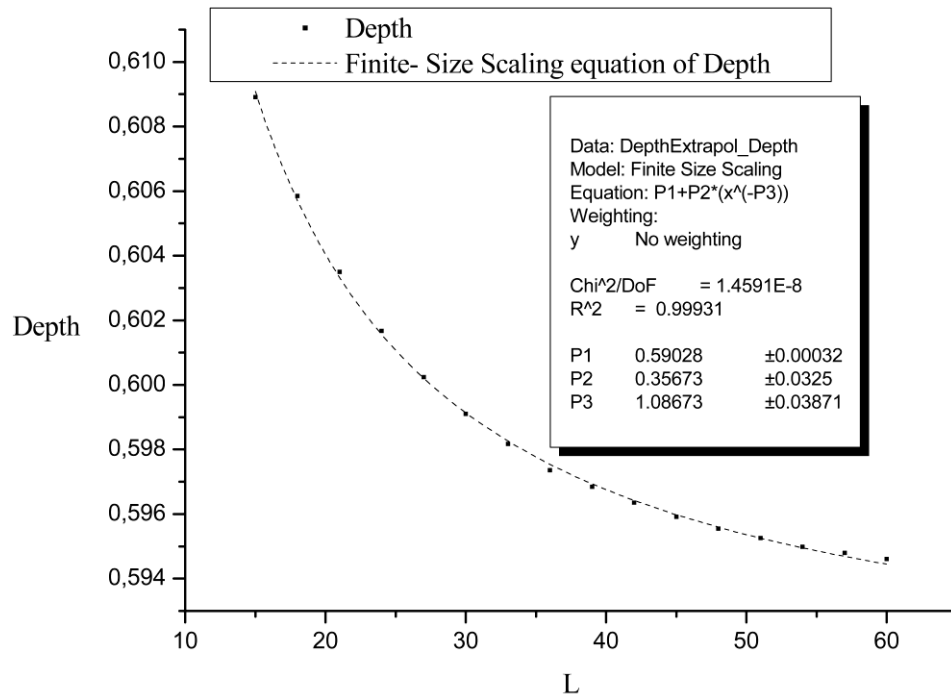


Διάγραμμα 5.18: Γραφική παράσταση $\chi_{T,L}|_{H=0} = f(L)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης.

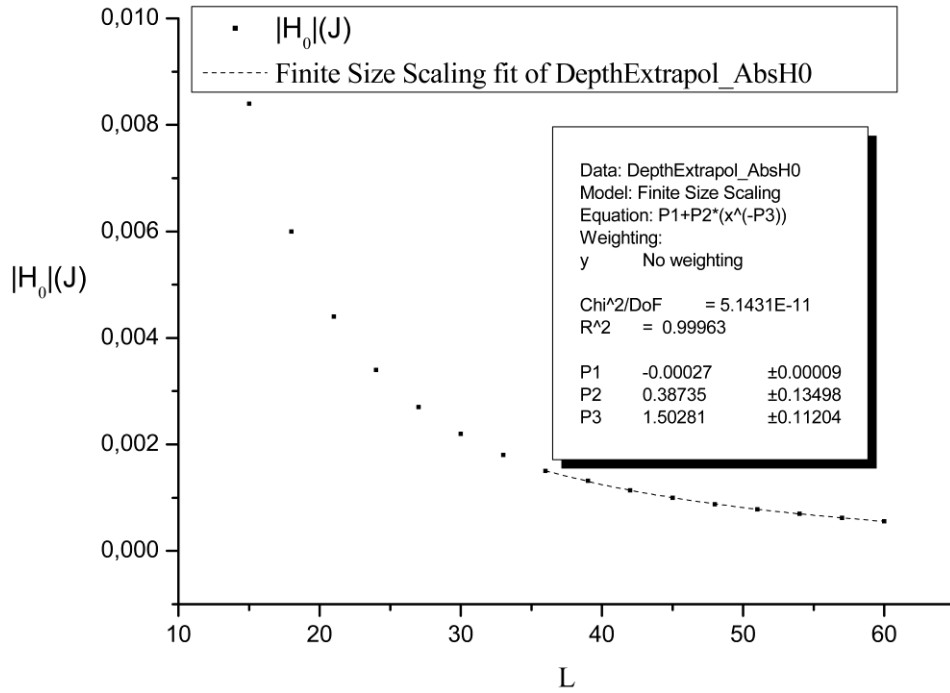
Κλείνουμε τη μελέτη της συμπεριφοράς του μοντέλου Baxter-Wu σε θερμοκρασίες κάτω από την κρίσιμη, εξετάζοντας αν η θέση του ολικού ελαχίστου του αντιστοιχού σωρευτή U_{L0} τείνει στο μηδέν καθώς αυξάνει το πλήθος $L \times (L+3)$ των πλεγματικών σημείων. Για το σκοπό αυτόν παριστάνουμε γραφικά τις τιμές των συναρτήσεων $Depth = f(L)$ και $|H_0| = f(L)$ για $L = 15, 18, 21, 24, \dots, 57, 60$ και $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ (βλέπε τα διαγράμματα 5.19, 5.20), όπου H_0 η τιμή του εξωτερικού πεδίου η οποία αντιστοιχεί στο ελάχιστο U_{L0min} του U_{L0} και $Depth$ το «βάθος» του σχηματιζόμενου πηγαδιού, με άλλα λόγια η απόσταση ανάμεσα στο ελάχιστο U_{L0min} και στην οριακή τιμή του U_{L0} όταν $H \rightarrow \pm\infty$:

$$Depth = \lim_{H \rightarrow \pm\infty} U_{L0} - U_{L0min} = \frac{2}{9} - U_{L0min} \quad (5.8).$$

Μετά προεκβάλλουμε τα αποτελέσματα στο όριο $L \rightarrow +\infty$ χρησιμοποιώντας την εξίσωση (5.4) όπως πριν.



Διάγραμμα 5.19: Γραφική παράσταση του βάθους του πηγαδιού $\text{Depth} = U_{L0|H=+\infty} - U_{L\min} = f(L)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης.



Διάγραμμα 5.20: Γραφική παράσταση της απόλυτης τιμής της θέσης του ελαχίστου του U_{L0}

$|H_0| = f(L)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης.

Τα αποτελέσματα αυτών των προσαρμογών (fitting) μας οδηγούν στο συμπέρασμα ότι όταν $T < T_c$ ο σωρευτής U_{L0} στο θερμοδυναμικό όριο παρουσιάζει ελάχιστο για μηδενικό εξωτερικό πεδίο, όπως στην περίπτωση του μοντέλου Ising. Το ελάχιστο αυτό είναι ίσο με τη σταθερή τιμή $U_{L0}|_{H=0}$, αφού προκύπτει πως

$$\lim_{L \rightarrow +\infty} \text{Depth} = \frac{2}{9} - \frac{2}{9} = 0 \quad (5.9).$$

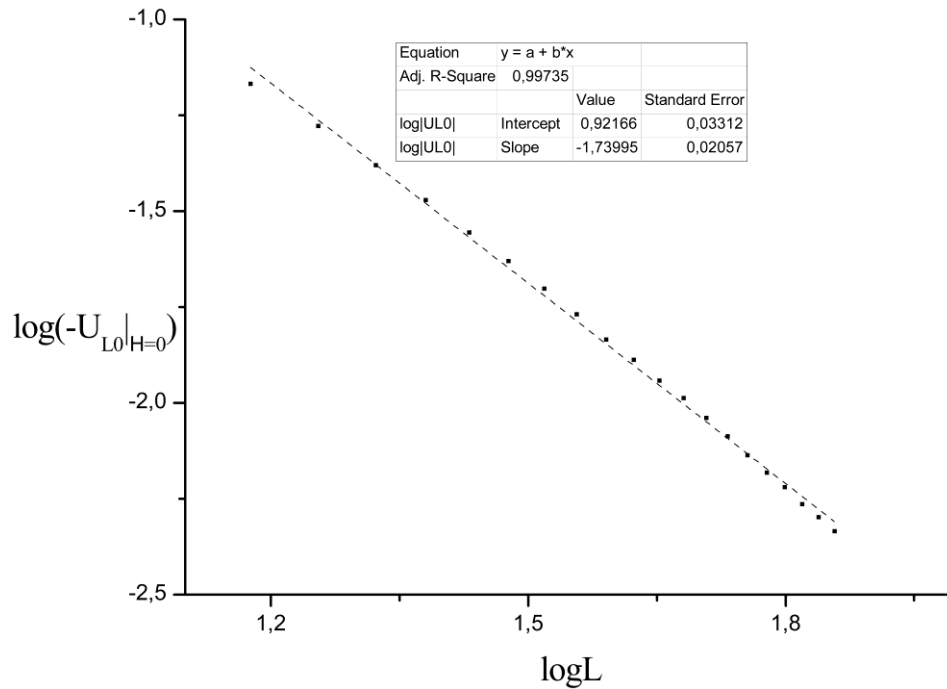
Οι παραπάνω διαφορές μεταξύ των δυο μοντέλων οφείλονται στις διαφορετικές συμμετρίες που παρουσιάζουν, όπως συζητήσαμε στην §3.1 και §3.2. Αξίζει να αναφερθεί στο σημείο αυτό ότι το εξωτερικό πεδίο H_0 το οποίο αντιστοιχεί στο ελάχιστο του U_{L0} είναι με καλή προσέγγιση συνάρτηση του L της μορφής (5.4), ενώ η τιμή του εκθέτη w μπορεί να θεωρηθεί ίση, στα πλαίσια του στατιστικού σφάλματος, με εκείνη ($w = 2$) που προβλέπει η θεωρία κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους (finite-size scaling). Γενικά, ο σωρευτής U_{L0} παρέχει λιγότερες πληροφορίες για τη μορφή της κατανομής $P_{L0}(m)$ σε σχέση με τον U_L , συγκλίνει όμως γρηγορότερα σε προσομοιώσεις Monte Carlo, αφού απαιτεί λιγότερες αριθμητικές πράξεις, πράγμα το οποίο κρίνεται ιδιαίτερα σημαντικό κατά τη μελέτη της κρίσιμης συμπεριφοράς.

Με παρόμοιο τρόπο με αυτόν που περιγράφηκε παραπάνω εργαζόμαστε κατά τη μελέτη των σωρευτών Binder για εξωτερικό μαγνητικό πεδίο $\mathbf{H} = 0$ και θερμοκρασίες μεγαλύτερες από την κρίσιμη, όπως για παράδειγμα $\beta = \frac{k_B T}{J} = 3,000$. Στην περίπτωση αυτή απουσιάζει οποιαδήποτε αλλαγή φάσης και η κατανομή γίνεται απλή κανονική κατανομή (Gaussian). Φυσικά, οι σωρευτές Binder συγκλίνουν καθαρά στο μηδέν από αρνητικές τιμές και το σύστημα προεκβολής που περιγράφηκε παραπάνω αν εφαρμοστεί για την κλίση του λογαριθμικού διαγράμματος της απόλυτης τιμής των σωρευτών Binder cumulants ως προς το μέγεθος L του πλέγματος δίνει $-2,01 \pm 0,02$ για τον αντίστοιχο εκθέτη, και πάλι σε καλή συμφωνία με τον τύπο (3.85) (βλέπε πίνακα 5.3 και διάγραμμα 5.21).

Πίνακας 5.3: Πίνακας σύγκλισης της κλίσης του λογαριθμικού διαγράμματος της απόλυτης τιμής των σωρευτών του Binder σε συνάρτηση με το πλεγματοτικό μέγεθος L στο πρότυπο Baxter-

Wu για $\frac{k_B T}{J} = 3,000$ και $\mathbf{H} = 0$.

L	w	Errw
15- 72	-1,74	0,02
18- 72	-1,77	0,02
21- 72	-1,80	0,02
24- 72	-1,82	0,02
27- 72	-1,84	0,02
30- 72	-1,86	0,02
33- 72	-1,87	0,02
36- 72	-1,89	0,02
39- 72	-1,90	0,02
42- 72	-1,93	0,02
45- 72	-1,95	0,02



Διάγραμμα 5.21: Λογαριθμικό διάγραμμα των απόλυτων τιμών των σωρευτών Binder (οι τιμές τους ήταν όλες αρνητικές) ως προς το μέγεθος L του πλέγματος στο πρότυπο Baxter-Wu για

θερμοκρασία $\frac{k_B T}{J} = 3,000$ και $H = 0$ προσομοιωμένο με τον αλγόριθμο Metropolis

θεωρήσαμε όλα τα υποπλέγματα Binder από 12×15 μέχρι 72×75 σε ένα 90×93 πλέγμα Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες).

5.3 Απόπειρα μελέτης του κρίσιμου σημείου με τον αλγόριθμο Metropolis

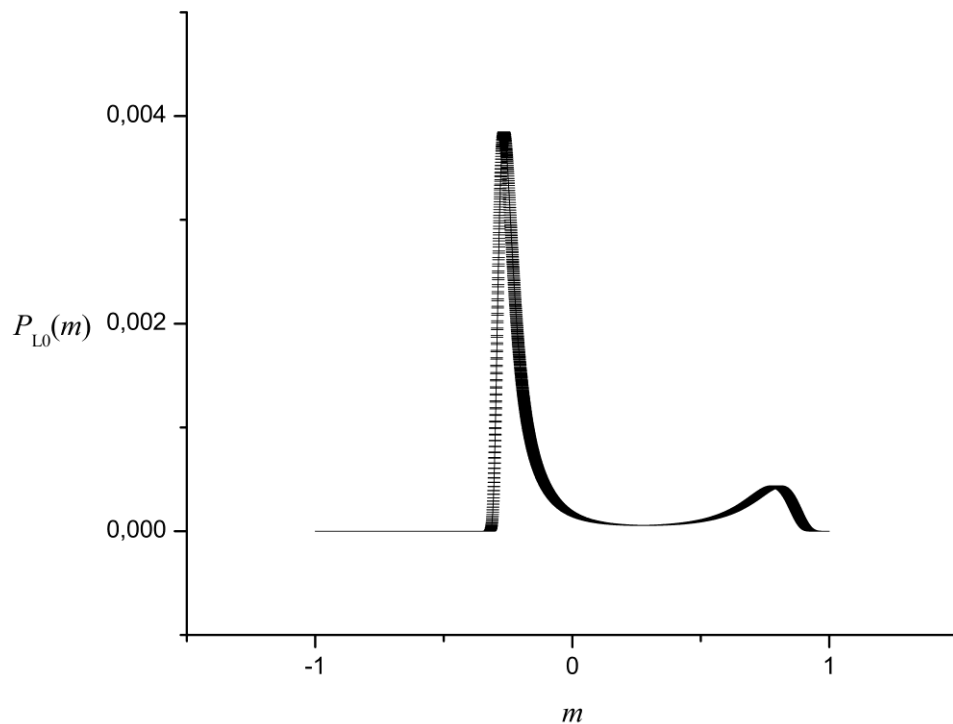
Σε αυτήν την ενότητα αρχίζουμε τη μελέτη του προτύπου Baxter-Wu στο κρίσιμο σημείο του για μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Για το προκαταρκτικό αυτό στάδιο της έρευνάς μας αξιοποιούμε τον ήδη υπάρχοντα και δοκιμασμένο αλγόριθμο Metropolis. Παράλληλα, παίρνουμε μια πρώτη ιδέα για την αποτελεσματικότητά του στην πράξη στην κρίσιμη περιοχή. Αρχικά βρισκουμε την κατανομή της συνολικής μαγνητικής ροπής ανά δομικό λίθο

$P_{L0}(m)$ σε θερμοκρασία $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και $H = 0$ για υποπλέγματα Binder

διαστάσεων 15×18 ως 102×105 , τα οποία ανήκουν σε ένα ενιαίο προσομοιούμενο πλέγμα 102×105 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Ο χρόνος ισορροπίας (equilibration time) τ_{eq} του προσομοιούμενου συστήματος λαμβάνεται ίσος με 10^7 Monte Carlo sweeps ενώ το πρόγραμμα αφήνεται να συλλέξει δεδομένα για χρόνο $\Delta t_2 = 10^9$ Monte Carlo sweeps. Επειδή θέλουμε να σχηματίσουμε μια εικόνα τουλάχιστο για την τάξη μεγέθους των στατιστικών σφαλμάτων επαναλαμβάνουμε τις εκτελέσεις (runs) του παραπάνω αλγορίθμου για τέσσερις διαφορετικούς κάθε φορά «σπόρους» (“SEEDS”) της χρησιμοποιούμενης γεννήτριας τυχαίων αριθμών, ώστε να επιτύχουμε τη λήψη

ανεξάρτητων μεταξύ τους κατανομών στις ίδιες συνθήκες. Αυτές έπειτα τις συνδυάζουμε για να προκύψουν οι μέσες τιμές και τα αντίστοιχα σφάλματα.

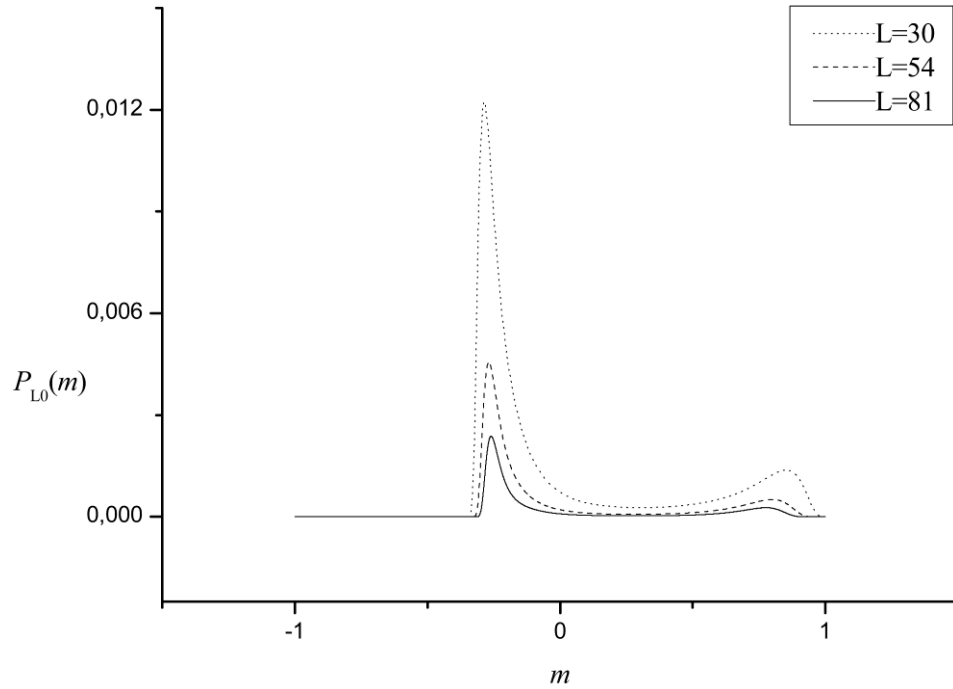
Στο διάγραμμα 5.22 απεικονίζεται η κατανομή $P_{L0}(m)$ που προκύπτει αν $L = 60$. Παρατηρούμε ότι αυτή, αντίθετα από ότι στο μοντέλο Ising [65], παρουσιάζει δυο ασύμμετρους λοβούς γύρω από τις θέσεις $m = 1$ και $m = -3^{-1}$, οι οποίες αντιστοιχούν στις συνολικές μαγνητικές ροπές ανά δομικό λίθο των τεσσάρων θεμελιωδών μικροκαταστάσεων για τις οποίες μιλήσαμε παραπάνω. Επιπλέον, σε αυτήν όλες οι μικροκαταστάσεις με συνολική μαγνητική ροπή μεταξύ των δυο κορυφών της έχουν μη αμελητέα πιθανότητα εμφάνισης, με αποτέλεσμα το σύστημα να μπορεί σε αρκετά μικρό χρόνο να περνά από τις καταστάσεις του ενός λοβού σε αυτές του άλλου. Αυτό σημαίνει πως στο κρίσιμο σημείο δεν υπάρχουν καταστάσεις σπασμένης συμμετρίας, άρα η ζητούμενες κατανομές προκύπτουν απευθείας από τα αποτελέσματα της προσομοίωσης, χωρίς να χρειάζεται να εργαζόμαστε κάθε φορά για δυο διαφορετικές θεμελιώδεις αρχικές καταστάσεις όπως στην §5.2, τα αποτελέσματα των οποίων συνδυάζονταν έπειτα κατάλληλα για να προκύψει η ολική πιθανότητα, με τη βοήθεια ενός τύπου όπως ο (5.2).



Διάγραμμα 5.22: Γραφική παράσταση $P_{L0} = f(m)$ στο μοντέλο Baxter-Wu, για $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$, $H = 0$ και $L = 60$, όπως προκύπτει από τα αποτελέσματα του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης.

Κατόπιν, με βάση τα αποτελέσματα του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης, σχεδιάζουμε στο ίδιο διάγραμμα τις παραπάνω κατανομές για $L = 30$,

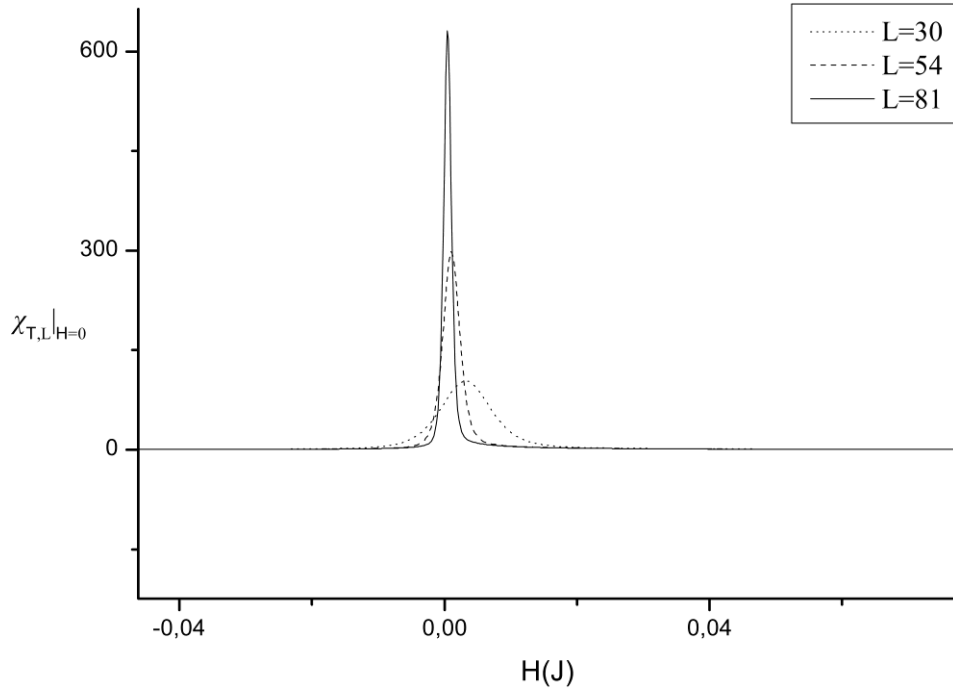
$L = 54$ και $L = 81$. Η απεικόνιση που προκύπτει (βλέπε διάγραμμα 5.23) δηλώνει πως η κατανομή της συνολικής μαγνητικής ροπής ανά δομικό λίθο υπακούει σε μια σχέση κλιμάκωσης. Η μορφή της διαφέρει αρκετά από την αντίστοιχη για $T < T_c$, συνεπώς δεν μπορεί να περιγραφεί από τον τύπο (3.8). Όπως είδαμε στις §3.2 και §3.3, στον Binder ήταν γνωστό ότι αυτή θα υπάκουε στη σχέση κλιμάκωσης (3.86).



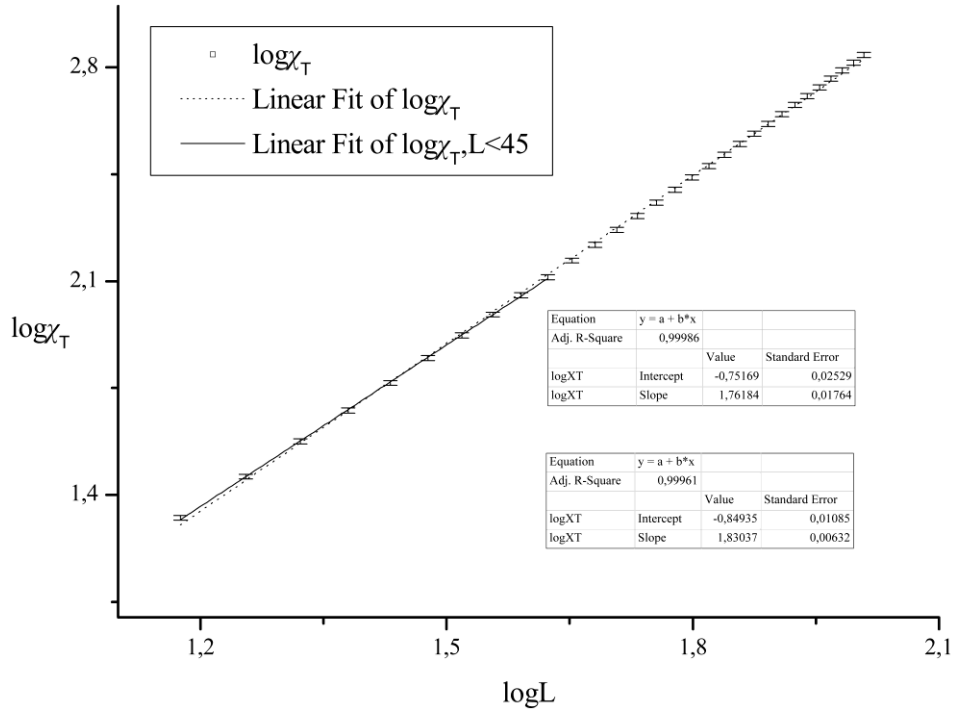
Διάγραμμα 5.23: Γραφικές παραστάσεις $P_{L0} = f(m)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $L = 30$, $L = 54$, $L = 81$, $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και $H = 0$, όπως προκύπτουν από τα αποτελέσματα του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης. Τα στατιστικά σφάλματα παραλείπονται για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.

Ένα πρώτο κριτήριο ελέγχου των υπολογισμών μας θα είναι η συμπεριφορά του εκθέτη της ισόθερμης μαγνητικής επιδεικτικότητας. Χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (1.34), (4.44), (4.45) και την κατανομή $P_{L0}(m)$ υπολογίζουμε και κατόπιν παριστάνουμε γραφικά την ισόθερμη μαγνητική επιδεικτικότητα $\chi_{T,L}$ σε συνάρτηση με το εξωτερικό πεδίο H (διάγραμμα 5.24) για $L = 30$, $L = 54$ και $L = 81$. Παρατηρούμε ότι το διάγραμμα $\chi_{T,L} = f(H)$ παρουσιάζει μέγιστο, ενδεικτικό αλλαγής φάσης, και τόσο η θέση του μεγίστου όσο και το ύψος του μεταβάλλονται με την αύξηση του μεγέθους του εξεταζόμενου πλέγματος. Για να ελέγξουμε το είδος της πραγματοποιούμενης αλλαγής φάσης παριστάνουμε γραφικά τις τιμές της ισόθερμης μαγνητικής επιδεικτικότητας για μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος χρησιμοποιώντας λογαριθμικό διάγραμμα (διάγραμμα 5.25). Η κλίση της ευθείας που προκύπτει ισούται με $1,830 \pm 0,006$, αν συμπεριλάβουμε όλα τα διαθέσιμα υποπλέγματα Binder, διαστάσεων από 15×18 ως 102×105 . Αν πάλι

συμπεριλάβουμε μόνο εκείνα με διαστάσεις από 15×18 ως 42×45 η κλίση της αντίστοιχης ευθείας γίνεται $1,76 \pm 0,02$. Έτσι, λαμβάνοντας υπόψη και την επίδραση των συνοριακών συνθηκών, μπορούμε να ισχυριστούμε ότι η παραπάνω κλίση είναι κατά προσέγγιση ίση με το λόγο $\frac{\gamma}{\nu} = 1,75$ του πλέγματος [29], στοιχείο αναμενόμενο και ενδεικτικό κρίσιμης αλλαγής φάσης σύμφωνα με τη Θεωρία Κλιμάκωσης Πεπερασμένου Μεγέθους (Finite-Size Scaling).



Διάγραμμα 5.24: Γραφικές παραστάσεις $\chi_{T,L} = f(H)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $L = 30$, $L = 54$, $L = 81$, $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$, σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης. Τα στατιστικά σφάλματα παραλείπονται για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.



Διάγραμμα 5.25: Διάγραμμα $\log\chi_T = f(\log L)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$

και $H = 0$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σεiriακής σάρωσης.

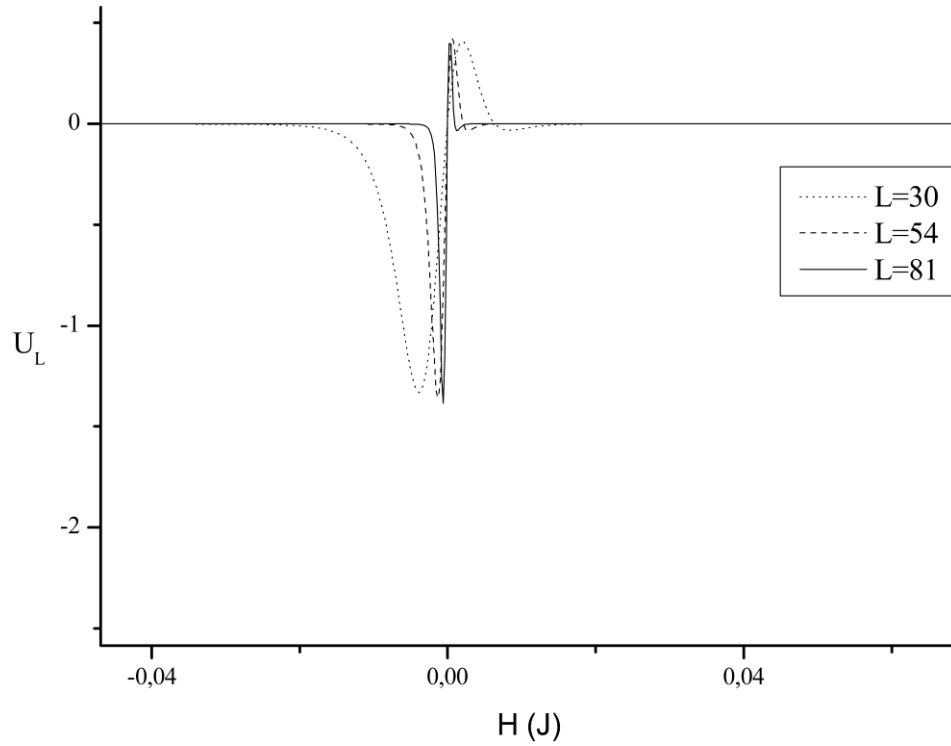
Στη συνέχεια, χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (3.34), (3.35), (3.36), (3.38), (4.45) και την κατανομή $P_{L0}(m)$ βρίσκουμε και παριστάνουμε γραφικά τους σωρευτές του Binder U_L (διάγραμμα 5.26) και U_{L0} (διάγραμμα 5.27) όταν $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$, σε συνάρτηση με το εξωτερικό πεδίο H για $L = 30$, $L = 54$ και

$L = 81$. Στο διάγραμμα 5.26 μπορούμε να δούμε ότι ο σωρευτής U_L τείνει στο μηδέν καθώς η απόλυτη τιμή του εξωτερικού πεδίου H μεγαλώνει. Ακόμα η συνάρτηση $U_L = f(H)$, σε αντίθεση με αυτήν του προτύπου Ising, παρουσιάζει δυο διαφορετικά τοπικά ελάχιστα για πεπερασμένο πλέγμα, το ένα για θετικά H ενώ το άλλο, το οποίο είναι και το ολικό ελάχιστό της, για αρνητικά H . Το ολικό της μέγιστο εδώ δεν παρουσιάζεται για $H = 0$ αλλά για $H > 0$. Τα προαναφερθέντα τοπικά ακρότατα περιμένουμε να εξαφανιστούν στο θερμοδυναμικό όριο.

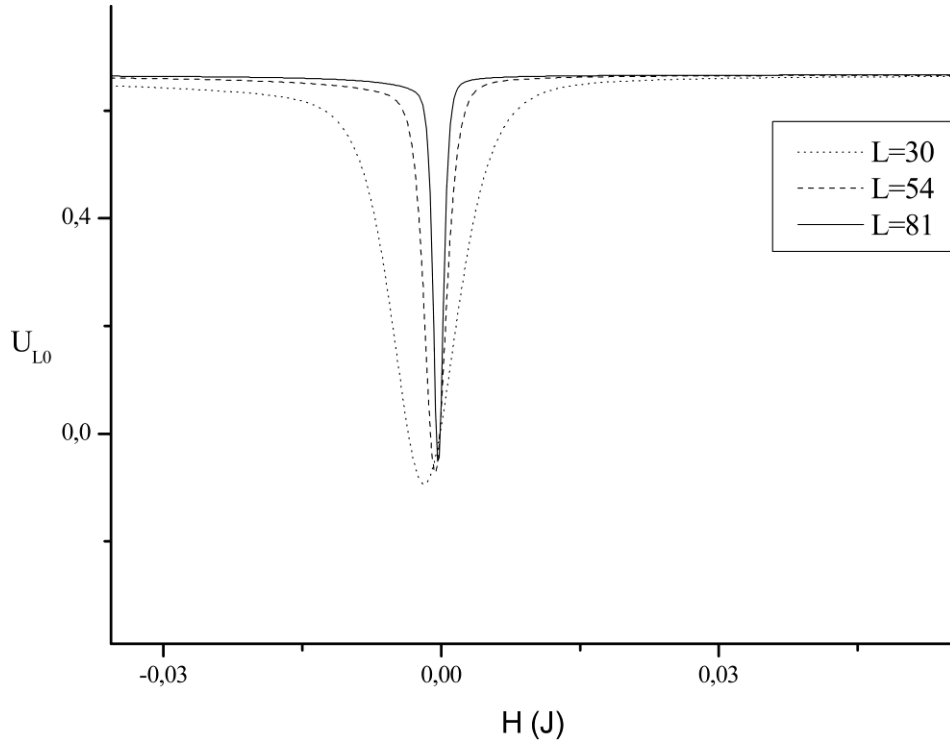
Όμοια από το διάγραμμα 5.27 μπορούμε να πούμε ότι ο σωρευτής U_{L0} τείνει στην τιμή $\frac{2}{3} \approx 0,666$ καθώς η απόλυτη τιμή του εξωτερικού πεδίου H

μεγαλώνει. Ακόμα η συνάρτηση $U_{L0} = f(H)$ δεν παρουσιάζει τοπικά μέγιστα αλλά μόνο ένα ολικό ελάχιστο. Αντίθετα από ότι στο πρότυπο Ising [23], το ολικό αυτό ελάχιστο δεν παρουσιάζεται για $H = 0$ αλλά για $H < 0$, όπως θα

φανεί λεπτομερέστερα στη συνέχεια. Ας θυμηθούμε εδώ ότι παρόμοια ήταν η συμπεριφορά του U_{L0} και στις χαμηλότερες θερμοκρασίες.

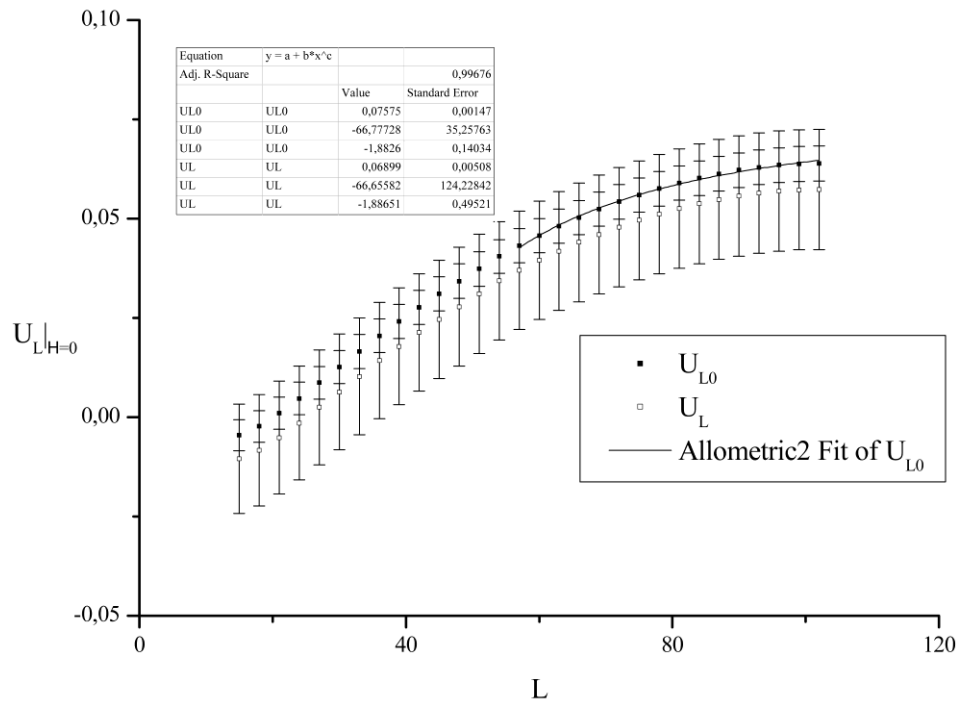


Διάγραμμα 5.26: Γραφικές παραστάσεις $U_L = f(H)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $L = 30$, $L = 54$, $L = 81$, $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$, σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάθρωσης. Τα στατιστικά σφάλματα παραλείπονται για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.



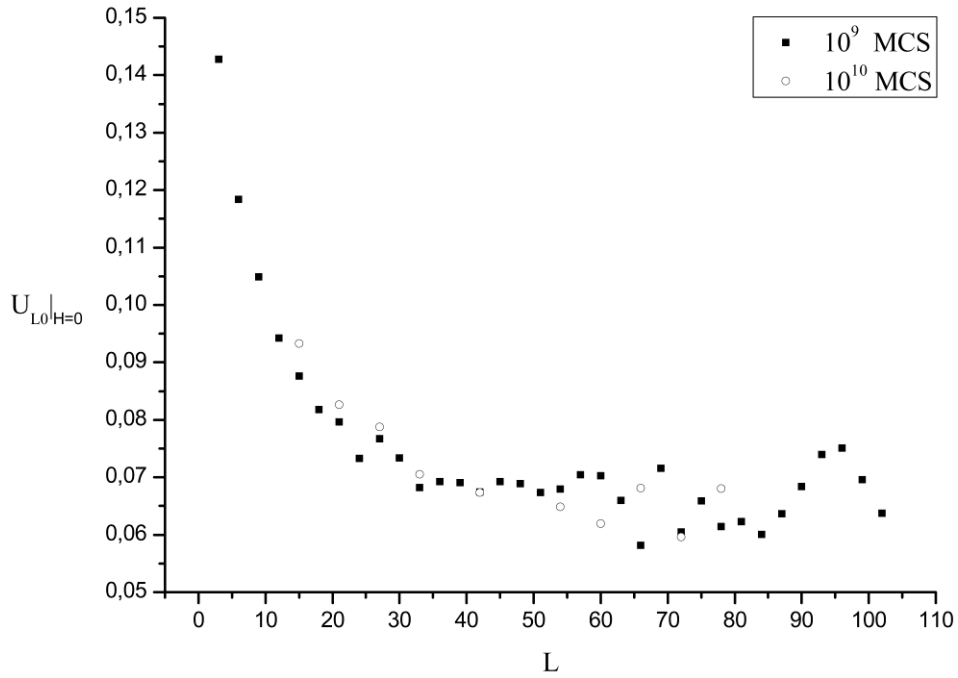
Διάγραμμα 5.27: Γραφικές παραστάσεις $U_{L0} = f(H)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $L = 30$, $L = 54$, $L = 81$, $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$, σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης. Τα στατιστικά σφάλματα παραλείπονται για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.

Ύστερα μελετάμε τους σωρευτές U_L και U_{L0} στο πρότυπο Baxter-Wu για $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και $H = 0$, όπου η σχετική φαινομενολογική θεωρία της §3.4 προβλέπει την ύπαρξη μιας χαρακτηριστικής τιμής. Έτσι παριστάνουμε γραφικά τις τιμές των αντίστοιχων συναρτήσεων $U_L|_{H=0} = f(L)$ και $U_{L0}|_{H=0} = f(L)$, οι οποίες προφανώς πρέπει να ταυτίζονται πλήρως στα όρια του στατιστικού σφάλματος, για τα υποπλέγματα $L \times (L+3)$, με $L = 15, \dots, 102$, με τα οποία εργαστήσαμε παραπάνω, επιχειρώντας να κάνουμε προεκβολή (extrapolation) των αποτελεσμάτων μας για $L \rightarrow +\infty$. Τα σημεία που προκύπτουν φαίνονται στο διάγραμμα 5.28. Ο τρόπος σύγκλισής τους είναι προφανώς διαφορετικός από αυτόν που συζητήθηκε στις §3.1 και §3.2, πράγμα που φανερώνει την εξάρτηση των σωρευτών Binder και από τις συνοριακές συνθήκες, η οποία έχει ήδη καταγραφεί στη σχετική βιβλιογραφία [73]. Παράλληλα, τα στατιστικά σφάλματα που προκύπτουν είναι εμφανώς μεγάλα, πράγμα το οποίο επηρεάζει την προσαρμογή των αποτελεσμάτων μας σε μια συνάρτηση του τύπου (5.4), όπως παρατηρούμε και στο διάγραμμα 5.28



Διάγραμμα 5.28: Γραφικές παραστάσεις $U_{L0}|_{H=0} = f(L)$ και $U_L|_{H=0} = f(L)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης.

Με σκοπό να έχουμε μια καλύτερη εικόνα της συμπεριφοράς των σωρευτών U_L και U_{L0} στο κρίσιμο σημείο του πρότυπο Baxter-Wu για $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και $H = 0$, επαναλαμβάνουμε την προηγούμενη διαδικασία για ανεξάρτητα πλέγματα $L \times (L+3)$, με $L = 3, 6, 9, 12, \dots, 102$ και περιοδικές συνοριακές συνθήκες (αφού ως γνωστόν [73] οι σωρευτές Binder εξαρτώνται και από τις συνοριακές συνθήκες), επιχειρώντας να κάνουμε προεκβολή (extrapolation) των αποτελεσμάτων μας για $L \rightarrow +\infty$. Τα σημεία που προκύπτουν φαίνονται στο διάγραμμα 5.29. Ας σημειωθεί ότι παρόμοια είναι η συμπεριφορά στο κρίσιμο σημείο τόσο του αλγορίθμου Metropolis με τυχαία σάρωση όσο και άλλων αλγορίθμων ενός spin-flip, όπως του Heat-Bath [16], με σειριακή ή τυχαία σάρωση.



Διάγραμμα 5.29: Γραφική παράσταση $U_{L0} = f(L)$ στο πρότυπο Baxter-Wu για θερμοκρασία $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και εξωτερικό μαγνητικό πεδίο $H = 0$, σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης με 10^9 Monte Carlo Steps και 10^{10} Monte Carlo Steps (για ορισμένα μεγέθη πλέγματος). Εδώ χρησιμοποιήθηκαν ανεξάρτητα πλέγματα με περιοδικές συνοριακές συνθήκες.

Είναι προφανές ότι δεν μπορεί να βγει κάποιο συμπέρασμα για τους στατιστικούς σωρευτές Binder χρησιμοποιώντας τύπους σύγκλισης σαν τον (5.4) αφού προκύπτουν αποτελέσματα με μεγάλα στατιστικά σφάλματα. Αυτό πιθανότατα οφείλεται όχι μόνο στις κρίσιμες διακυμάνσεις αλλά και στην κρίσιμη επιβράδυνση (critical slowing down). Το φαινόμενο αυτό παρουσιάζεται εντονότερα σε αλγόριθμους ενός spin-flip, όπως ο Metropolis ή ο Heat-Bath, πράγμα που τους κάνει να αντενδίδουν για την περιγραφή της κρίσιμης συμπεριφοράς, αφού χρειάζονται πολύ μεγάλο αριθμό βημάτων (της τάξης του 10^{10}) για έναν ικανοποιητικό προσδιορισμό της κρίσιμης τιμής αρκετών φυσικών μεγεθών [16].

Συνοψίζοντας, στις προηγούμενες ενότητες μελετήθηκε μέσω προσομοιώσεων Monte Carlo (αλγόριθμος Metropolis) η συμπεριφορά του προτύπου Baxter-Wu για μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο μακριά από το κρίσιμο σημείο. Επαληθεύτηκαν γνωστές σχέσεις για την κατανομή μαγνήτισης και την ισόθερμη μαγνητική επιδεικτικότητα ενώδείχτηκε ότι για τους στατιστικούς σωρευτές Binder ισχύει ο τύπος (3.85), δηλαδή (για τη σημασία των χρησιμοποιούμενων συμβόλων ο ενδιαφερόμενος αναγνώστης μπορεί να ανατρέξει στο κεφάλαιο 3)

$$U_L|_{H=0} = U_{L0}|_{H=0} \approx \begin{cases} \frac{2}{9} + \frac{A_1}{L^2} + O(L^{-4}), \text{ αν } T < T_c \\ \frac{A_2}{L^2} + O(L^{-4}), \text{ αν } T > T_c \end{cases} \quad (5.10),$$

όπου A_1, A_2 σταθερές. Στο κρίσιμο σημείο, η εξαγωγή ασφαλών συμπερασμάτων τόσο για την πυκνότητα πιθανότητας μαγνήτισης όσο και για τους στατιστικούς σωρευτές καθώς και η πλήρης επαλήθευση κάποιων προτεινόμενων σχέσεων απαιτεί ακρίβεια η οποία δεν είναι συνήθως εφικτή με αλγορίθμους σαν τον Metropolis. Συνεπώς, η οριστική λύση τέτοιων προβλημάτων απαιτεί την ανάπτυξη νέων αλγορίθμων, κατάλληλων για την κρίσιμη περιοχή του μοντέλου Baxter-Wu, και συστηματική επανάληψη των υπολογισμών μας. Αυτά θα μας απασχολήσουν στα δυο επόμενα κεφάλαια. Την παρουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου θα την εξετάσουμε στο Κεφάλαιο 8.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6: Ο ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ ΠΛΕΙΑΔΩΝ (CLUSTER) ΤΡΙΓΩΝΩΝ ΓΙΑ ΤΟ ΠΡΟΤΥΠΟ BAXTER-WU

6.1 Η γενική ιδέα του αλγορίθμου

Από τη μελέτη του προτύπου Baxter-Wu που προηγήθηκε έγινε φανερό ότι ο αλγόριθμος Metropolis είναι κατάλληλος για τη γενική μελέτη του μοντέλου μακριά από την κρίσιμη περιοχή. Ομοίως συμβαίνει και τους άλλους αλγορίθμους ανεξάρτητων αναστροφών spin (single- spin flip), όπως του Heat-Bath, όπως μας δείχνουν σχετικές μελέτες για διάφορα πρότυπα [16]. Επίσης, ούτε οι αλγόριθμοι εντροπικής δειγματοληψίας (entropic sampling), παρέχουν στις περισσότερες των περιπτώσεων ικανοποιητική ακρίβεια για τη μελέτη της κρίσιμης συμπεριφοράς, αλλά εξαιτίας της διάδοσης σφαλμάτων που προκύπτουν κατά τον υπολογισμό της πυκνότητας των καταστάσεων του συστήματος. Το μόνο ουσιαστικό πλεονέκτημα των δεύτερων σε σχέση με τους πρώτους είναι ότι δε χρειάζεται να επαναληφθούν οι προσομοιώσεις όταν αλλάζουν οι συνθήκες θερμοκρασίας και πίεσης, όμως και αυτό δεν είναι εύκολο να αξιοποιηθεί όταν το πλεγματοτικό μέγεθος μεγαλώνει χωρίς να καταφύγουμε σε ειδικές τεχνικές, όπως η CrMES ([93], [94], [95], [96]). Αν θελήσουμε ακριβή αποτελέσματα για μεγέθη που αφορούν αλλαγές φάσης ανώτερης τάξης απαιτούνται ειδικοί αλγόριθμοι προσομοίωσης. Οι περισσότεροι τέτοιοι αλγόριθμοι ανήκουν, όπως είδαμε στο κεφάλαιο 4, στην οικογένεια των αλγορίθμων πλειάδων (cluster). Θυμίζουμε πως η λέξη πλειάδα αποτελεί μια απόδοση στα ελληνικά του αγγλικού όρου cluster, η οποία προτάθηκε από τους Λικουργιώτη και Κορδούλη ([13], [14]), χωρίς όμως να έχει γίνει πλήρως αποδεκτή. Εναλλακτικά έχουν προταθεί και οι όροι σύμπλεγμα ή συσσωμάτωμα, οι οποίοι όμως κρίναμε πως δεν αποδίδουν ορθά το περιεχόμενό της.

Για το πρότυπο Baxter-Wu όπως και γενικότερα για τα συστήματα πολλαπλών ή άλλων πολύπλοκων αλληλεπιδράσεων η ανάπτυξη τέτοιων αλγορίθμων δεν είναι τετριμμένη υπόθεση. Το γεγονός αυτό σε συνδυασμό με το σχετικά περιορισμένο ως σήμερα ενδιαφέρον της επιστημονικής κοινότητας για τη μελέτη προτύπων με τριπλές αλληλεπιδράσεις δεν επέτρεψαν την ιδιαίτερη εξέλιξη τέτοιων αριθμητικών μεθόδων. Η πρώτη απόπειρα ανάπτυξης ενός αλγορίθμου πλειάδων για το πρότυπο Baxter-Wu οφείλεται στους Novotny και Evertz το 1992 [87]. Η σχετική εργασία παρουσιάστηκε σε ένα επιστημονικό συνέδριο και έπειτα παρέμεινε ουσιαστικά λησμονημένη επί σειρά ετών, κυρίως γιατί δε φάνηκε να δίνει τόσο βελτιωμένα αποτελέσματα όσο αντίστοιχες μέθοδοι σε άλλα μοντέλα, όπως το Ising ([88], [103]). Ένας δεύτερος λόγος ήταν ίσως η μεγάλη πολυπλοκότητα και οι αυξημένες απαιτήσεις του σχετικού προγράμματος σε υπολογιστικούς πόρους. Μετά το 2000 ο αλγόριθμος αυτός εξελίχθηκε από την ερευνητική ομάδα των Deng και Blöte στο πανεπιστήμιο του Delft ([45], [48]), στην Ολλανδία, η οποία τον εφάρμοσε τόσο στη μορφή Swendsen-Wang όσο και στη μορφή Wolff, όχι μόνο για το πρότυπο Baxter-Wu αλλά και για τις αυτοόμοιες (self-dual) γενικεύσεις του.

Προσπάθειες ανάπτυξης ενός τέτοιου αλγορίθμου είχαν ήδη ξεκινήσει από το Σωτήριο Μαρτίνο και την ερευνητική ομάδα κρίσιμων φαινομένων και στατιστικής μηχανικής του τομέα Φυσικής Στερεάς Κατάστασης Πανεπιστημίου Αθηνών, χωρίς να καταλήξουν καταρχήν σε κάποιο θετικό αποτέλεσμα. Πρόοδος σε αυτό το θέμα άρχισε να συντελείται όταν σκεφτήκαμε, επηρεασμένοι από τις ιδέες του Ferenc Niedemayer [84] για τους γενικευμένους αλγορίθμους πλειάδων, να εισάγουμε μια διαφορετική προσέγγιση στην κατασκευή της πλειάδας, την πλειάδα τριγώνων. Στην ουσία, αφού επιλέγαμε τυχαία ένα σημείο στο τριγωνικό πλέγμα, αρχίζαμε να αναπτύσσουμε την πλειάδα προσθέτοντας τριάδες γειτονικών σημείων (κορυφές τριγώνων, εξ ου και το όνομα που πήρε αυτός ο αλγόριθμος) αντί για μεμονωμένα σημεία, με μια πιθανότητα τέτοια ώστε ο αλγόριθμος να υπακούει στις αρχές της εργοδικότητας ή προσβασιμότητας (ergodicity) και της μικροαντιστρεψιμότητας ή λεπτομερούς ισορροπίας (detailed balance). Έτσι ελπίζαμε ότι θα προέκυπτε μια μέθοδος που θα σεβόταν περισσότερο τις συμμετρίες του συστήματος, αφού χρησιμοποιούσε απευθείας τη Χαμιλτονιανή (3.1), άρα θα έδινε καλύτερα αποτελέσματα σε σχέση με τις προηγούμενες, ενώ θα γενικευόταν απλούστερα σε πολυπλοκότερα μοντέλα με τριπλές αλληλεπιδράσεις, όπως το dilute Baxter-Wu πρότυπο [41].

Στην υπόλοιπη ενότητα περιγράφουμε αναλυτικά τον προτεινόμενο αλγόριθμο πλειάδων και τη διαδικασία εφαρμογής του στο εξεταζόμενο πρότυπο. Αν ακολουθηθεί η λογική του σχηματισμού και αναστροφής μιας κάθε φορά πλειάδας (αλγόριθμος τύπου Wolff), περιλαμβάνει σε κάθε βήμα τα ακόλουθα στάδια [104]:

1. Επιλέγουμε τυχαία μια spin- μαγνητική ροπή στο τριγωνικό πλέγμα.
2. Εξετάζουμε καθένα από τα έξι γειτονικά τρίγωνα με κορυφή την παραπάνω spin- μαγνητική ροπή. Προσθέτουμε καθένα από αυτά στην υπό σχηματισμό πλειάδα με πιθανότητα προσθήκης $P_{\text{add}}(\mathbf{E}_{ijk})$, όπου $\mathbf{E}_{ijk} = -\mathbf{J}\sigma_i\sigma_j\sigma_k$ είναι η ενέργεια της τριπλής αλληλεπίδρασης των εξεταζόμενων μαγνητικών ροπών, η οποία προφανώς μπορεί να πάρει μόνο τις τιμές $\pm \mathbf{J}$. Η ακριβής τιμή της πιθανότητας αυτής θα υπολογιστεί στη συνέχεια. Αν πάντως απορριφθεί η προσθήκη και των έξι εξεταζόμενων τριγώνων τότε αναστρέφουμε μόνο την αρχικά επιλεγμένη spin- μαγνητική ροπή και η διαδικασία τερματίζεται.
3. Διατρέχουμε ένα- ένα τα προστιθέμενα τρίγωνα. Για κάθε νέα spin- μαγνητική ροπή που προστέθηκε στην πλειάδα στο προηγούμενο στάδιο εξετάζουμε εκ νέου τα έξι γειτονικά τρίγωνα που την έχουν ως κορυφή τους για να τα εντάξουμε στην πλειάδα με πιθανότητα προσθήκης $P_{\text{add}}(\mathbf{E}_{ijk})$, όπου $\mathbf{E}_{ijk}$ είναι η ενέργεια αλληλεπίδρασης της αντίστοιχης τριάδας μαγνητικών ροπών, όπως είδαμε παραπάνω. Ένα θέμα που χρήζει ιδιαίτερης προσοχής είναι ότι ενώ στους αλγορίθμους πλειάδων που εργάζονται ανά σημείο, κάθε spin-μαγνητική ροπή μπορεί να εξεταστεί για προσθήκη όσες φορές απαιτηθεί, εδώ τα τρίγωνα που έχουν εξεταστεί για προσθήκη σε προηγούμενο βήμα και έχουν

απορριφθεί δεν επανεξετάζονται. Κάθε τρίγωνο δηλαδή ελέγχεται για προσθήκη στην πλειάδα μόνο μια φορά. Ωστόσο, μια spin- μαγνητική ροπή μπορεί να επανεξεταστεί για ένταξη ως κορυφή διαφορετικών τριγώνων. Σε κάθε περίπτωση η ανάπτυξη της πλειάδας τερματίζεται όταν δεν υπάρχουν πλέον spin- μαγνητικές ροπές που να αποτελούν κορυφές τριγώνων επιτρεπόμενων να ενταχθούν σε αυτήν.

4. Παρατηρούμε ότι το αρχικό τριγωνικό πλέγμα T μπορεί να διαιρεθεί σε τρία επίσης τριγωνικά ισοδύναμα υποπλέγματα L_{T1} , L_{T2} και L_{T3} . Από τη συνένωση δυο οποιωνδήποτε από τα παραπάνω υποπλέγματα προκύπτει ένα πλέγμα- κηρήθρα L_H το οποίο είναι δυαδικό (dual) με το παραμένον τριγωνικό πλέγμα [48]. Επιλέγουμε με πιθανότητα $\frac{1}{3}$ ένα από τα τρία υποπλέγματα και από τα spin της πλειάδας αναστρέφουμε εκείνα που ανήκουν στα άλλα δύο. Έπειτα η διαδικασία ξεκινά από την αρχή (επόμενο βήμα).

Παραπάνω υιοθετήθηκε η προσέγγιση μιας πλειάδας ανά βήμα, δηλαδή ο αλγόριθμος τύπου Wolff [81]. Αυτός ο τύπος χρησιμοποιήθηκε και στη συντριπτική πλειοψηφία των προσομοιώσεων της παρούσας εργασίας με αλγορίθμους πλειάδων. Στην περίπτωση που ακολουθηθεί η λογική των πολλαπλών πλειάδων (αλγόριθμος τύπου Swendsen-Wang [80]) τότε δημιουργούμε σε κάθε βήμα πολλές πλειάδες, ακολουθώντας τα στάδια 1- 3 ενώ στο 4^ο βήμα επιλέγουμε αν αναστρέψουμε τα spin που ανήκουν στο εκάστοτε επιλεγμένο πλέγμα- κηρήθρα L_H και σε καθεμιά από τις πλειάδες με πιθανότητα $\frac{1}{2}$. Η προσέγγιση αυτή δείχνει πιο δύσκολη και χρονοβόρα, ωστόσο, όπως θα δούμε, μπορεί να είναι αποτελεσματικότερη για το πρότυπο Baxter-Wu [48], ιδιαίτερα σε παράλληλα υπολογιστικά συστήματα [16].

Φυσικά, κάθε αλγόριθμος Monte Carlo αποτελεί μια διαδικασία Markov [16] η οποία θα πρέπει να υπακούει σε δυο βασικές αρχές, τις οποίες συζητήσαμε στην §4.1, της εργοδικότητας ή προσβασιμότητας και της μικροαντιστρεψιμότητας ή λεπτομερούς ισορροπίας (4.11). Είναι προφανές ότι έτσι όπως διατυπώθηκε ο προαναφερθείς αλγόριθμος υπακούει εξ ορισμού στην πρώτη συνθήκη για κάθε λογική επιλογή των πιθανοτήτων προσθήκης $P_{\text{add}}(-J)$, αφού μπορούν να δημιουργηθούν πλειάδες με μια μονάχα spin- μαγνητική ροπή. Έτσι, αναστρέφοντας κατάλληλες συλλογές πλειάδων μπορούμε να οδηγηθούμε από κάθε μικροκατάσταση σε οποιαδήποτε άλλη με πεπερασμένο αριθμό βημάτων.

Ο έλεγχος της συνθήκης λεπτομερούς ισορροπίας, η οποία εξασφαλίζει ότι όταν το προσομοιούμενο σύστημα φτάσει σε κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας θα προκύπτουν ορθές κατανομές πιθανοτήτων, στην περιπτώσή μας τύπου Boltzmann, απαιτεί περισσότερη δουλειά [104]. Καταρχήν όλες οι δυνατές τριπλέτες μεταξύ spin- μαγνητικών ροπών στο τριγωνικό πλέγμα που

έχουν ελεγχθεί για προσθήκη στη σχηματιζόμενη πλειάδα και έχουν απορροφηθεί μπορούν να διακριθούν στις ακόλουθες κατηγορίες:

1. Τριπλέτες μεταξύ spin- μαγνητικών ροπών με ενέργεια $-J$ που δεν εντάχθηκαν στην πλειάδα και η ενέργειά τους παραμένει αμετάβλητη μετά την αναστροφή της. Ο αριθμός τους θα παριστάνεται με m_A .
2. Τριπλέτες μεταξύ spin- μαγνητικών ροπών με ενέργεια $-J$ που δεν εντάχθηκαν στην πλειάδα και η ενέργειά τους γίνεται $+J$ μετά την αναστροφή της. Ο αριθμός τους θα παριστάνεται με m_B .
3. Τριπλέτες μεταξύ spin- μαγνητικών ροπών με ενέργεια $+J$ που δεν εντάχθηκαν στην πλειάδα και η ενέργειά τους παραμένει αμετάβλητη μετά την αναστροφή της. Ο αριθμός τους θα παριστάνεται με n_A .
4. Τριπλέτες μεταξύ spin- μαγνητικών ροπών με ενέργεια $+J$ που δεν εντάχθηκαν στην πλειάδα και η ενέργειά τους γίνεται $-J$ μετά την αναστροφή της. Ο αριθμός τους θα παριστάνεται με n_B .

Στις ίδιες κατηγορίες μπορούμε να διακρίνουμε και τις τριπλέτες που ελέχθηκαν και εντάχθηκαν στη σχηματιζόμενη πλειάδα (και οι τρεις αλληλεπιδρώσες spin-μαγνητικές ροπές ανήκουν στη σχηματιζόμενη πλειάδα), οπότε οι αντίστοιχοι αριθμοί συμβολίζονται με m_{A0} , m_{B0} , n_{A0} , n_{B0} .

Στη συνέχεια θεωρούμε μια μικροκατάσταση μ ως την κατάσταση του πλέγματος πριν την αναστροφή της σχηματιζόμενης πλειάδας και μια μικροκατάσταση ν ως την κατάσταση που προκύπτει μετά την αναστροφή της. Η πιθανότητα επιλογής $p(\mu \rightarrow \nu)$ είναι ίση με την πιθανότητα να μην ενταχθούν στην πλειάδα τα παραπάνω εξεταζόμενα τρίγωνα, δηλαδή

$$p(\mu \rightarrow \nu) = [1 - P_{\text{add}}(J)]^{n_A + n_B} [1 - P_{\text{add}}(-J)]^{m_A + m_B} \quad (6.1).$$

Από την άλλη, για την πιθανότητα επιλογής $p(\mu \rightarrow \nu)$, θα έχουμε μια εναλλαγή μεταξύ των m_B και n_B τριπλετών spin. Έτσι η αντίστοιχη σχέση θα γράφεται

$$p(\nu \rightarrow \mu) = [1 - P_{\text{add}}(J)]^{n_A + m_B} [1 - P_{\text{add}}(-J)]^{m_A + n_B} \quad (6.2).$$

Όσο για την ενεργειακή μεταβολή που προκαλείται κατά την αναστροφή της πλειάδας, αυτή θα ισούται με

$$\Delta E_{\mu\nu} = E_\nu - E_\mu = 2Jm_B - 2Jn_B \quad (6.3).$$

Έτσι η εξίσωση λεπτομερούς ισορροπίας (4.11) για την οποία συζητήσαμε εκτενώς στην §4.1 θα γράφεται

$$\frac{[1 - P_{\text{add}}(\mathbf{J})]^{n_A + n_B} [1 - P_{\text{add}}(-\mathbf{J})]^{m_A + m_B} A(\mu \rightarrow \nu)}{[1 - P_{\text{add}}(\mathbf{J})]^{n_A + m_B} [1 - P_{\text{add}}(-\mathbf{J})]^{m_A + n_B} A(\nu \rightarrow \mu)} = e^{2\beta \mathbf{J}(n_B - m_B)} \quad (6.4),$$

από όπου τελικά προκύπτει

$$\frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = \left[e^{2\beta \mathbf{J} \frac{1 - P_{\text{add}}(-\mathbf{J})}{1 - P_{\text{add}}(\mathbf{J})}} \right]^{n_B - m_B} \quad (6.5).$$

Οποιαδήποτε επιλογή των λόγων αποδοχής $A(\mu \rightarrow \nu)$ και $A(\nu \rightarrow \mu)$ η οποία ικανοποιεί τη σχέση (6.5) θα ικανοποιεί και τη συνθήκη λεπτομερούς ισορροπίας. Αρκεί απλώς να επιλέξουμε την πιθανότητα P_{add} να ενταχθεί ένα τρίγωνο στην πλειάδα έτσι ώστε να ικανοποιεί την εξίσωση

$$\frac{1 - P_{\text{add}}(-\mathbf{J})}{1 - P_{\text{add}}(\mathbf{J})} = e^{-2\beta \mathbf{J}} \quad (6.6),$$

οπότε θα μπορέσουμε να θεωρήσουμε και τους δυο ανωτέρω λόγους αποδοχής ίσους με τη μονάδα

$$A(\nu \rightarrow \mu) = A(\mu \rightarrow \nu) = 1 \quad (6.7).$$

Η απλούστερη επιλογή, η οποία και υιοθετήθηκε στην παρούσα εργασία είναι $P_{\text{add}}(-\mathbf{J}) = 1 - e^{-2\beta \mathbf{J}}$ και $P_{\text{add}}(\mathbf{J}) = 0$, οπότε προέκυψε αλγόριθμος τύπου Wolff [81]. Φυσικά, η επιλογή μας θα μπορούσε να είναι γενικότερη, δηλαδή τύπου Niedermayer [84].

Με σκοπό τη γενίκευση του ανωτέρω αλγορίθμου για την περίπτωση που υπάρχει εξωτερικό μαγνητικό πεδίο [16] θεωρούμε και πάλι δυο μικροκαταστάσεις μ και ν τέτοιες ώστε να μεταβαίνουμε από τη μια στην άλλη με απλή αναστροφή μιας πλειάδας και υποθέτουμε ότι η μαγνήτιση της πλειάδας πριν την αναστροφή της είναι $\mathbf{M}_{\text{cluster}}$, οπότε μετά την αναστροφή της θα γίνει $-\mathbf{M}_{\text{cluster}}$. Στην περίπτωση αυτή η κατάλληλη γενίκευση του τύπου της μεταβολής της ενέργειας (6.3) θα είναι

$$\Delta E_{\mu\nu} = E_\nu - E_\mu = 2\mathbf{J}(\mathbf{m}_B - \mathbf{n}_B) + 2\mathbf{H}\mathbf{M}_{\text{cluster}} \quad (6.8).$$

Αντικαθιστώντας στην (4.11) και εκτελώντας τις πράξεις βρίσκουμε ότι η εξίσωση (6.5) γράφεται ως εξής:

$$e^{2\beta J M_{cluster}} \frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = \left[\frac{1 - P_{add}(-J)}{1 - P_{add}(+J)} e^{-2\beta J} \right]^{n_B - m_B} \quad (6.9).$$

Ο απλούστερος τρόπος να ικανοποιηθεί η ανωτέρω εξίσωση είναι να επιλεγεί η πιθανότητα προσθήκης P_{add} όπως στην περίπτωση του απλού Wolff ή Niedermayer αλγορίθμου [16], δηλαδή έτσι ώστε το γινόμενο μέσα στην παρένθεση να κάνει μονάδα. Τότε το πηλίκο των λόγων αποδοχής τόσο για την αλλαγή $\mu \rightarrow \nu$ όσο και για την αντίστροφη $\nu \rightarrow \mu$ θα είναι $\exp(-2\beta H M_{cluster})$. Η πιο αποτελεσματική επιλογή λόγων αποδοχής έτσι ώστε να ικανοποιούνται οι ανωτέρω περιορισμοί είναι $A(\nu \rightarrow \mu) = 1$ και

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} \exp(-2\beta H M_{cluster}), & \text{αν } H M_{cluster} > 0 \\ 1, & \text{αν } H M_{cluster} \leq 0 \end{cases} \quad (6.10).$$

Παρατηρούμε ότι η εξίσωση (6.10) μεταπίπτει στην (6.7) όταν $H = 0$. Φυσικά, ο παραπάνω λόγος αποδοχής $A(\mu \rightarrow \nu)$ δεν είναι πάντα μονάδα, με συνέπεια ο αλγόριθμος πλειάδων να είναι λιγότερο αποτελεσματικός σε σχέση με την περίπτωση του μηδενικού εξωτερικού πεδίου. Έτσι, για αρκετά ασθενή εξωτερικά μαγνητικά πεδία είναι συχνά προτιμότερη η προεκβολή των αντίστοιχων αποτελεσμάτων για πεδίο $H = 0$ με τη χρήση της μεθόδου του μονού ιστογράμματος [16].

Στο σημείο εφιστούμε την προσοχή στο γεγονός ότι στο 4^ο βήμα τόσο του αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων όσο και του αλγορίθμου πλειάδων που εισήγαγαν οι Novotny και Evertz δεν είναι αναγκαία η αναστροφή μόνο των δυο τρίτων των spin- μαγνητικών ροπών της πλειάδας αλλά μπορεί να αναστραφεί ένα οποιοδήποτε μέρος αυτών ή ακόμα και ολόκληρη. Στην περίπτωση αυτή όμως, εφόσον αναφερόμαστε στον αλγόριθμο τριγώνων πλειάδων, για να εξακολουθεί να ισχύει $A(\nu \rightarrow \mu) = 1$, $P_{add}(-J) = 1 - e^{-2\beta J}$ και $P_{add}(J) = 0$ θα πρέπει, όπως προκύπτει μετά από τις σχετικές πράξεις,

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} \exp[-2\beta J(m_{B0} - n_{B0})\sigma_0 - 2\beta J(m_B - n_B)], & \text{αν } (m_{B0} - n_{B0})\sigma_0 - (m_B - n_B) > 0 \\ 1, & \text{αν } (m_{B0} - n_{B0})\sigma_0 - (m_B - n_B) \leq 0 \end{cases} \quad (6.11),$$

όπου $\sigma_0 = \pm 1$ είναι η τιμή της αρχικής spin- μαγνητικής ροπής από την οποία ξεκινά ο σχηματισμός της πλειάδας. Ομοίως, στην περίπτωση του αλγορίθμου πλειάδων που εισήγαγαν οι Novotny και Evertz [87] η ανωτέρω προσέγγιση οδηγεί αντίστοιχα

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} \exp[-2\beta J(m_2 - n_2) - 2\beta J(m_{20} - m_{02} + n_{02} - n_{20})], \\ \text{αν } (m_2 - n_2) - (m_{20} - m_{02} + n_{02} - n_{20}) > 0 \\ 1, \text{αν } (m_2 - n_2) - (m_{20} - m_{02} + n_{02} - n_{20}) \leq 0 \end{cases} \quad (6.12).$$

Θυμίζουμε ότι οι σχηματιζόμενοι δεσμοί μεταξύ δυο spin- μαγνητικών ροπών μπορούν να διακριθούν στις ακόλουθες κατηγορίες:

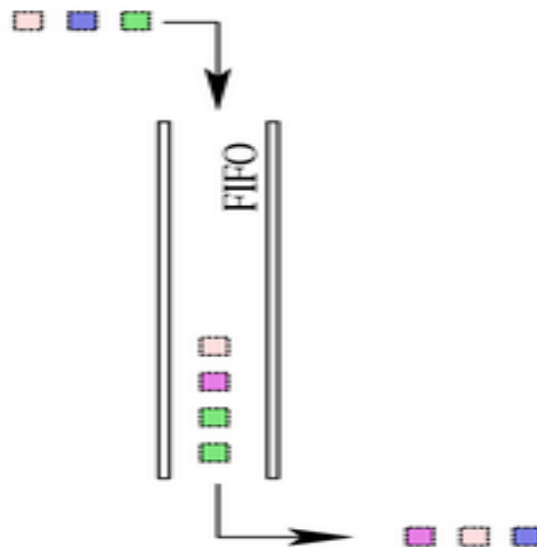
1. δεσμοί με ενέργεια $+2J$ που δεν ανήκουν στην πλειάδα και αποκτούν ενέργεια $-2J$ μετά την αναστροφή της. Ο αριθμός τους θα παριστάνεται με n_1 .
2. δεσμοί με ενέργεια $-2J$ που δεν ανήκουν στην πλειάδα και αποκτούν ενέργεια $+2J$ μετά την αναστροφή της. Ο αριθμός τους θα παριστάνεται με m_1 .
3. δεσμοί με ενέργεια $+2J$ που δεν ανήκουν στην πλειάδα και αποκτούν ενέργεια μηδέν μετά την αναστροφή της. Ο αριθμός τους θα παριστάνεται με n_{10} .
4. δεσμοί με ενέργεια $-2J$ που δεν ανήκουν στην πλειάδα και αποκτούν ενέργεια μηδέν μετά την αναστροφή της. Ο αριθμός τους θα παριστάνεται με m_{10} .
5. δεσμοί με ενέργεια μηδέν που δεν ανήκουν στην πλειάδα και αποκτούν ενέργεια $+2J$ μετά την αναστροφή της. Ο αριθμός τους θα παριστάνεται με n_{01} .
6. δεσμοί με ενέργεια μηδέν που δεν ανήκουν στην πλειάδα και αποκτούν ενέργεια $-2J$ μετά την αναστροφή της. Ο αριθμός τους θα παριστάνεται με m_{01} .

Στις ίδιες κατηγορίες μπορούμε να διακρίνουμε και τους δεσμούς που ανήκουν στην πλειάδα (και οι δυο συνδεδεμένες spin- μαγνητικές ροπές ανήκουν στη σχηματιζόμενη πλειάδα), οπότε οι αντίστοιχοι αριθμοί συμβολίζονται με $n_2, m_2, m_{10}, n_{20}, m_{02}, n_{02}$. Οι δεσμοί που δεν αλλάζουν πρόσημο κατά την αναστροφή της πλειάδας δε συμμετέχουν στη μεταβολή της ενέργειας ούτε στο πηλίκιο των λόγων αποδοχής, συνεπώς μπορούν να παραλειφθούν. Σε κάθε περίπτωση πάντως η υλοποίηση των τελευταίων δυο παραλλαγών αλγορίθμων πλειάδων είναι εξαιρετικά επίπονη προγραμματιστικά, ενώ τα προγράμματα που προκύπτουν είναι όχι μόνο περίπλοκα αλλά και πολύ χρονοβόρα, χωρίς να προσφέρουν ουσιαστική βελτίωση των τελικών αποτελεσμάτων, όπως θα δούμε στη συνέχεια.

Για την υλοποίηση των παραπάνω αλγορίθμων σε μορφή προγράμματος για ηλεκτρονικό υπολογιστή χρησιμοποιείται για τη μετάβαση από μια spin- μαγνητική ροπή σε μια άλλη μια δομή δεδομένων γνωστή με το όνομα First in/First out (FIFO) προσωρινή μνήμη (buffer) ή ουρά (queue- ([16], [98])). Στην επιστήμη των ηλεκτρονικών υπολογιστών είναι μια δομή δεδομένων με τη μορφή παρατεταμένης συλλογής. Η βασική λειτουργικότητα είναι η εισαγωγή

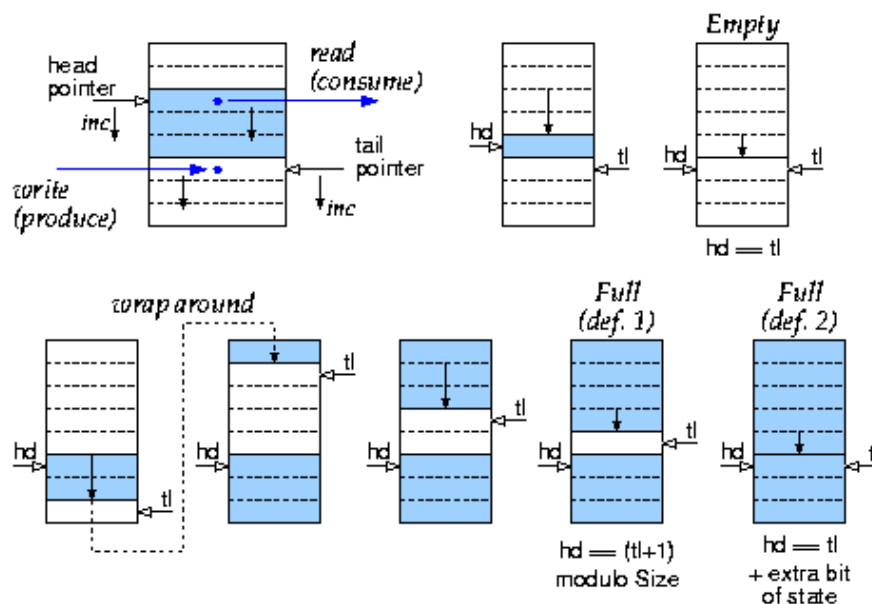
στοιχείων αποκλειστικά στην πίσω θέση και η εξαγωγή- διαγραφή στοιχείων μόνο από την μπροστινή θέση. Με αυτόν τον τρόπο, η ουρά είναι μια FIFO (First-In-First-Out), δηλαδή Πρώτο-Μέσα-Πρώτο-Έξω, δομή δεδομένων, όπου το πρώτο στοιχείο που εισάγεται στην ουρά θα είναι το πρώτο που θα αφαιρεθεί-εξυπηρετηθεί (βλέπε διάγραμμα 6.1). Οι ουρές χρησιμοποιούνται στον προγραμματισμό υπολογιστών ως δομές δεδομένων. Είναι ο αφηρημένος τύπος δεδομένων μιας ουράς αναμονής στην καθημερινή ζωή, π.χ. μια ουρά εξυπηρέτησης πελατών σε ένα ταμείο. Ένα παράδειγμα χρήσης των ουρών είναι στην λειτουργία της προσωρινής μνήμης ή buffer. Άλλες συνήθεις χρήσεις των ουρών είναι σε κυκλικές προσωρινές μνήμες (circular buffering), όπως στην περίπτωση μας, και στις διασυνδεδεμένες λίστες (βλέπε διάγραμμα 6.2).

First-in First-out (FIFO)



Διάγραμμα 6.1: Πρώτο-Μέσα-Πρώτο-Έξω προσωρινή μνήμη (First in/First out- FIFO buffer) ή ουρά (queue).

Reminder: Circular Array Implementation of FIFO Queue



Διάγραμμα 6.2: Κυκλική προσωρινή μνήμη (circular buffering).

Θεωρητικά, ένα χαρακτηριστικό της ουράς είναι ότι δεν έχει συγκεκριμένο μέγεθος. Ασχέτως από το πόσα στοιχεία περιέχονται ήδη, ένα νέο στοιχείο μπορεί πάντα να εισαχθεί. Στην περίπτωση που η ουρά είναι άδεια δεν μπορεί να γίνει εξαγωγή “dequeue” στοιχείου πριν εισαχθεί κάποιο νέο. Μια πρακτική υλοποίηση ουράς γίνεται συνήθως με δείκτες στην οποία το όριο μεγέθους περιορίζεται από την διαθέσιμη μνήμη που έχει ο υπολογιστής. Ένα άλλος τρόπος υλοποίησης της ουράς είναι σε μια δομή δεδομένων σε σταθερό μέγεθος εκχωρημένης μνήμης. Ο όρος υπερχείλιση μιας ουράς (queue overflow) συμβαίνει κατά την προσπάθεια να εισαχθεί ένα στοιχείο σε μια γεμάτη ουρά, ενώ η υποχείλιση (underflow) συμβαίνει κατά την προσπάθεια διαγραφής- εξαγωγής ενός στοιχείου από μια άδεια ουρά. Το τμήμα του κώδικα που υλοποιεί το πρόγραμμα του αλγορίθμου των πλειάδων τριγώνων στη βέλτιστη εκδοχή του, όπως και η προσέγγισή μας στον αλγόριθμο πλειάδων των Novotny-Evertz, σε γλώσσα προγραμματισμού FORTRAN 2003/2008 [98] παρατίθεται στο παράρτημα . Σε αυτά είναι εμφανής η χρήση χαρακτηριστικών του δομημένου και του αντικειμενοστρεφούς προγραμματισμού, όπως δεικτών (pointers), δομών (structures) και κλάσεων (classes).

Ένα σημείο που σύμφωνα με όσα είπαμε στην §4.8 αλλά και τη σχετική βιβλιογραφία ([16], [101], [102]) έχει ιδιαίτερη σημασία είναι τα συστηματικά σφάλματα από το συνδυασμό ενός συγκεκριμένου αλγορίθμου και της γεννήτριας τυχαίων αριθμών που χρησιμοποιείται κατά την υλοποίησή του. Με στόχο να εξασφαλίσουμε την αποφυγή τους, ελέγξαμε πολλές φορές το σχετικό

πρόγραμμα με διαφορετική κάθε φορά γεννήτρια τυχαίων αριθμών. Μάλιστα, χρησιμοποιήσαμε για το σκοπό αυτόν πολλές σύγχρονες και γρήγορες γεννήτριες τυχαίων αριθμών ([16], [99], [100]), όπως οι σειριακές *ran2* (a linear congruential generator improved by a shuffling scheme ή αλλιώς μια γραμμική συμβατική γεννήτρια βελτιωμένη με ένα πρόγραμμα ανακατέματος), *ran3* (a subtractive lagged Fibonacci generator ή αλλιώς μια αργή αφαιρετική γεννήτρια τύπου Fibonacci) ([16], [99]) και *ran* (συνδυασμός μετατόπισης καταχωρητών τύπου Marsaglia) [100], όπως επίσης και την παράλληλη γεννήτρια τυχαίων αριθμών *ran2*, η οποία σύμφωνα με το πασίγνωστο βιβλίο του Press και των συνεργατών του [100], συνδυάζει τρεις διαφορετικές γεννήτριες τυχαίων αριθμών, μια αφαιρετική γεννήτρια τύπου Fibonacci, μια γεννήτρια σειριακής μετατόπισης τύπου Marsaglia και μια γραμμική συμβατική γεννήτρια. Όλες οι προαναφερθείσες έχουν μεγάλες περιόδους, μεταξύ 2^{32} - 2^{55} , γεγονός που τις καθιστά ικανοποιητικές, τουλάχιστον για τις ανάγκες των προσομοιώσεών μας. Επιπλέον, κατά το συνδυασμό τους με τον αλγόριθμό μας δεν παρουσιάστηκαν συστηματικά σφάλματα του τύπου που έχει αναφερθεί στη σχετική βιβλιογραφία ([101], [102], [105]). Πάντως, για τις περισσότερες προσομοιώσεις αυτής της ενότητας αλλά και των επόμενων εφαρμόστηκε η παράλληλη γεννήτρια τυχαίων αριθμών *ran2* [100] διότι συνδυάζει ικανοποιητικά μεγάλη περίοδο με την ευκολία εφαρμογής της σε παράλληλα προγράμματα.

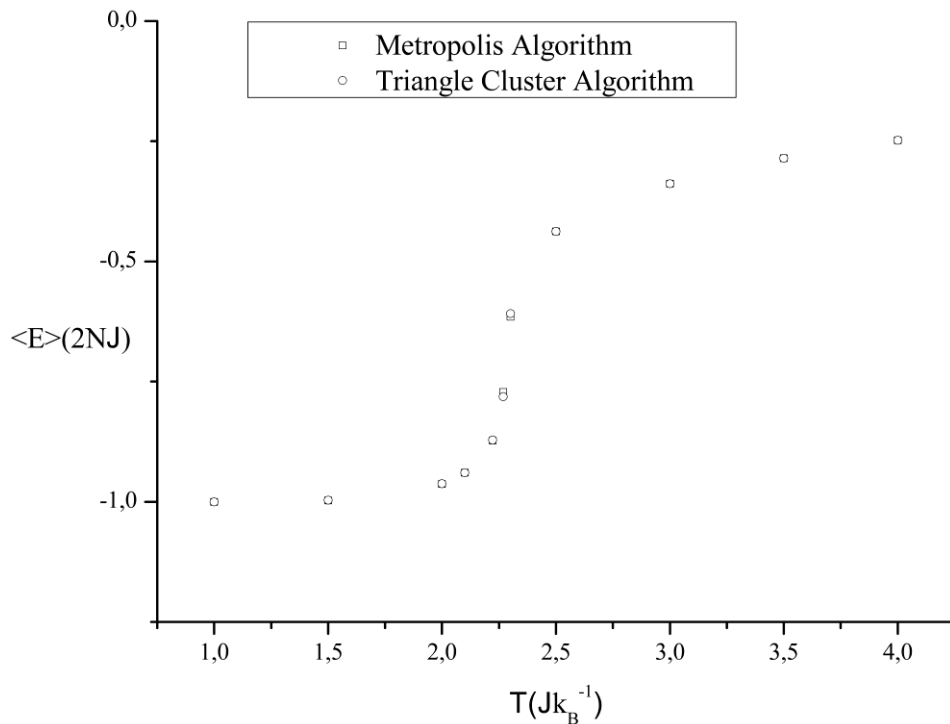
6.2 Έλεγχος του αλγορίθμου

Σε αυτήν την ενότητα παρουσιάζουμε εκτενώς στοιχεία που συνηγορούν υπέρ της ορθότητας του προγράμματος μέσω του οποίου υλοποιείται ο αλγόριθμος πλειάδων τριγώνων (βλέπε και παράρτημα Β για το διάγραμμα ροής του), ο οποίος περιγράφηκε στην αμέσως προηγούμενη. Ένα πρώτο σχετικό βήμα είναι η προσομοίωση πλεγμάτων Baxter-Wu 30×33 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες [16] για ένα μεγάλο εύρος θερμοκρασιών υπό μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Σημειώνουμε ότι, όπως και στις προηγούμενες ενότητες, όταν αναφερόμαστε στο πλεγματοτικό μέγεθος L ενός πλέγματος Baxter-Wu εννοούμε ένα πλέγμα $L \times (L+3)$. Επιπλέον, με N θα συμβολίζουμε το πλήθος των πλεγματοτικών σημείων ή spin- μαγνητικών ροπών του συστήματος και θα ισχύει στην περίπτωση μας

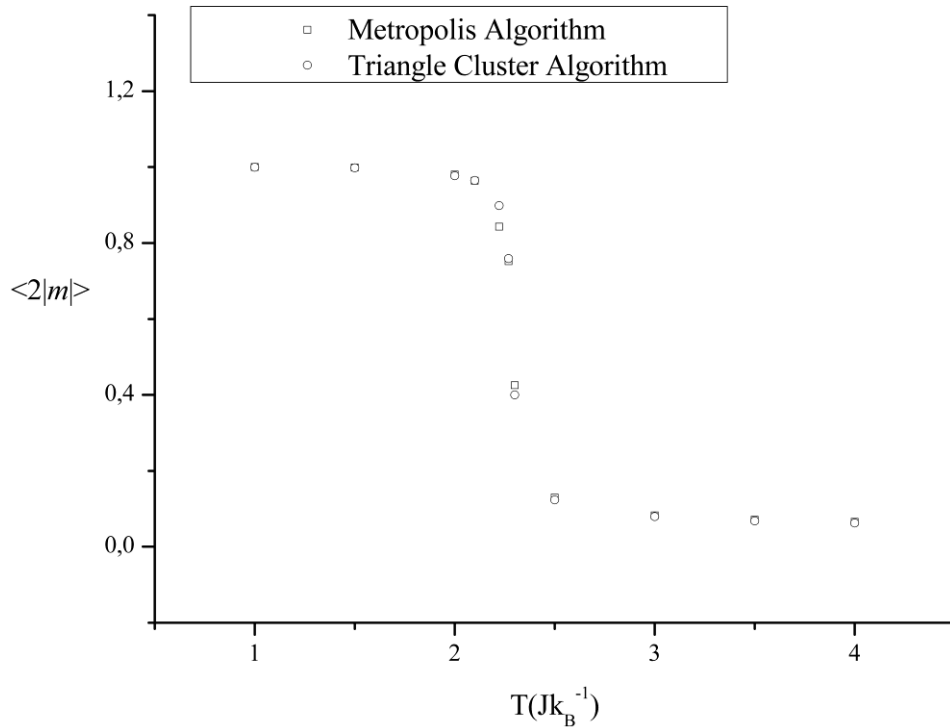
$$N = L(L+3) \quad (6.13).$$

Έχουμε ήδη εξηγήσει ότι αποφεύγουμε τη χρήση $L \times L$ πλεγμάτων διότι το ολικό σχήμα που προκύπτει είναι ρόμβος, ο οποίος έχει διαφορετικές συμμετρίες από το άπειρο πλέγμα [16]. Για κάθε θερμοκρασία χρησιμοποιούμε 10^7 σαρώσεις Metropolis Monte Carlo (Monte Carlo Sweeps ή MCS) ανά πλεγματοτική θέση για να επιτύχουμε κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας και 10^8 βήματα Cluster Monte Carlo (Cluster Monte Carlo Steps) για την εκτέλεση του κύριου μέρους της προσομοίωσης.

Αρχικά υπολογίζουμε και παριστάνουμε γραφικά (βλέπε Διάγραμμα 6.3) τη μέση τιμή της ενέργειας ανά δεσμό σε συνάρτηση με την απόλυτη θερμοκρασία και συγκρίνουμε τα σχετικά αποτελέσματα με αντίστοιχα που έχουν ληφθεί με τον κλασσικό αλγόριθμο Metropolis σειριακής σάρωσης. Παρατηρούμε ότι οι αντίστοιχες τιμές πρακτικά ταυτίζονται, ιδίως αν συνυπολογιστούν και τα σχετικά στατιστικά σφάλματα. Παρόμοια είναι η συμπεριφορά που παρατηρούμε αν εργαστούμε με μέσες τιμές μαγνητικών μεγεθών σε συνάρτηση με τη θερμοκρασία, όπως π. χ. στη γραφική παράσταση που φαίνεται στο διάγραμμα 6.4. Η ταύτιση στα πλαίσια του στατιστικού σφάλματος των αποτελεσμάτων του αλγορίθμου Metropolis και εκείνου των πλειάδων τριγώνων αποτελεί μια πρώτη ένδειξη της ορθής λειτουργίας του σχετικού προγράμματος, πλην όμως δεν θεωρείται αρκετή ώστε να κριθεί αυτό κατάλληλο για συστηματικούς υπολογισμούς.

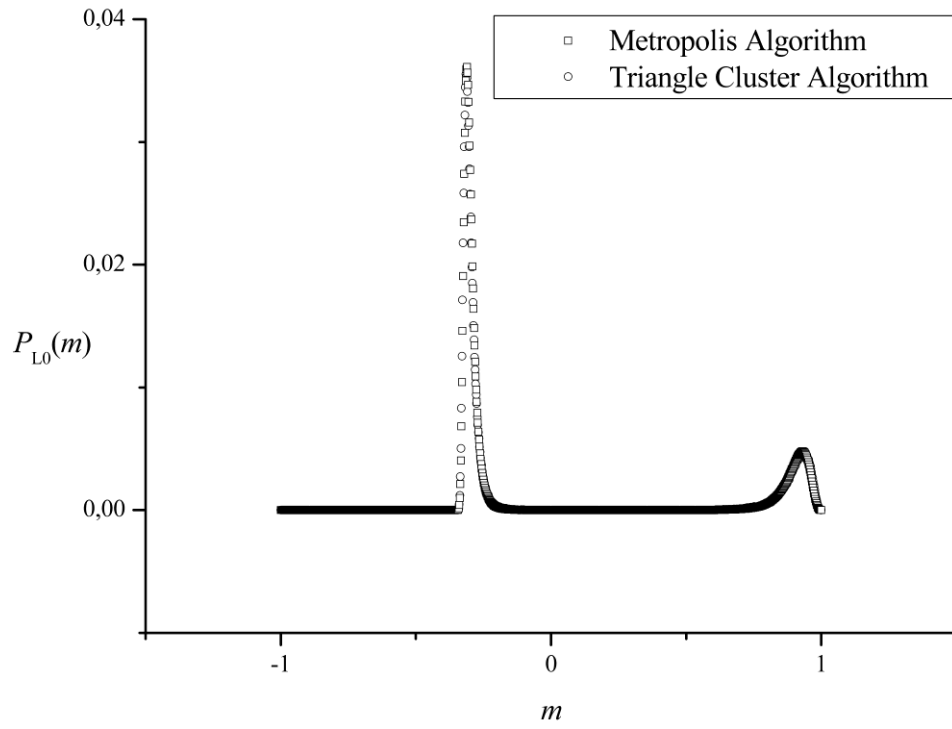


Διάγραμμα 6.3: Διαγράμματα $\langle E \rangle = f(T)$ για ένα 30×33 πλέγμα Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες για $H = 0$, όπως προέκυψαν με τον αλγόριθμο Metropolis σειριακής σάρωσης και τον αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων.

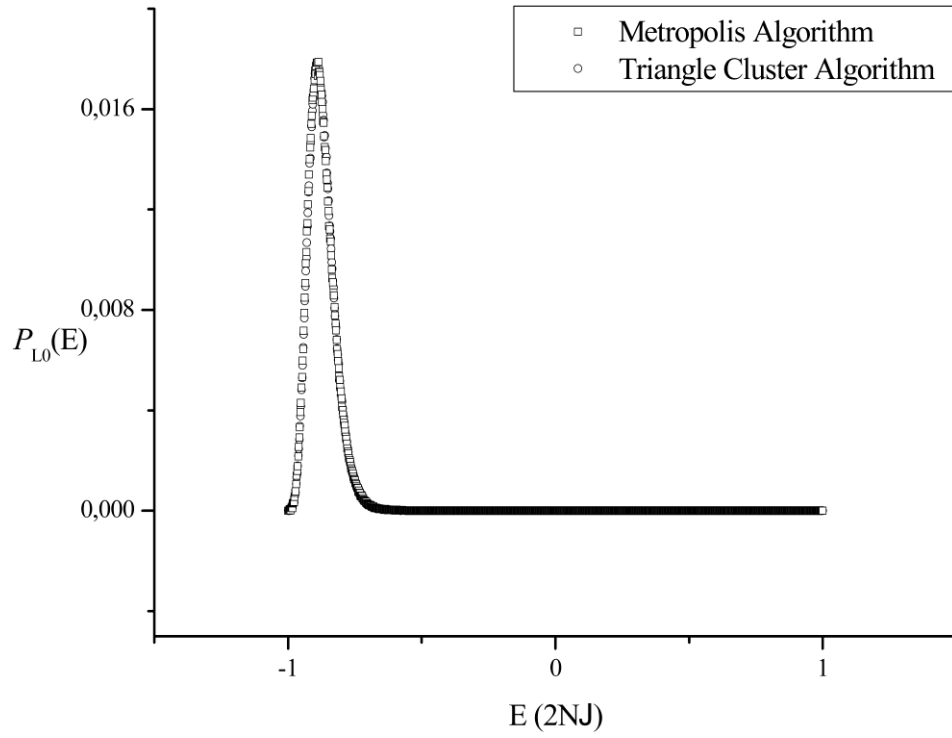


Διάγραμμα 6.4: Διαγράμματα $\langle 2|m| \rangle = f(T)$ για ένα 30×33 πλέγμα Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες για $H = 0$, όπως προέκυψαν με τον αλγόριθμο Metropolis σειριακής σάρωσης και τον αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων.

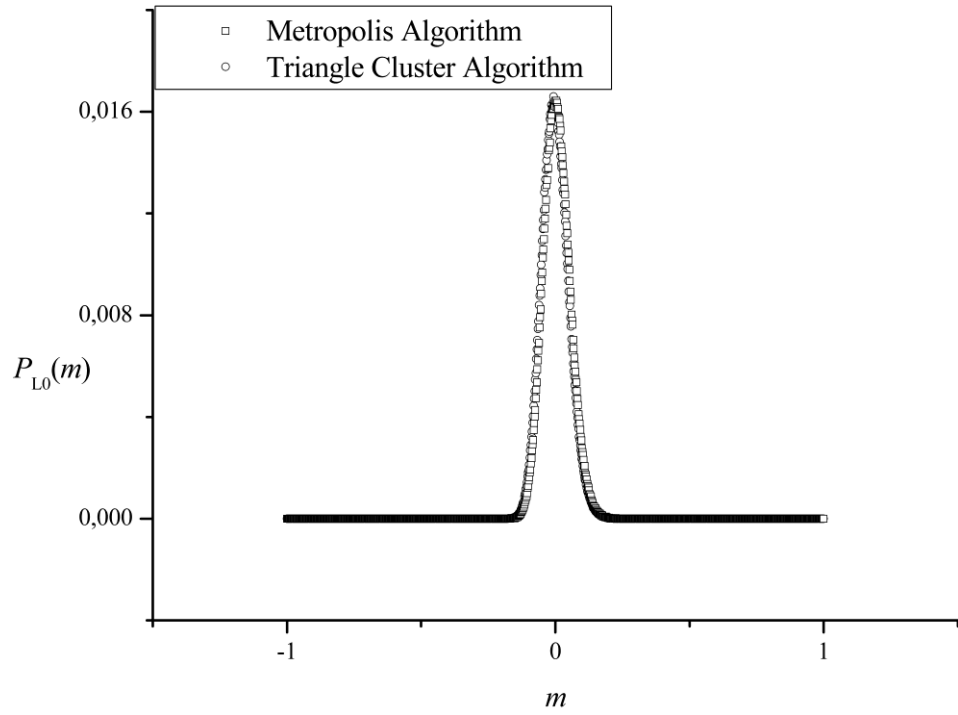
Με σκοπό να έχουμε μια λεπτομερέστερη εικόνας της συμπεριφοράς του νέου αλγορίθμου εξετάζουμε τις κατανομές της συνολικής μαγνητικής ροπής ανά πλεγματικό σημείο $P_{L0}(m)$ και της ενέργειας ανά δεσμό $P_{L0}(E)$ όπως προκύπτουν από το νέο αλγόριθμο των πλειάδων τριγώνων για τρεις διαφορετικές θερμοκρασίες υπό μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Οποσδήποτε επιβάλλεται μια από αυτές να είναι η κρίσιμη θερμοκρασία (3.7), αφού στη συνέχεια της εργασίας θα μας απασχολήσει ιδιαίτερα η συμπεριφορά του προτύπου σε αυτήν. Οι άλλες δύο είναι η $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ και $\frac{k_B T}{J} = 3,000$, με τις οποίες είχαμε εργαστεί και στην ενότητα 5.2. Επιλέχθηκαν έτσι ώστε η μια να είναι σημαντικά μεγαλύτερη ενώ η άλλη σημαντικά μικρότερη της κρίσιμης. Οι παραπάνω κατανομές παριστάνονται κάθε φορά στο ίδιο διάγραμμα με τις αντίστοιχες που προκύπτουν από τον απλό αλγόριθμο Metropolis σειριακής σάρωσης (βλέπε διαγράμματα 6.5- 6.12).



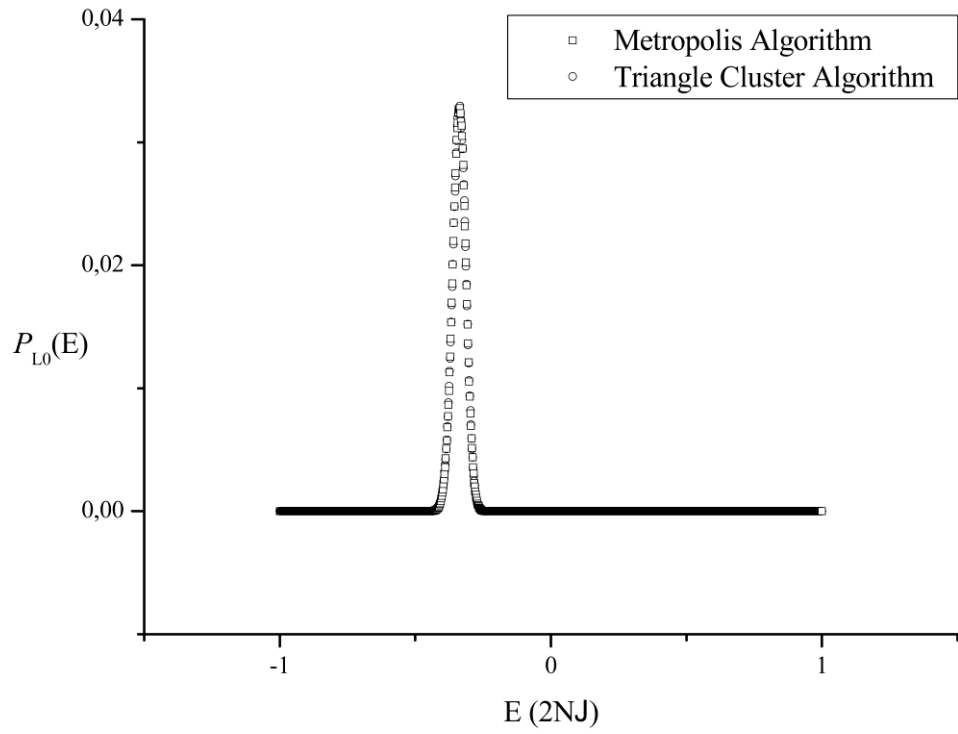
Διάγραμμα 6.5: Γραφικές παραστάσεις $P_{L0} = f(m)$ στο μοντέλο Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες για $L = 30$, $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ και $H = 0$, όπως προκύπτουν από τα αποτελέσματα του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης και του αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων.



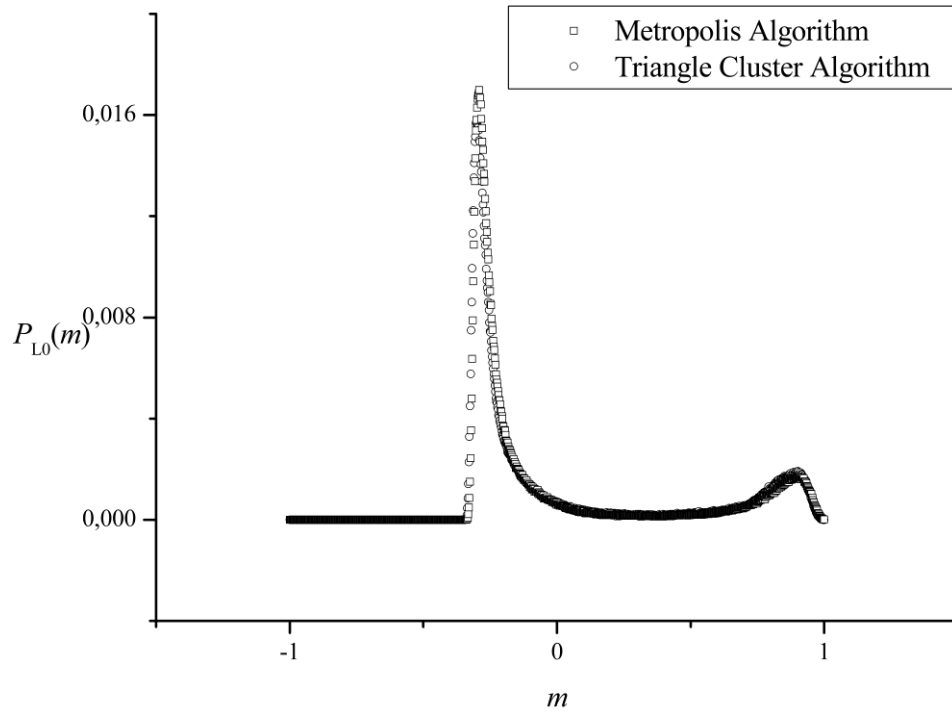
Διάγραμμα 6.6: Γραφικές παραστάσεις $P_{L0} = f(E)$ με περιοδικές συνοριακές συνθήκες στο μοντέλο Baxter-Wu για $L = 30$, $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ και $H = 0$, όπως προκύπτουν από τα αποτελέσματα του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης και του αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων.



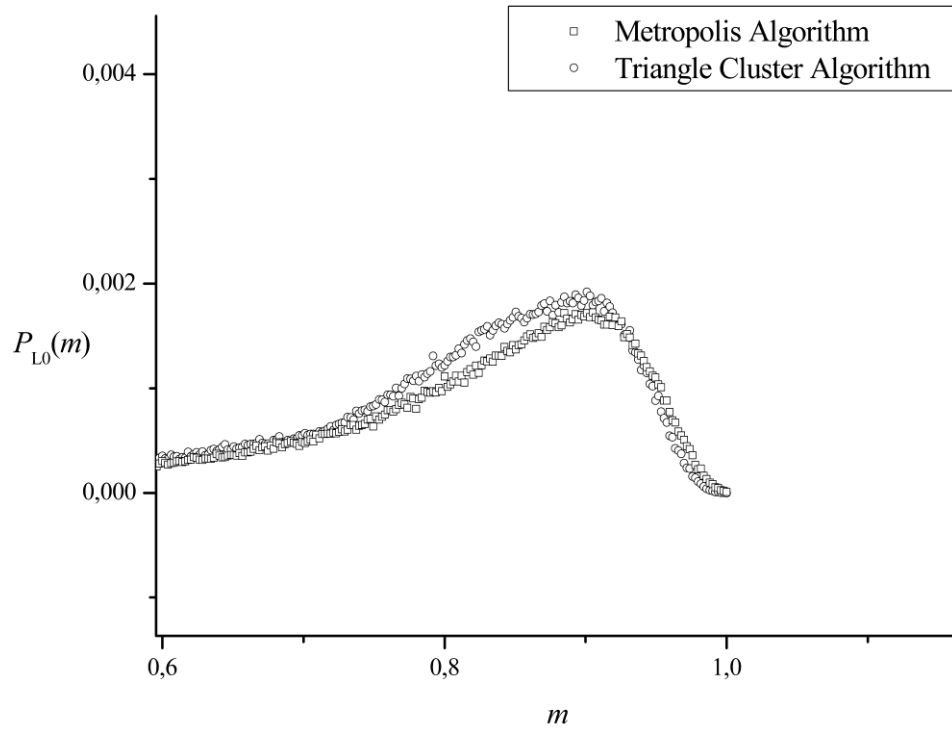
Διάγραμμα 6.7: Γραφικές παραστάσεις $P_{L0} = f(m)$ στο μοντέλο Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες για $L = 30$, $\frac{k_B T}{J} = 3,000$ και $H = 0$, όπως προκύπτουν από τα αποτελέσματα του αλγορίθμου Metropolis σειριακής σάρωσης και του αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων.



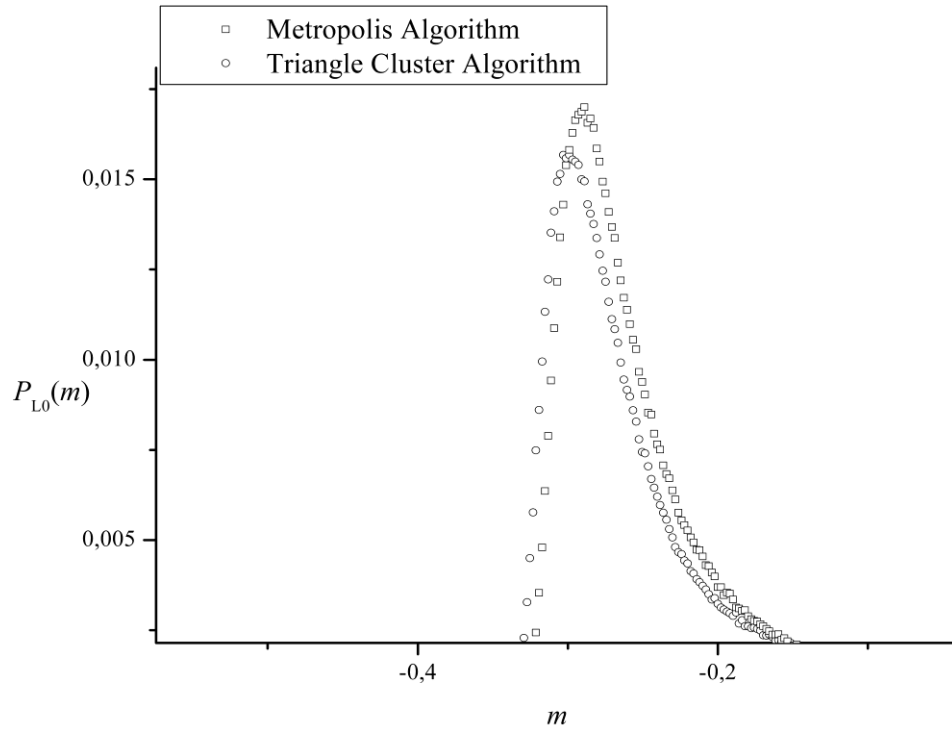
Διάγραμμα 6.8: Γραφικές παραστάσεις $P_{L0} = f(E)$ στο μοντέλο Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες για $L = 30$, $\frac{k_B T}{J} = 3,000$ και $H = 0$, όπως προκύπτουν από τα αποτελέσματα του αλγορίθμου Metropolis σειριακής σάρωσης και του αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων.



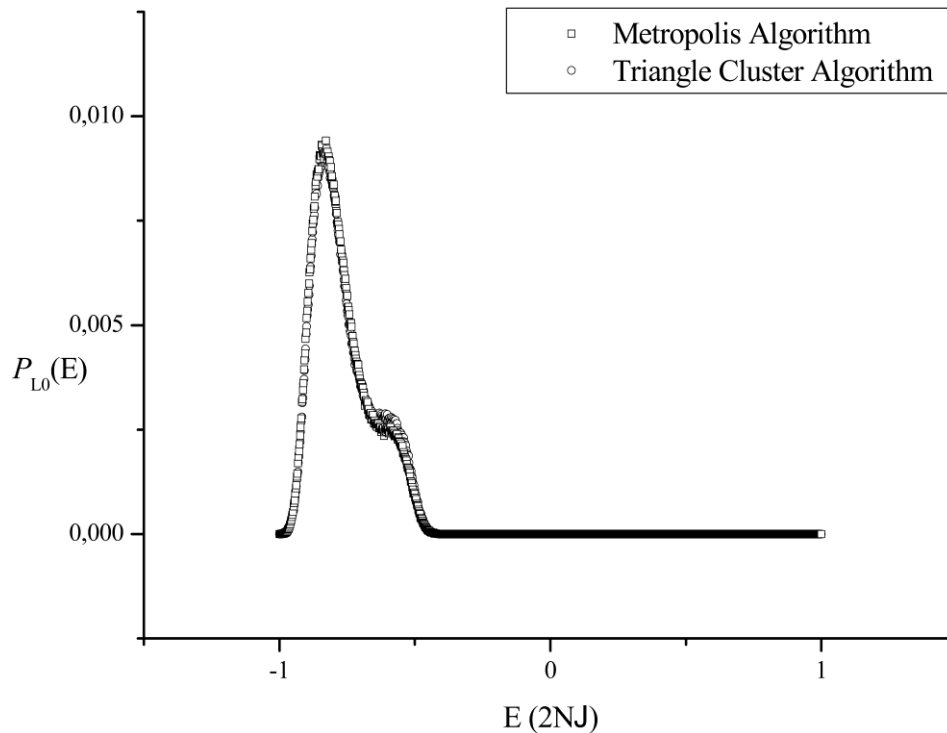
Διάγραμμα 6.9: Γραφικές παραστάσεις $P_{L0} = f(m)$ στο μοντέλο Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες για $L = 30$, $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και $H = 0$, όπως προκύπτουν από τα αποτελέσματα του αλγορίθμου Metropolis σειριακής σάρωσης και του αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων.



Διάγραμμα 6.10: Γραφικές παραστάσεις $P_{L0} = f(m)$ (δεξιός ή σιδηρομαγνητικός λοβός) στο μοντέλο Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες για $L = 30$, $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και $H = 0$, όπως προκύπτουν από τα αποτελέσματα του αλγορίθμου Metropolis σειριακής σάρωσης και του αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων.



Διάγραμμα 6.11: Γραφικές παραστάσεις $P_{L0} = f(m)$ (αριστερός ή σιδηριμαγνητικός λοβός) στο μοντέλο Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες για $L = 30$, $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και $H = 0$, όπως προκύπτουν από τα αποτελέσματα του αλγορίθμου Metropolis σειριακής σάρωσης και του αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων.



Διάγραμμα 6.12: Γραφικές παραστάσεις $P_{L0} = f(E)$ στο μοντέλο Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες για $L = 30$, $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και $H = 0$, όπως προκύπτουν από τα αποτελέσματα του αλγορίθμου Metropolis σειριακής σάρωσης και του αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων.

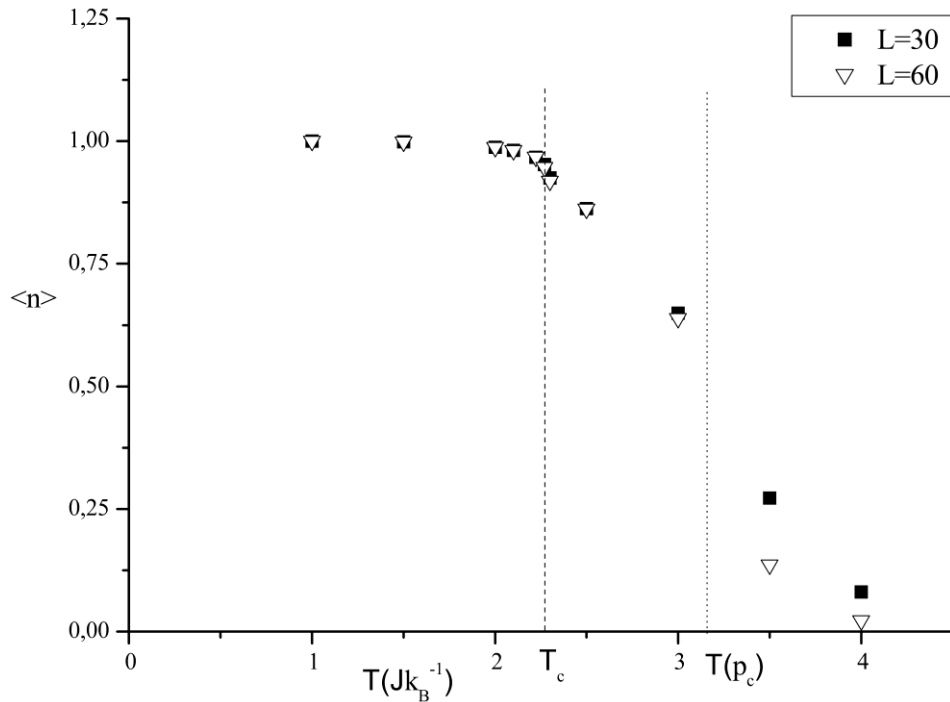
Στα παραπάνω διαγράμματα είναι προφανής η ταύτιση των αποτελεσμάτων των δυο αλγορίθμων στα πλαίσια του στατιστικού σφάλματος, τουλάχιστο για το δοσμένο 30×33 πλέγμα με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Η ταύτιση αυτή είναι ιδιαίτερα εμφανής για θερμοκρασίες μεγαλύτερες ή ίσες της κρίσιμης, όπως φαίνεται και από τα διαγράμματα 6.7- 6.12 και ιδίως από τα λεπτομερέστερα 6.10- 6.11, γεγονός που θα σχολιαστεί ιδιαίτερα στη συνέχεια. Παρόμοια αποτελέσματα προέκυψαν και για πλέγματα 15×18 και 45×48 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Μπορούμε λοιπόν με σχετική ασφάλεια να συμπεράνουμε ότι ο νέος αλγόριθμος μπορεί να δώσει επιστημονικά ορθά αποτελέσματα και ότι το πρόγραμμα που τον υλοποιεί είναι εκσφαλματωμένο. Το ερώτημα που φυσιολογικά ανακύπτει σε αυτό το σημείο είναι αν ο νέος αλγόριθμος είναι όντως αποτελεσματικότερος τόσο σε σχέση με τον αλγόριθμο Metropolis όσο και με τον ήδη υπάρχοντα αλγόριθμο πλειάδων των Novotny και Evertz. Με αυτό ακριβώς το ζήτημα θα ασχοληθούμε στην επόμενη ενότητα.

6.3 Αξιολόγηση του αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων- υπολογισμός του δυναμικού κρίσιμου εκθέτη

Σε αυτήν την ενότητα μελετάμε τα χαρακτηριστικά του νέου αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων ώστε να φανεί αν είναι περισσότερο αποδοτικός σε σχέση με

άλλους ευρύτερα χρησιμοποιούμενους αλγορίθμους, όπως εκείνος Metropolis, τουλάχιστο στο κρίσιμο σημείο. Από τη σχετική βιβλιογραφία [16] γνωρίζουμε ότι το κύριο χαρακτηριστικό ενός αλγορίθμου, το οποίο περιγράφει την αποτελεσματικότητά του στην κρίσιμη περιοχή, είναι ο λεγόμενος «δυναμικός κρίσιμος εκθέτης» z . Προτού όμως προχωρήσουμε στην εκτίμηση του παραπάνω εκθέτη για τον προτεινόμενο αλγόριθμο στην κρίσιμη περιοχή θα εξετάσουμε ένα άλλο χαρακτηριστικό ενός αλγορίθμου πλειάδων. Αυτό είναι το μέσο μέγεθος μιας δημιουργούμενης πλειάδας για διάφορες θερμοκρασίες. Για το σκοπό αυτόν προσομοιώνουμε πλέγματα Baxter-Wu 30×33 και 60×63 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες [16] απουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου για μεγάλο εύρος θερμοκρασιών. Για κάθε θερμοκρασία χρησιμοποιούμε 10^7 σαρώσεις Metropolis Monte Carlo (Monte Carlo Sweeps ή MCS) ανά πλεγματοκή θέση για να φτάσουμε στην κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας και 10^8 βήματα Cluster Monte Carlo (Cluster Monte Carlo Steps) για την εκτέλεση του κύριου μέρους της προσομοίωσης.

Τα αποτελέσματα της παραπάνω διαδικασίας φαίνονται στο διάγραμμα 6.13. Όπως αναμενόταν, σε χαμηλές θερμοκρασίες, κάτω από την κρίσιμη, η πλειάδα γίνεται percolating [106], δηλαδή καταλαμβάνει ολόκληρο το διαθέσιμο πλέγμα. Αντίθετα, σε υψηλές θερμοκρασίες πάνω από την κρίσιμη μεταπίπτει σε ανεξάρτητες spin- μαγνητικές ροπές. Αξιοσημείωτο είναι το γεγονός ότι στην κρίσιμη θερμοκρασία το μέσο μέγεθος της πλειάδας είναι ελάχιστα μικρότερο από το μέγεθος ολόκληρου του πλέγματος ενώ το κατώφλι διαφυγής (percolation threshold), δηλαδή το σημείο στο οποίο αποδομείται η πλειάδα, βρίσκεται σε θερμοκρασία εμφανώς υψηλότερη από την κρίσιμη. Από αυτήν την άποψη το πρότυπο Baxter-Wu διαφέρει από το Ising, όπου το αντίστοιχο κατώφλι συμπίπτει με το κρίσιμο σημείο [16]. Τονίζουμε ότι παρόμοια συμπεριφορά παρατηρείται και για τον αλγόριθμο πλειάδων των Novotny και Evertz ([45], [87]). Το γεγονός αυτό, όπως θα δούμε, επηρεάζει την αποτελεσματικότητα του αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων όπως και άλλων παρόμοιων, ιδίως αν εφαρμοστεί για τον προσδιορισμό της κρίσιμης θερμοκρασίας μέσω του κατωφλίου διαφυγής (invaded cluster algorithm [86]) ή για τον προσδιορισμό φυσικών μεγεθών συναρτήσει της θερμοκρασίας καθώς και των αντίστοιχων κρίσιμων εκθετών. Επίσης, ενδέχεται να επηρεάζει με κάποιον τρόπο και τις τιμές του δυναμικού κρίσιμου εκθέτη z . Από την άλλη, το παραπάνω μειονέκτημα δε θα είναι εμφανές όταν εργαστούμε για φυσικά μεγέθη μεταβαλλόμενα συναρτήσει του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, μόνο που στις αντίστοιχες προσομοιώσεις θα χρειαστεί να αξιοποιήσουμε τις πιο γενικευμένες σχέσεις (6.8), (6.9) και (6.10).



Διάγραμμα 6.13: Μέση τιμή του λόγου του μεγέθους της πλειάδας (cluster) προς το μέγεθος του συνολικού πλέγματος συναρτήσει της θερμοκρασίας για $L = 30$ και $L = 60$. Στο παρόν διάγραμμα T_c είναι η κρίσιμη θερμοκρασία και $T(p_c)$ είναι η θερμοκρασία που αντιστοιχεί στο κατώφλι διαφυγής p_c . Βλέπουμε ότι και πάνω από την κρίσιμη θερμοκρασία το μέγεθος των σχηματιζόμενων πλειάδων παραμένει μεγάλο.

Στο σημείο αυτό καθίσταται αναγκαίος ο πλήρης ορισμός του χρόνου συσχέτισης (correlation time) τ_{cor} της προσομοίωσης ([16], [107]). Αυτός εκφράζει, όπως είδαμε στο κεφάλαιο 5, πόσο γρήγορα το προσομοιούμενο σύστημα μεταβαίνει από μια μικροκατάσταση ισορροπίας σε μια άλλη σημαντικά διαφορετική, με άλλα λόγια ποιο πρέπει να είναι το χρονικό διάστημα που θα περάσει ώστε δυο αποτελέσματα προσομοιώσεων να είναι πραγματικά ανεξάρτητα. Ο πλήρης μαθηματικός ορισμός του μεγέθους αυτού [16] γίνεται με τη βοήθεια των χρονικά μετατοπισμένων συναρτήσεων αυτοσυσχέτισης (time- displaced autocorrelation functions). Ως γνωστόν, κάθε αλγόριθμος προσομοίωσης ενός συστήματος δίνει επιτυχημένες εκτιμήσεις ενός φυσικού μεγέθους, π.χ. της μαγνήτισης, αφού πρώτα το σύστημα βρεθεί σε κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας. Έστω $m(t)$ μια τέτοια εκτίμηση τη «χρονική στιγμή» t . Εδώ, λέγοντας «χρονική στιγμή» εννοούμε το πλήθος των βημάτων προσομοίωσης κατά τη διάρκεια εφαρμογής του αλγορίθμου, ενώ τι ακριβώς σημαίνει «βήμα προσομοίωσης» εξαρτάται από το είδος του αλγορίθμου που εφαρμόζουμε. Εξαιτίας της μη ανεξαρτησίας των επιτυχημένων εκτιμήσεων ενός φυσικού μεγέθους που δίνει ο εκάστοτε χρησιμοποιούμενος αλγόριθμος, υπάρχει συσχέτιση μεταξύ δυο τέτοιων εκτιμήσεων οι οποίες ελήφθησαν με μια χρονική απόσταση t . Ονομάζουμε λοιπόν χρονικά μετατοπισμένη συνάρτηση αυτοσυσχέτισης (time- displaced autocorrelation function ή απλά autocorrelation function) το ακόλουθο μέγεθος [16]:

$$\chi(t) = \langle (m(t') - \langle m \rangle)(m(t' + t) - \langle m \rangle) \rangle = \langle m(t')m(t' + t) \rangle - \langle m \rangle^2 \quad (6.14).$$

Οι παρενθέσεις- brackets δηλώνουν μέσες τιμές για τις «αρχικές χρονικές στιγμές» t' . Η αναμενόμενη εξάρτηση της συνάρτησης αυτοσυσχέτισης $\chi(t)$ από το χρόνο θα έχει τη μορφή:

$$\chi(t) \sim e^{-\frac{t}{\tau_{\text{cor}}}} \quad (6.15),$$

όπου τ_{cor} είναι ο χρόνος συχέτισης ή correlation time.

Εδώ πρέπει να γίνει λόγος για μια διαφορετική προσέγγιση του χρόνου συχέτισης, γνωστή και ως ολοκληρωμένος χρόνος συχέτισης (integrated correlation time) $\tau_{\text{cor-int}}$. Αυτός ορίζεται σύμφωνα με τη σχέση ([16], [107])

$$\tau_{\text{cor-int}} = \int_0^{+\infty} \frac{\chi(t)}{\chi(0)} dt \quad (6.16),$$

η οποία είναι ισοδύναμη με την (6.15), αν η τελευταία θεωρηθεί έγκυρη για οσοδήποτε χρόνο t . Το όνομά του δεν είναι το πλέον κατάλληλο, ωστόσο έχει επικρατήσει στη σχετική βιβλιογραφία. Η μορφή (6.16) έχει πολλά πλεονεκτήματα. Πρώτον, είναι συνήθως ευκολότερη η εφαρμογή της σε σχέση με την πραγματοποίηση εκθετικής προσαρμογής (fitting) στη χρονικά μετατοπισμένη συνάρτηση αυτοσυσχέτισης. Δεύτερον, ακόμα και όταν αυτή η προσαρμογή πραγματοποιείται, επηρεάζεται από την επιλογή του χρονικού διαστήματος για το οποίο την εφαρμόζουμε. Ειδικότερα, η συμπεριφορά της χρονικά μετατοπισμένης συνάρτησης αυτοσυσχέτισης για μεγάλους χρόνους κυριαρχείται από στατιστικό «θόρυβο», συνεπώς τα αντίστοιχα τμήματα πρέπει να εξαιρεθούν από τη διαδικασία προσαρμογής. Το ακριβές σημείο όμως πέρα από το οποίο επιλέγουμε να εξαιρέσουμε τα ζεύγη τιμών της συνάρτησης αυτοσυσχέτισης επηρεάζει τελικά και την τιμή του χρόνου συχέτισης τ_{cor} που υπολογίζουμε. Ο ολοκληρωμένος χρόνος αυτοσυσχέτισης είναι λιγότερο ευαίσθητος στο ποια δεδομένα αποκρίνονται. Η μαθηματική έκφραση (6.16) όμως ισχύει μόνο για μεγάλες τιμές του χρόνου t , οπότε, υποθέτοντας ότι αυτή είναι έγκυρη για οποιοδήποτε χρόνο εισάγουμε ένα απροδιόριστο σφάλμα στους υπολογισμούς μας. Από την άλλη μεριά, ο χρόνος συχέτισης που υπολογίζεται με απευθείας προσαρμογή έχει το ίδιο μειονέκτημα, εκτός αν αυτή περιοριστεί στο χρονικό διάστημα για το οποίο η εκθετική συμπεριφορά που περιγράφεται με τον τύπο (6.15) είναι με μεγάλη ακρίβεια σωστή. Συνήθως όμως, αυτή η περιοχή είναι άγνωστη, οπότε αρκετοί επιλέγουν τον υπολογισμό του ολοκληρωμένου χρόνου συχέτισης από την (6.16).

Με στόχο την απλοποίηση και την επιτάχυνση των σχετικών υπολογισμών, η (6.16) γράφεται ως εξής

$$\tau_{\text{cor-int}} = \frac{\tilde{\chi}(0)}{\chi(0)} \quad (6.18),$$

όπου

$$\tilde{\chi}(0) = \int_0^{+\infty} \chi(t) dt \quad (6.19)$$

και

$$\chi(0) = \langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 \quad (6.20).$$

είναι απλώς η διακύμανση της μαγνήτισης, η οποία είναι ανάλογη με την ισόθερμη μαγνητική επιδεκτικότητα. Ωστόσο ο τύπος αυτός δίνει αποτέλεσμα μηδέν εκτός αν η $\langle m \rangle$ υπολογιστεί για προσομοίωση Monte Carlo σημαντικά μεγαλύτερης χρονικής διάρκειας σε σχέση με την (6.19). Γενικότερα, αν και ο ολοκληρωμένος χρόνος συσχέτισης θα περιμέναμε να είναι περίπου ίσος με το χρόνο συσχέτισης που υπολογίζεται απευθείας από την (6.15), έχει παρατηρηθεί ([16], [107]) ότι συνήθως είναι καθαρά μικρότερος από αυτόν, ίσως λόγω της προηγούμενης παρατήρησης.

Κλείνοντας τα εισαγωγικά στοιχεία για το χρόνο συσχέτισης, σημειώνουμε ότι ο πλήρης ορισμός του γίνεται μέσω του τύπου [16]

$$\chi(t) = \sum_{i=1}^{+\infty} b_i \exp\left(-\frac{t}{\tau_i}\right) \quad (6.21),$$

ο οποίος προκύπτει από τη μαθηματική θεωρία των Πινάκων Markov (Markov Matrices), όπου b_i σταθεροί συντελεστές σχετιζόμενοι με αυτούς τους πίνακες. Η πλήρης ανάλυση της σχετικής θεωρίας ξεφεύγει από τους σκοπούς της παρούσας διατριβής. Πάντως, στην περίπτωση αυτή [16] ως χρόνος συσχέτισης τ_{cor} επιλέγεται η μεγαλύτερη από τις παραπάνω χρονικές σταθερές τ_i . Ωστόσο, μια τέτοια προσέγγιση, αν και έχει εφαρμοστεί στη διεθνή βιβλιογραφία [16], κρατώντας φυσικά τους δυο ή τρεις πρώτους όρους από το άθροισμα (6.21), δεν είναι ιδιαίτερα πρακτική για υπολογιστικές εφαρμογές, αφού συχνά εισάγει σημαντικά σφάλματα κατά την προσαρμογή (fitting). Έτσι, λαμβάνοντας υπόψη τόσο τα πλεονεκτήματα όσο και τα μειονεκτήματα καθενός από τους τρεις παραπάνω ορισμούς του χρόνου συσχέτισης, επιλέξαμε να εργαστούμε με το χρόνο συσχέτισης τ_{cor} που δίνεται από τον τύπο (6.15), επιδιώκοντας φυσικά να επιλέγουμε κάθε φορά την πλέον κατάλληλη περιοχή για την πραγματοποίηση της εκθετικής προσαρμογής (fitting).

Ο δυναμικός κρίσιμος εκθέτης z περιγράφει την απόκλιση του χρόνου συσχέτισης τ_{cor} στην κρίσιμη θερμοκρασία, η οποία εκφράζει με τη σειρά της το φαινόμενο της κρίσιμης επιβράδυνσης ή critical slowing down [16]. Η απόκλιση αυτή ακολουθεί το νόμο

$$\tau_{\text{cor}} \sim \xi^z \quad (6.22),$$

και επειδή το μήκος συσχέτισης ξ απειρίζεται σύμφωνα με τη σχέση

$$\xi \sim t^{-\nu} \quad (6.23),$$

όπου

$$t = \frac{T - T_c}{T_c} \quad (6.24),$$

είναι η ανηγμένη θερμοκρασία, ο αντίστοιχος νόμος δύναμης του χρόνου συσχέτισης θα είναι

$$\tau_{\text{cor}} \sim t^{-z\nu} \quad (6.25).$$

Από την άλλη, το μήκος συσχέτισης ξ ακολουθεί ξεκάθαρα τις προβλέψεις της θεωρίας κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους. Από αυτό μπορούμε να συμπεράνουμε μια αντίστοιχη εξάρτηση για το χρόνο συσχέτισης, η οποία θα είναι

$$\tau_{\text{cor}} \sim L^z \quad (6.26),$$

όπου L είναι το γραμμικό μέγεθος του πλέγματος. Τονίζουμε ότι ο δυναμικός κρίσιμος εκθέτης διαφέρει από τους κρίσιμους εκθέτες για τους οποίους έγινε λόγος στα κεφάλαια 1 και 2 γιατί για ένα συγκεκριμένο μοντέλο εξαρτάται μόνο από το χρησιμοποιούμενο αλγόριθμο και όχι από την Κλάση Παγκοσμιοτήτας στην οποία ανήκει το πρότυπο αυτό [16].

Στην πράξη, ο δυναμικός κρίσιμος εκθέτης z συνήθως προδιορίζεται από τη σχέση κλιμάκωσης (6.26). Οι χρόνοι μετρώνται, όπως είδαμε στο κεφάλαιο 5, σε βήματα προσομοίωσης Monte Carlo (Monte Carlo steps), όμως αυτό δεν είναι ασφαλές κριτήριο όταν πρέπει να συγκριθούν μεταξύ τους χρόνοι συσχέτισης διαφορετικών αλγορίθμων. Τώρα επιβάλλεται να αναλυθεί περισσότερο τι σημαίνει ο όρος «βήματα προσομοίωσης» [16]. Έτσι, στην περίπτωση του αλγορίθμου Metropolis οι χρόνοι μετρώνται συνήθως σε σαρώσεις Monte Carlo (Monte Carlo Sweeps). Σε έναν αλγόριθμο πλειάδων από την άλλη αυτοί οι χρόνοι θα μπορούσαν να μετρηθούν σε αναστροφές πλειάδων. Έστω ότι ο με αυτόν τον τρόπο μετρούμενος χρόνος συσχέτισης ονομάζεται σχετικός χρόνος

συσχέτισης (relative correlation time) και συμβολίζεται με τ_{rel} . Όμως ο σχετικός χρόνος συσχέτισης τ_{rel} δεν είναι κατάλληλος για να συγκριθεί με τους αντίστοιχους αλγορίθμων μονής αναστροφής spin γιατί σε κάθε βήμα του συγκεκριμένου αλγορίθμου αναστρέφεται μόνο ένα τμήμα του πλέγματος. Στην περίπτωση αλγορίθμων πλειάδων τύπου Wolff (single cluster) για το πρότυπο Ising αυτό το τμήμα είναι $\frac{\langle n \rangle}{L^d}$, όπου $\langle n \rangle$ είναι το μέσο μέγεθος των σχηματιζόμενων πλειάδων και d η διάσταση του πλέγματος (στην περίπτωσή μας δύο). Στο μοντέλο Baxter-Wu το αντίστοιχο αναστρεφόμενο τμήμα κάθε πλειάδας είναι ίσο με τα $\frac{2}{3}$ του συνολικού μεγέθους της. Έτσι, η ορθότερη έκφραση για το χρόνο συσχέτισης, συνυπολογίζοντας και το ότι εργαζόμαστε με πλέγματα $L \times (L+3)$, θα είναι η ακόλουθη

$$\tau = \tau_{\text{rel}} \frac{2 \langle n \rangle}{3L(L+3)} \quad (6.27).$$

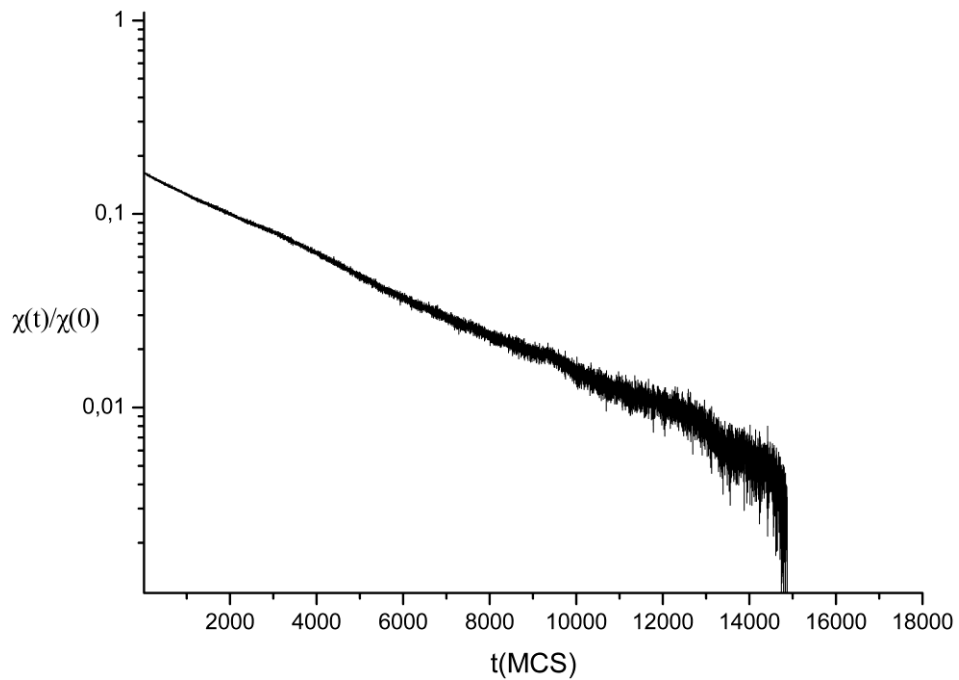
Η ανωτέρω επιλογή εξασφαλίζει την ισοδυναμία με το χρόνο συσχέτισης που υπολογίζεται από τον αλγόριθμο Metropolis σε θερμοκρασίες στην κρίσιμη περιοχή ή τουλάχιστον μικρότερες. Δε συμβαίνει το ίδιο για θερμοκρασίες σημαντικά υψηλότερες από την κρίσιμη, συνήθως όμως για τέτοιες περιοχές θερμοκρασιών δεν έχει νόημα η χρήση αλγορίθμων πλειάδων, αφού, όπως είδαμε και στο κεφάλαιο 4, εκεί αλγόριθμοι όπως Metropolis υπερτερούν ξεκάθαρα.

Φυσικά, γίνεται εύκολα κατανοητό ότι για κάθε διαφορετική φυσική ποσότητα, όπως η ενέργεια και η μαγνήτιση, μπορούμε να ορίσουμε έναν αντίστοιχο χρόνο συσχέτισης και έναν αντίστοιχο δυναμικό κρίσιμο εκθέτη. Αυτοί οι εκθέτες θα έχουν διαφορετικές τιμές μόνο αν τα μεγέθη στα οποία αναφέρονται είναι ορθογώνια μεταξύ τους στον αντίστοιχο διανυσματικό χώρο, με απλά λόγια είναι εντελώς ασυσχέτιστα [107]. Σε μια τέτοια περίπτωση, ως δυναμικό κρίσιμο εκθέτη του μελετούμενου συστήματος για κάποιον συγκεκριμένο αλγόριθμο θα θεωρούμε το μικρότερο από τους παραπάνω εκθέτες. Στη συνέχεια θα υπολογίσουμε τους κρίσιμους εκθέτες Z_m και Z_E για τη μαγνήτιση m και την ενέργεια E του προτύπου Baxter-Wu αντίστοιχα. Ο πρώτος υπολογίζεται μέσω της χρονικά μετατοπισμένης συνάρτησης αυτοσυσχέτισης για τη μαγνήτιση που δίνεται από τη σχέση (6.14), ενώ ο δεύτερος από τη χρονικά μετατοπισμένη συνάρτηση αυτοσυσχέτισης για την ενέργεια, η οποία προκύπτει από τον τύπο

$$\chi_E(t) = \langle (E(t') - \langle E \rangle)(E(t' + t) - \langle E \rangle) \rangle = \langle E(t')E(t' + t) \rangle - \langle E \rangle^2 \quad (6.28).$$

Οι τιμές τους αναμένεται να προκύψουν ίσες στα πλαίσια του στατιστικού σφάλματος γιατί η ενέργεια και η μαγνήτιση δεν είναι εντελώς ανεξάρτητες ποσότητες.

Με βάση τα παραπάνω, για να έχουμε μια εκτίμηση του δυναμικού κρίσιμου εκθέτη του αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων προσομοιώνουμε τριγωνικά πλέγματα Baxter-Wu διαστάσεων από 24×27 ως 102×105 στην ήδη επακριβώς γνωστή κρίσιμη θερμοκρασία με εξωτερικό μαγνητικό πεδίο μηδέν [29]. Για καθένα από αυτά τα πλέγματα υπολογίζουμε από τα αποτελέσματα των προσομοιώσεών μας τη χρονικά μετατοπισμένη συνάρτηση αυτοσυσχέτισης $\chi_m(t)$ για τη μαγνήτιση και κατασκευάζουμε ανεξάρτητα το γράφημά της συναρτήσει του χρόνου. Στη συνέχεια επανασχεδιάζουμε το παραπάνω διάγραμμα σε ημιλογαριθμική κλίμακα έτσι ώστε από την κλίση της ευθείας που θα προκύψει να υπολογιστεί ο χρόνος συσχέτισης τ_{cor} . Αυτή υπολογίζεται [16] με προσαρμολή εξίσωσης ευθείας στο ευθύ τμήμα του προαναφερθέντος διαγράμματος χρησιμοποιώντας τη μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων. Μάλιστα, η εξάρτηση της ποσότητας $\log \chi_m(t)$ με το χρόνο t είναι μεν γραμμική, αλλά όχι για μεγάλες τιμές του t , όπως είναι φανερό από διαγράμματα σαν το 6.14. Αυτό συμβαίνει γιατί το αρχικό στιγμιότυπο του χρόνου t' ξεκινά από κάποια πεπερασμένη τιμή t_{max} και όχι από το άπειρο, οπότε η εξίσωση (6.15) αναμένεται να ισχύει μόνο για $t \ll t_{max}$.

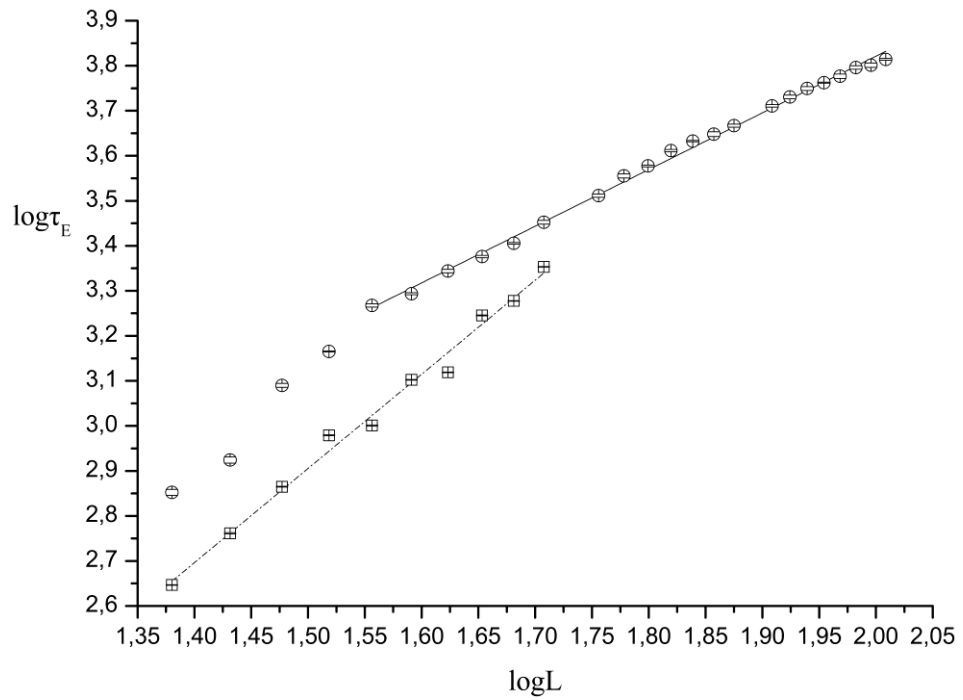


Διάγραμμα 6.14: Γραφική παράσταση της χρονικά μετατοπισμένης συνάρτησης αυτοσυσχέτισης της μαγνήτισης ως προς το χρόνο για ένα πλέγμα 36×39 στο κρίσιμο σημείο σε ημιλογαριθμικούς άξονες. Η γραμμικότητα του διαγράμματος αυτού φανερώνει την εκθετική εξάρτηση της συνάρτησης αυτοσυσχέτισης με το χρόνο.

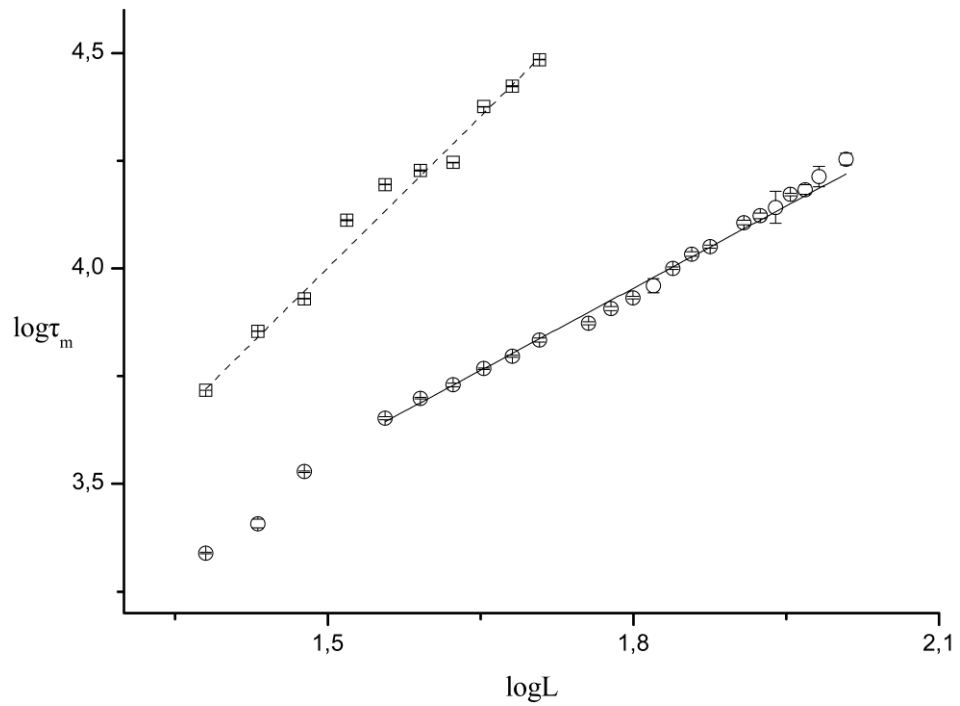
Η παραπάνω διαδικασία επαναλαμβάνεται και για τους υπολογισμούς των χρόνων συσχέτισης ως προς την ενέργεια. Μετά την ολοκλήρωση των παραπάνω για όλα τα πλέγματα παριστάνουμε γραφικά τους λογαρίθμους των χρόνων συσχέτισης ($\log \tau_{cor}$) με τους λογαρίθμους των αντίστοιχων πλεγματικών

μεγεθών ($\log L$), πράγμα που φαίνεται στο διάγραμμα 6.15. Οι δυναμικοί κρίσιμοι εκθέτες τόσο της μαγνήτισης όσο και της ενέργειας προσδιορίζονται από τις κλίσεις των παραπάνω διαγραμμάτων, τα οποία είναι με καλή προσέγγιση ευθείες, ενώ τα αντίστοιχα σφάλματα με τη μέθοδο των ελαχίστων τεττραγώνων. Έτσι, στο διάγραμμα 6.15 παριστάνεται γραφικά ο χρόνος συσχέτισης ως προς την ενέργεια (ανά δεσμό) ενώ στο διάγραμμα 6.16 ο αντίστοιχος χρόνος συσχέτισης ως προς τη μαγνήτιση (ανά πλεγματοειδές σημείο). Οι αντίστοιχοι κρίσιμοι εκθέτες για τον προτεινόμενο αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων προκύπτει πως είναι $z_m = 1,272 \pm 0,003$ και $z_E = 1,267 \pm 0,002$, δηλαδή έχουν την ίδια τιμή στα πλαίσια του στατιστικού σφάλματος, πράγμα άλλωστε αναμενόμενο [107]. Οι ίδιοι εκθέτες αν αναστρέφεται το σύνολο της πλειάδας και όχι μόνο τα $\frac{2}{3}$ της γίνονται $z_m = 1,8 \pm 0,1$ και $z_E = 1,7 \pm 0,2$, δείχνοντας την αναποτελεσματικότητα μιας τέτοιας επιλογής.

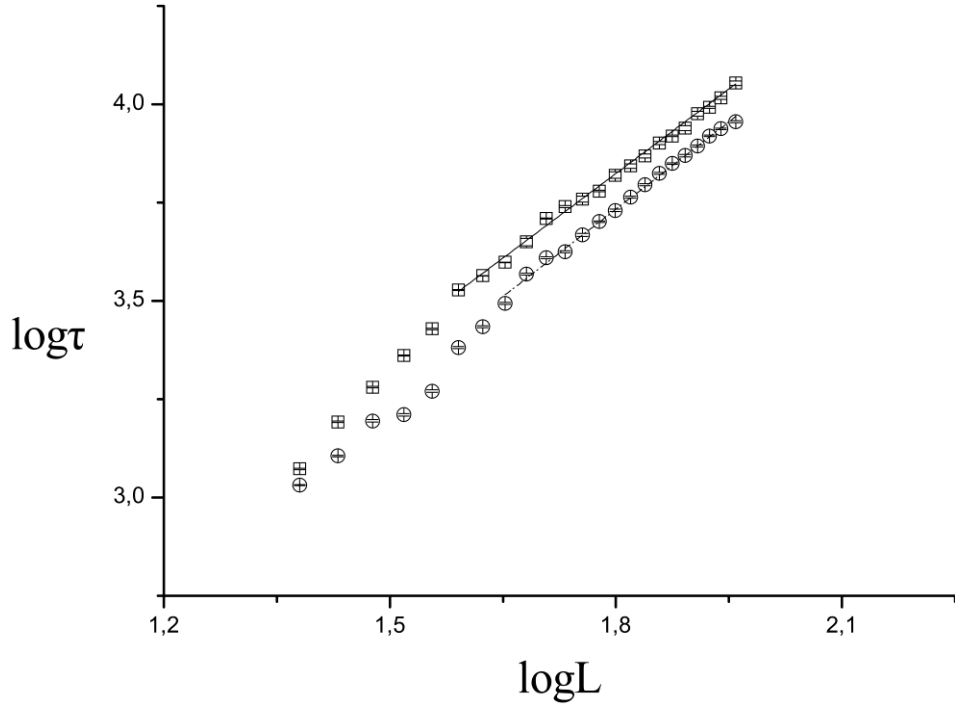
Φυσικά, η αξιολόγηση των αποτελεσμάτων μας επιβάλλει την επανάληψη της παραπάνω δουλειάς τόσο με ένα καλά γνωστό αλγόριθμο απλών αναστροφών spin όπως ο Metropolis όσο και με τον αλγόριθμο πλειάδων που πρότειναν οι Novotny και Evertz [87]. Για τον πρώτο μάλιστα χρησιμοποιήσαμε στις προσομοιώσεις μας 10^7 βήματα Monte Carlo για την ισορροπία και 10^8 βήματα Monte Carlo για την κυρίως προσομοίωση. Η συγκριτική αξιολόγηση των παραπάνω αλγορίθμων θα περιοριστεί στο επακριβώς γνωστό κρίσιμο σημείο για $H = 0$ [29], αφού μακριά από αυτό είναι βιβλιογραφικά τεκμηριωμένο [16] ότι οι αλγόριθμοι πλειάδων μειονεκτούν σημαντικά έναντι αλγορίθμων ανεξάρτητων αναστροφών spin όπως ο Metropolis. Μάλιστα, για τον αλγόριθμο Metropolis στο μοντέλο Baxter-Wu στο κρίσιμο σημείο βρήκαμε ότι $z_m = 2,30 \pm 0,11$, $z_E = 2,09 \pm 0,07$. Όσο για τον αλγόριθμο πλειάδων των Novotny και Evertz, υπολογίσαμε $z_m = 1,435 \pm 0,005$, $z_E = 1,481 \pm 0,007$, ενώ οι ίδιοι είχαν υπολογίσει τον κρίσιμο εκθέτη της μαγνήτισης $z_m \sim 1,37(10)$ [87]. Από αυτό συμπεραίνουμε ότι ο αλγόριθμος πλειάδων τριγώνων που προτείνουμε μειώνει το φαινόμενο της κρίσιμης επιβράδυνσης σημαντικά σε σχέση με εκείνον Metropolis ενώ φαίνεται πως είναι λίγο καλύτερος από τον αντίστοιχο των Novotny και Evertz. Το 2009 η ερευνητική ομάδα του Deng και των συνεργατών του [48] ανέφερε σε σχετική δημοσίευση ότι πέτυχε $z \approx 1,1$ εφαρμόζοντας τον αλγόριθμο πλειάδων των Novotny και Evertz με τη μέθοδο των πολλαπλών πλειάδων (Swendsen-Wang [80]). Παράλληλα, οι σχετικές προσομοιώσεις έδωσαν εξαιρετική ακρίβεια (τάξης 10^{-7}) στους υπολογισμούς ορισμένων φυσικών μεγεθών. Φαίνεται ότι, σε αντίθεση με το διδιάστατο μοντέλο Ising, στο πρότυπο Baxter-Wu η χρήση πολλαπλών πλειάδων είναι αποτελεσματικότερη, ενώ προσφέρεται για την περίπτωση παράλληλων υπολογιστικών συστημάτων [16].



Διάγραμμα 6.15: Χρόνος συσχέτισης για την ενέργεια τ_E σε συνάρτηση με το μέγεθος του πλέγματος L σε λογαριθμικό σύστημα αξόνων για τον αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων και τον αλγόριθμο Metropolis στο κρίσιμο σημείο. Στο διάγραμμα τα τετράγωνα αντιστοιχούν στα αποτελέσματα του αλγορίθμου Metropolis, οι κύκλοι στα αποτελέσματα του αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων ενώ η διακεκομμένη γραμμή και η συνεχής γραμμή στις αντίστοιχες προσρμοζόμενες ευθείες ελαχίστων τετραγώνων. Φυσικά προσομοιώσαμε όλα τα δυνατά πλέγματα Baxter-Wu από 24×27 μέχρι 102×105 στο κρίσιμο σημείο.



Διάγραμμα 6.16: Χρόνος συσχέτισης για τη μαγνήτιση τ_m σε συνάρτηση με το μέγεθος του πλέγματος L σε λογαριθμικό σύστημα αξόνων για τον αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων και τον αλγόριθμο Metropolis στο κρίσιμο σημείο. Στο διάγραμμα τα τετράγωνα αντιστοιχούν στα αποτελέσματα του αλγορίθμου Metropolis, οι κύκλοι στα αποτελέσματα του αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων ενώ η διακεκομμένη γραμμή και η συνεχής γραμμή στις αντίστοιχες προσρμοζόμενες ευθείες ελαχίστων τετραγώνων. Φυσικά προσομοιώσαμε όλα τα δυνατά πλέγματα Baxter-Wu από 24×27 μέχρι 102×105 στο κρίσιμο σημείο.



Διάγραμμα 6.17: Χρόνοι συσχέτισης για τη μαγνήτιση τ_m και την ενέργεια τ_E σε συνάρτηση με το μέγεθος του πλέγματος L σε λογαριθμικό σύστημα αξόνων για τον αλγόριθμο πλειάδων των Novotny και Evertz. Στο διάγραμμα τα τετράγωνα αντιστοιχούν στα αποτελέσματα για τη μαγνήτιση, οι κύκλοι σε εκείνα για την ενέργεια, ενώ η διακεκομμένη γραμμή και η συνεχής γραμμή στις αντίστοιχες προσαρμοζόμενες ευθείες ελαχίστων τετραγώνων. Φυσικά προσομοιώσαμε όλα τα δυνατά πλέγματα Baxter-Wu από 24×27 μέχρι 102×105 στο κρίσιμο σημείο.

Σε κάθε περίπτωση η μείωση του δυναμικού κρίσιμου εκθέτη με τη χρήση αλγορίθμων πλειάδων στο πρότυπο Baxter-Wu δε φαίνεται εξίσου αποτελεσματική με τον αλγόριθμο Wolff στο μοντέλο Ising, όπου έχει βρεθεί ότι στις δυο διαστάσεις $z \approx 0,25$ ([88], [103]). Το γεγονός αυτό πιθανώς σχετίζεται με τη θέση του κατωφλίου διαφυγής (percolation threshold), όπως περιγράφηκε παραπάνω, δηλαδή με το γεγονός ότι οι δημιουργούμενες πλειάδες είναι αρκετά μεγάλες και πάνω από την κρίσιμη θερμοκρασία, με συνέπειες στην αποτελεσματικότητα του αλγορίθμου. Επιπλέον, οι Li και Sokal απέδειξαν [107] ότι για κάθε αλγόριθμο ισχύει η ανισότητα

$$z \geq \frac{\alpha}{\nu} \quad (6.29).$$

Για την Κλάση Παγκοσμιότητας στην οποία ανήκει το πρότυπο Baxter-Wu, δηλαδή εκείνη των μοντέλων Potts 2- διαστάσεων και 4 καταστάσεων, έχουμε $\frac{\alpha}{\nu} = 1$ [29], ενώ αντίθετα στην κλάση Παγκοσμιότητας του διδιάστατου προτύπου Ising έχουμε $\alpha = 0$ [6]. Επομένως, τα αποτελέσματά μας για το δυναμικό κρίσιμο εκθέτη z κρίνονται μάλλον ικανοποιητικά, συνυπολογίζοντας

και τα αντίστοιχα βέλτιστα αποτελέσματα στο πρότυπο Ising για αλγορίθμους πλειάδων ([88], [103]).

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 7: ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ ΜΕ ΤΟΝ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟ ΠΛΕΙΑΔΩΝ ΤΡΙΓΩΝΩΝ ΣΤΟ ΚΡΙΣΙΜΟ ΣΗΜΕΙΟ ΑΠΟΥΣΙΑ ΕΞΩΤΕΡΙΚΟΥ ΜΑΓΝΗΤΙΚΟΥ ΠΕΔΙΟΥ

Στο κεφάλαιο αυτό εφαρμόζουμε τον αλγόριθμο που αναπτύξαμε, όπως περιγράφηκε στο κεφάλαιο 6, για τη μελέτη της συμπεριφοράς διαφόρων μεγεθών του προτύπου Baxter-Wu. Συγκεκριμένα, ασχολούμαστε με τη μαγνητική επιδεκτικότητα, την κατανομή της μαγνήτισης, τους σωρευτές Binder για τη μαγνήτιση, τη θερμοχωρητικότητα, την κατανομή της ενέργειας και το σωρευτή Binder για την ενέργεια ([22], [23], [24]). Σε ό, τι αφορά στους σωρευτές Binder για τη μαγνήτιση τα αποτελέσματά μας είναι εξ ολοκλήρου νέα. Όπως ήδη αναφέραμε, αλγόριθμοι όπως ο Metropolis δίνουν πολύ μεγάλα σφάλματα για τους σωρευτές αυτούς στην κρίσιμη θερμοκρασία. Αναφορικά τώρα με τα υπόλοιπα μεγέθη, δίνουμε βελτιωμένα αποτελέσματα σε σχέση με τα ήδη υπάρχοντα ενώ σε πολλές περιπτώσεις προτείνουμε σημαντικές διορθώσεις. Επιπλέον εισάγουμε μια φαινομενολογική θεωρία για την κρίσιμη κατανομή της ενέργειας, προτείνοντας έναν επιπλέον ενεργειακό στατιστικό σωρευτή τύπου Binder.

Για τον υπολογισμό των μεγεθών που σχετίζονται με τη μαγνήτιση εργαζόμαστε με δυο τρόπους: στον πρώτο θεωρούμε ανεξάρτητα παραλληλόγραμμα πλέγματα διαστάσεων $L \times (L+3)$, με $L = 3, 6, 9, 12, \dots, 102$, στα οποία επιβάλλουμε περιοδικές συνοριακές συνθήκες [16]. Στο δεύτερο, θεωρούμε ένα σχετικά μεγάλο παραλληλόγραμμο πλέγμα διαστάσεων 69×72 , με περιοδικές συνοριακές συνθήκες αλλά υπολογίζουμε μεγέθη για τα υποπλέγματά του, διαστάσεων $L \times (L+3)$, με $L = 3, 6, 9, \dots, 69$. Η διαδικασία επαναλαμβάνεται για ένα μεγαλύτερο αρχικό παραλληλόγραμμο πλέγμα διαστάσεων 96×99 και για τα $L \times (L+3)$ υποπλέγματά του, με $L = 3, 6, 9, \dots, 96$. Η τελευταία αυτή μέθοδος είναι γνωστή με το όνομα «κλιμάκωση υποσυστημάτων πεπερασμένου μεγέθους» και οφείλεται στον Kurt Binder [22]. Ο λόγος για τον οποίο ακολουθούμε αυτές τις δυο πορείες είναι η διαπίστωση ότι η πεπερασμένη κλιμάκωση ορισμένων μαγνητικών μεγεθών εμφανίζει ισχυρή εξάρτηση από τις συνοριακές συνθήκες [73]. Για τα μεγέθη που σχετίζονται με την ενέργεια εργαζόμαστε μόνο με ανεξάρτητα πλέγματα.

Σε όλες τις περιπτώσεις η προσομοίωση αρχίζει με 10^7 σαρώσεις με τον αλγόριθμο Metropolis [79] για την επίτευξη ισορροπίας. Ακολουθεί το κύριο μέρος με 10^8 ως $2 \cdot 10^8$ (για πλέγματα με $L \geq 84$) βήματα του νέου αλγορίθμου πλειάδων ([104], [108]) ώστε να προκύψει ο απαιτούμενος αριθμός ανεξάρτητων αποτελεσμάτων. Οι προσομοιώσεις Monte Carlo για κάθε μέγεθος πλέγματος επαναλαμβάνονται για δέκα διαφορετικούς σπόρους (SEEDS) της γεννήτριας τυχαίων αριθμών υπολογίζοντας τις μέσες τιμές και τα στατιστικά σφάλματα κάθε ποσότητας που μας ενδιαφέρει.

7.1 Η μαγνητική επιδεκτικότητα

Η ισόθερμη μαγνητική επιδεκτικότητα υπολογίζεται συνήθως κατά τις υπολογιστικές προσομοιώσεις από τη γνωστή σχέση διακυμάνσεων- απωλειών [9]

$$\frac{\chi_T}{N} = \beta N (\langle m^2 \rangle - \langle |m| \rangle^2) \quad (7.1),$$

όπου N ο αριθμός των spin- μαγνητικών ροπών του συστήματος. Στη σχέση αυτή το m συμβολίζει τη μαγνήτιση ανά πλεγματοειδές σημείο και οι αντίστοιχες μέσες τιμές υπολογίζονται απευθείας από τη διαδικασία της προσομοίωσης [16]. Επειδή όμως εδώ μελετάται η συμπεριφορά της επιδεκτικότητας για ορισμένη τιμή της θερμοκρασίας $T = T_c$, αλλά για διάφορες τιμές του μαγνητικού πεδίου H , ακολουθούμε εδώ μια άλλη προσέγγιση. Πιο συγκεκριμένα, προσδιορίζουμε για $T = T_c$ και $H = 0$, όπου $\beta_c = \frac{k_B T_c}{J} = 2,269$, την κατανομή μαγνήτισης $P_{L0}(m)$ για διάφορα μεγέθη L του πλέγματος, οπότε η κατανομή $P_L(m)$ για $H \neq 0$ προκύπτει από τη σχέση [47]

$$P_L(m) = \frac{P_{L0}(m) \exp(\beta H N m)}{\sum_m P_{L0}(m) \exp(\beta H N m)} \quad (7.2).$$

Οι μέσες τιμές που απαιτούνται για τον προσδιορισμό της μαγνητικής επιδεκτικότητας με βάση τη σχέση (7.1) θα είναι [47]

$$\langle m^k \rangle = \sum_m m^k P_L(m) = \frac{\sum_m m^k P_{L0}(m) \exp(\beta H N m)}{\sum_m P_{L0}(m) \exp(\beta H N m)} \quad (7.3).$$

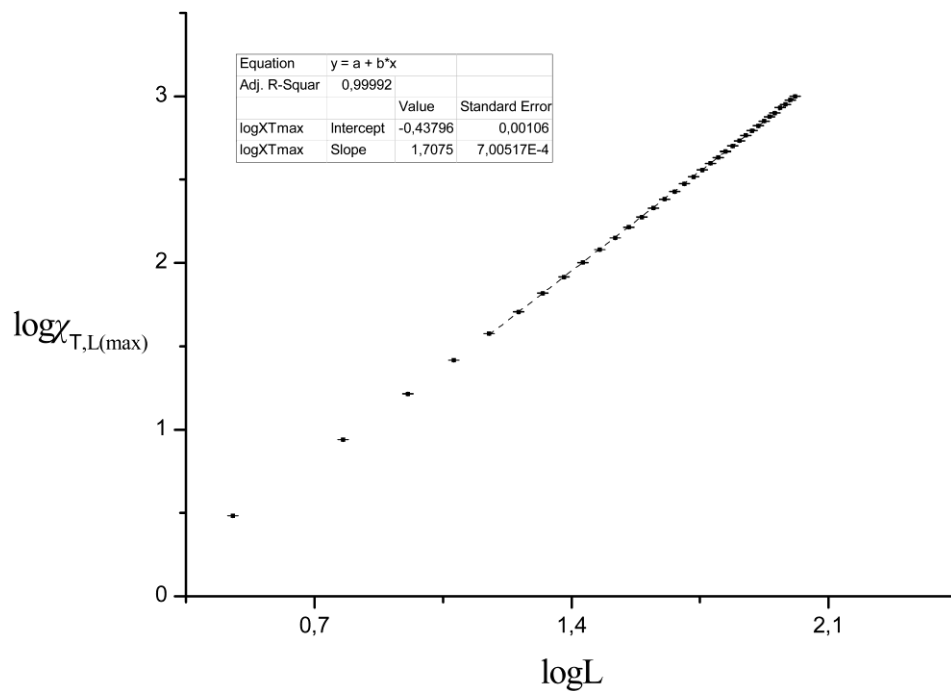
Η τελευταία σχέση εξηγήθηκε λεπτομερέστερα στην §4.9. Εξάλλου, ο προσδιορισμός της κατανομής (7.2) απαιτείται και για την απευθείας μελέτη της συμπεριφοράς της που θα εκτεθεί στην §7.2.

Θα ελέγξουμε τώρα αν η ισόθερμη μαγνητική επιδεκτικότητα του μοντέλου Baxter-Wu μοντέλο στο κρίσιμο σημείο συμπεριφέρεται σύμφωνα με τις προβλέψεις της Θεωρίας Κλιμάκωσης Πεπερασμένου Μεγέθους (Finite-Size Scaling ή FSS [16]). Για το λόγο αυτό υπολογίζουμε τη συνάρτηση κατανομής της πιθανότητας μαγνήτισης $P_{L0}(m)$ για $H = 0$ και $\beta_c = \frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ με τη χρήση του νέου αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων [104] για παραλληλόγραμμα πλέγματα διαστάσεων $L \times (L+3)$ με περιοδικές συνοριακές συνθήκες και $L = 3, 6, 9, 12, \dots, 102$. Με τον τρόπο αυτόν προκύπτουν οι μαγνητικές ροπές και η

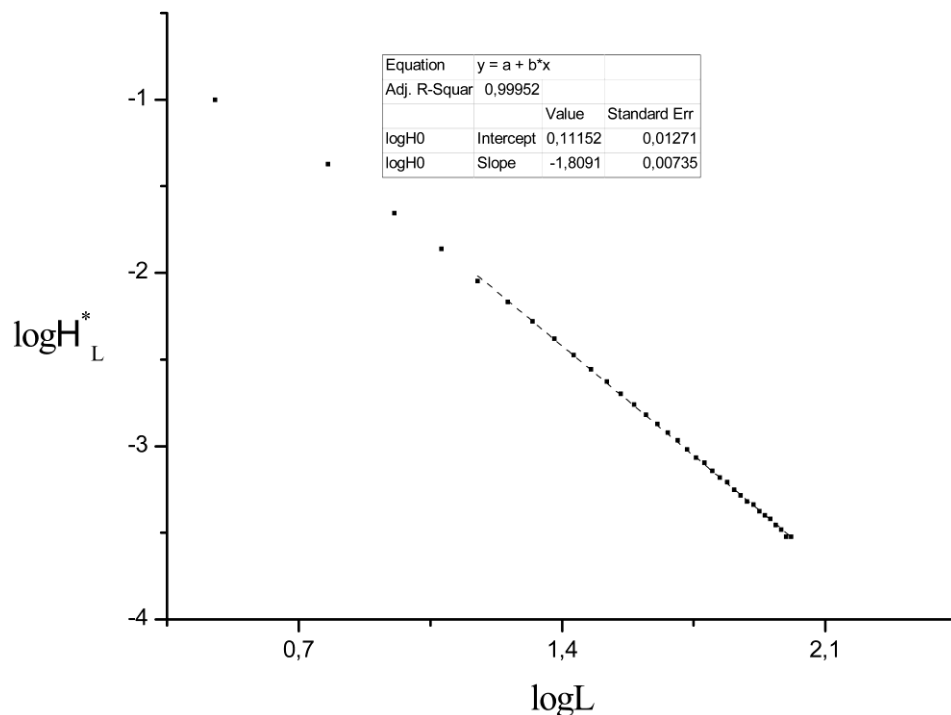
μαγνητική επιδεικτικότητα ως συναρτήσεις του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου $\mathbf{H}$ εφαρμόζοντας τις μαθηματικές εκφράσεις (7.1), (7.3) [47]. Οι προσομοιώσεις Monte Carlo για κάθε μέγεθος πλέγματος επαναλαμβάνονται για δέκα διαφορετικούς σπόρους (SEEDS) της γεννήτριας τυχαίων αριθμών και έτσι υπολογίζουμε τις μέσες τιμές και τα στατιστικά σφάλματα κάθε ποσότητας που μας ενδιαφέρει. Στα διαγράμματα 7.1 και 7.2 απεικονίζονται σε λογαριθμικές κλίμακες οι μέγιστες τιμές της ισόθερμης μαγνητικής επιδεικτικότητας $\chi_{T,L(\max)}$ και οι αντίστοιχες τιμές του μαγνητικού πεδίου $\mathbf{H}_L^*$ σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος. Οι αντίστοιχες κλίσεις των ευθειών που προκύπτουν είναι $1,7007 \pm 0,0007$ και $-1,809 \pm 0,007$, αντίστοιχα. Πράγματι, στα πλαίσια της Θεωρίας Κλιμάκωσης Πεπερασμένου Μεγέθους (Finite-Size Scaling ή FSS) για την κρίσιμη θερμοκρασία προβλέπεται

$$\chi_{T,L} = L^{\frac{\gamma}{\nu}} \tilde{\chi}_{T,0} \left(\mathbf{H} L^{\frac{\beta+\gamma}{\nu}} \right) \quad (7.4).$$

Εδώ τονίζουμε ότι στο πρότυπο Baxter-Wu το μέγιστο $\mathbf{H}_L^*$ της κλιμακωμένης συνάρτησης της ισόθερμης μαγνητικής επιδεικτικότητας $\tilde{\chi}_T \left(\mathbf{H} L^{\frac{\beta+\gamma}{\nu}} \right)$ τείνει στο μηδέν καθώς το L γίνεται άπειρο, ενώ αντίθετα στο spin- $\frac{1}{2}$ μοντέλο Ising η θέση αυτού του μεγίστου είναι το $\mathbf{H} = 0$ για κάθε μέγεθος L του πλέγματος. Αυτό μάλλον οφείλεται στη συμμετρία αντιστοφής της spin- μαγνητικής ροπής που παρατηρείται στο μοντέλο Ising [31] αλλά όχι στο μοντέλο Baxter-Wu [47]. Οι τιμές των κρίσιμων εκθετών του τελευταίου υπό μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο, ήδη γνωστοί από τις εργασίες του Baxter [29], είναι $\beta = \frac{1}{12}$, $\gamma = \frac{7}{6}$ και $\nu = \alpha = \frac{2}{3}$. Επομένως οι αντίστοιχοι εκθέτες κλιμάκωσης [17] θα είναι $\frac{\alpha}{\nu} = 1$, $\frac{\beta}{\nu} = 0,125$, $\frac{\gamma}{\nu} = 1,75$ και $\frac{\beta+\gamma}{\nu} = 1,875$.



Διάγραμμα 7.1: Λογαριθμικό διάγραμμα των μέγιστων τιμών της ισόθερμης μαγνητικής επιδεκτικότητα $\chi_{T, L(max)}$ σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος στην κρίσιμη θερμοκρασία (έχουμε θεωρήσει όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 102×105 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες στο κρίσιμο σημείο).



Διάγραμμα 7.2: Λογαριθμικό διάγραμμα των θέσεων H_L^* του μεγίστου της ισόθερμης μαγνητικής επιδεκτικότητας σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος στην κρίσιμη θερμοκρασία (έχουμε θεωρήσει όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 102×105 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες).

Η ασυμφωνία των τιμών της κλίσης των ευθειών που φαίνονται στα διαγράμματα 7.1 και 7.2 με τις θεωρητικά αναμενόμενες $\frac{\gamma}{\nu}=1,75$ και $-\frac{\beta+\gamma}{\nu}=-1,875$ αντίστοιχα θεωρούμε ότι οφείλεται στο πεπερασμένο μέγεθος του εκάστοτε μελετούμενου πλέγματος [17]. Για να αποδείξουμε αυτόν τον ισχυρισμό και ταυτόχρονα να διορθώσουμε την προαναφερθείσα απόκλιση, ακολουθούμε μια απλή τεχνική προεκβολής παρόμοια με άλλες χρησιμοποιούμενες σε τέτοιες περιπτώσεις [34, 47]. Θεωρούμε ως ένα πρώτο σύνολο μεγεθών πλέγματος το σύνολο με $L = 3-102$, ως δεύτερο εκείνο με μεγέθη $L = 6-102$, ως τρίτο εκείνο με μεγέθη $L = 9-102$ και ούτω καθεξής μέχρι το σύνολο $L = 60-102$. Για κάθε ένα από τα παραπάνω σύνολα υπολογίζουμε την κλίση της ευθείας $\log \chi_{T, L(\max)}$ ως προς $\log L$ και την κλίση της ευθείας $\log H_L^*$ ως προς $\log L$. Τα αποτελέσματα φαίνονται στους Πίνακες 7.1 και 7.2 αντίστοιχα. Οι τιμές τους μεταβάλλονται αργά και αυτό σημαίνει ότι δεν μπορούν να ανήκουν όλες στην ίδια ευθεία. Εμείς προεκβάλλουμε [108] τις παραπάνω τιμές προσαρμόζοντας στα αντίστοιχα σημεία τους μια κατάλληλη μη γραμμική συνάρτηση, συνήθως της μορφής

$$y = a L^w + b \text{ (συνάρτηση νόμου δύναμης)} \quad (7.5),$$

ή, εναλλακτικά,

$$y = a \exp(c L) + b \text{ (εκθετική συνάρτηση)} \quad (7.6),$$

όπου τα a , b , c και w είναι παράμετροι προσαρμογής.

Πίνακας 7.1: Σύγκριση της κλίσης του λογαριθμικού διαγράμματος μεγίστων της ισόθερμης μαγνητικής επιδεκτικότητας $\chi_{T, L(\max)}$ σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος στην κρίσιμη θερμοκρασία.

L	slope $\chi_{T, L(\max)}$	Errslope $\chi_{T, L(\max)}$
3- 102	1,6129	0,0085
6- 102	1,6509	0,0052
9- 102	1,6842	0,0005
12- 102	1,6987	0,0005
15- 102	1,7075	0,0007
18- 102	1,7115	0,0008
21- 102	1,7194	0,0010
24- 102	1,7240	0,0012
27- 102	1,7263	0,0013
30- 102	1,7292	0,0015
33- 102	1,7307	0,0016
36- 102	1,7341	0,0019
39- 102	1,7351	0,0021
42- 102	1,7364	0,0023
45- 102	1,7378	0,0026
48- 102	1,7442	0,0036
51- 102	1,7453	0,0039
54- 102	1,7481	0,0045
57- 102	1,7492	0,0053
60- 102	1,7511	0,0058

Πίνακας 7.2: Σύγκριση της κλίσης του λογαριθμικού διαγράμματος των θέσεων H_L^* των μεγίστων της ισόθερμης μαγνητικής επιδεκτικότητας σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος στην κρίσιμη θερμοκρασία.

L	$\text{slope} H_L^*$	$\text{Errslope} H_L^*$
3- 102	-1,727	0,016
6- 102	-1,778	0,008
9- 102	-1,794	0,007
12- 102	-1,803	0,007
15- 102	-1,809	0,007
18- 102	-1,822	0,006
21- 102	-1,829	0,006
24- 102	-1,834	0,006
27- 102	-1,837	0,007
30- 102	-1,841	0,008
33- 102	-1,845	0,008
36- 102	-1,848	0,009
39- 102	-1,852	0,010
42- 102	-1,855	0,011
45- 102	-1,859	0,013
48- 102	-1,863	0,014
51- 102	-1,863	0,016
54- 102	-1,858	0,019
57- 102	-1,859	0,022
60- 102	-1,869	0,025

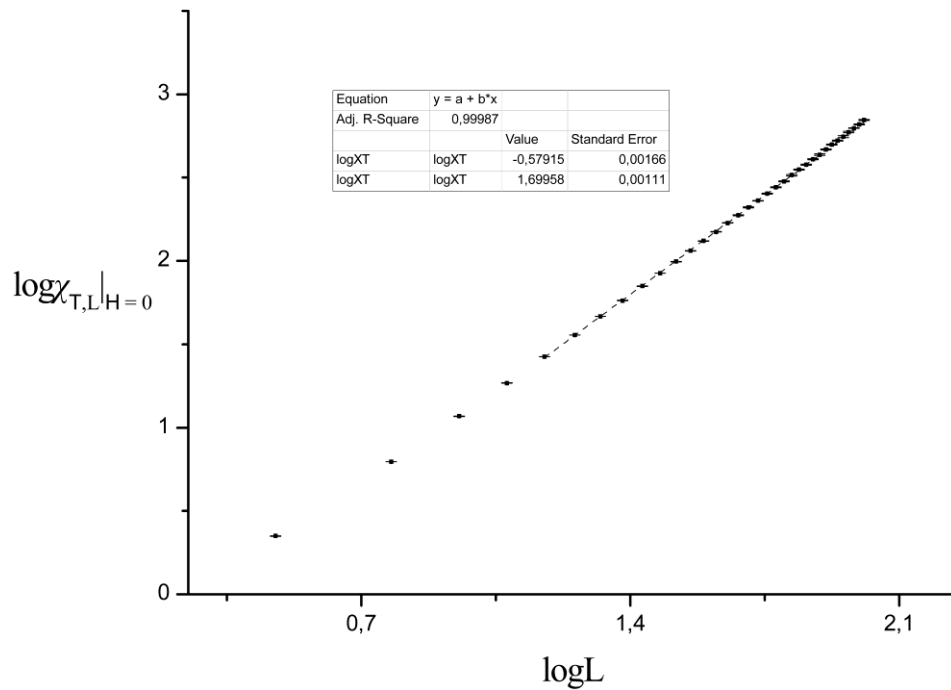
Τώρα, η κλίση του λογαριθμικού διαγράμματος της $\chi_{T, L(\max)}$ σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος προκύπτει ίση με $1,749 \pm 0,004$, η οποία είναι μια καλή εκτίμηση του αντίστοιχου εκθέτη κλιμάκωσης $\frac{\gamma}{\nu} = 1,75$, και η κλίση

του λογαριθμικού διαγράμματος H_L^* σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος προκύπτει $-1,870 \pm 0,007$, τιμή η οποία αποτελεί επίσης μια πολύ καλή προσέγγιση του εκθέτη κλιμάκωσης $-\frac{\beta + \gamma}{\nu} = -1,875$ (βλέπε Πίνακες 7.1

και 7.2). Η ανωτέρω διαδικασία επαναλαμβάνεται για την κλίση του λογαριθμικού διαγράμματος $\chi_{T, L|H=0}$ σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για $H = 0$, δίνοντας στην τιμή $1,752 \pm 0,003$, η οποία είναι στατιστικά ίση με το λόγο $\frac{\gamma}{\nu} = 1,75$ (βλέπε το Διάγραμμα 7.3 και τον Πίνακα

7.3). Τα αποτελέσματα αυτά δηλώνουν ότι οι διορθώσεις στους όρους κλιμάκωσης που είχαν προταθεί από το Σωτήριο Μαρτίνο και άλλα μέλη της ερευνητικής ομάδας Κρισίμων Φαινομένων και Στατιστικής Μηχανικής του Τμήματος Φυσικής του Πανεπιστημίου Αθηνών [47], δεν είναι απαραίτητες. Τέλος, στο διάγραμμα 7.4 παρουσιάζεται η ανακλιμακωμένη τιμή της ισόθερμης

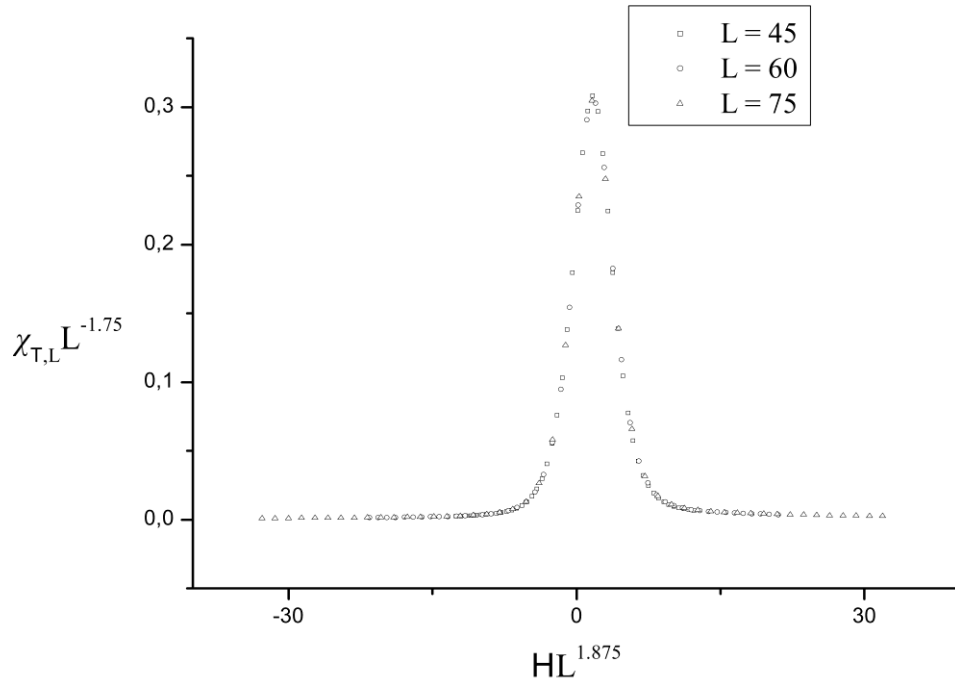
μαγνητικής επιδεικνυκότητας $\chi_{T,L}^{\frac{\gamma}{\beta+\gamma}}$ σε συνάρτηση με το αντίστοιχο ανακλιμακωμένο μαγνητικό πεδίο $H L^{\frac{\gamma}{\beta+\gamma}}$ για τρεις διαφορετικές τιμές του μεγέθους L του πλέγματος. Οι τρεις καμπύλες συμπίπτουν όπως προβλέπεται από την οικουμενικότητα της αντίστοιχης συνάρτησης $\tilde{\chi}_T$.



Διάγραμμα 7.3: Λογαριθμικό διάγραμμα της ισόθερμης μαγνητικής επιδεικνυκότητας $\chi_{T,L}|_{H=0}$ στο κρίσιμο σημείο μηδενικού μαγνητικού πεδίου σε συνάρτηση με το μέγεθος του πλέγματος L (έχουμε θεωρήσει όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 102×105 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες στο κρίσιμο σημείο υπό μηδενικό εξωτερικό πεδίο).

Πίνακας 7.3: Σύγκριση της κλίσης του λογαριθμικού διαγράμματος της ισόθερμης μαγνητικής επιδεκτικότητας $\chi_{T,L}|_{H=0}$ στο κρίσιμο σημείο υπό μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο ως προς το μέγεθος L του πλέγματος.

L	slope $\chi_{T,L} _{H=0}$	Errslope $\chi_{T,L} _{H=0}$
3- 102	1,661	0,008
6- 102	1,685	0,007
9- 102	1,697	0,005
12- 102	1,706	0,004
15- 102	1,712	0,004
18- 102	1,717	0,003
21- 102	1,721	0,003
24- 102	1,725	0,003
27- 102	1,727	0,004
30- 102	1,730	0,004
33- 102	1,733	0,004
36- 102	1,735	0,004
39- 102	1,737	0,005
42- 102	1,740	0,005
45- 102	1,742	0,006
48- 102	1,745	0,006
51- 102	1,747	0,007
54- 102	1,750	0,008
57- 102	1,751	0,009
60- 102	1,755	0,010



Διάγραμμα 7.4: «Ανακλιμακωμένη» ισόθερμη μαγνητική επιδεκτικότητα $\chi_{T,L} \frac{L^{\frac{\gamma}{\beta+\gamma}}}{L^{\frac{\gamma}{\beta+\gamma}}}$ σε συνάρτηση με το ανακλιμακωμένο εξωτερικό μαγνητικό πεδίο $HL^{\frac{\gamma}{\beta+\gamma}}$ στην κρίσιμη θερμοκρασία για τρία διαφορετικά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες (45×48 , 60×63 και 75×78).

Η παραπάνω διαδικασία επαναλαμβάνεται για την περίπτωση της κλιμάκωσης υποσυστημάτων πεπερασμένου μεγέθους. Εδώ εργαζόμαστε με τα υποσυστήματα τύπου Binder για μεγέθη πλέγματος από $L = 3$ έως $L = 96$. Σκοπός μας είναι η διερεύνηση τυχόν εξάρτησης της κρίσιμης συμπεριφοράς της ισόθερμης μαγνητικής επιδεκτικότητας από τις συνοριακές συνθήκες. Οι αντίστοιχες γραμμικές προσαρμογές (fitting) στα λογαριθμικά διαγράμματα των μέγιστων τιμών της ισόθερμης μαγνητικής επιδεκτικότητας $\chi_{T,L}^{(max)}$ και των αντίστοιχων θέσεων H_L^* των μέγιστων αυτών σε συνάρτηση με τα μεγέθη L του πλέγματος δίνει τώρα κλίσεις $1,754 \pm 0,006$ και $-1,868 \pm 0,008$, αντίστοιχα, αλλά μόνο όταν δουλεύουμε με υποπλέγματα μεγέθους $L < 48$, αφού τα υπόλοιπα επηρεάζονται ισχυρά από τις περιοδικές συνοριακές συνθήκες που επιβάλλονται στο μεγάλο πλέγμα. Σε κάθε περίπτωση πάντως, οι κλίσεις είναι σε πολύ καλή συμφωνία με τις προβλέψεις της Θεωρίας Κλιμάκωσης Πεπερασμένου Μεγέθους (Finite-Size Scaling ή FSS). Μάλιστα, ακόμη και στην περίπτωση των υποπλεγμάτων δεν είναι απαραίτητη η εισαγωγή διορθώσεων στη Θεωρία Κλιμάκωσης.

Τα αποτελέσματα που παρατέθηκαν στην παρούσα ενότητα δεν αποτελούν κάτι το καινοφανές στις μελέτες των κρίσιμων φαινομένων, αν και η ακρίβειά τους είναι αξιοπρόσεκτη. Μας αποκαλύπτουν την υπεροχή του νέου αλγορίθμου

πλειάδων τριγώνων στην κρίσιμη περιοχή σε σχέση με αλγορίθμους όπως Metropolis. Στις επόμενες ενότητες τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων του ανωτέρω αλγορίθμου θα αξιοποιηθούν για ενδελεχείς μελέτες ποσοτήτων για τις οποίες ως τώρα σχετικά λίγα πράγματα ήταν γνωστά.

7.2 Η κρίσιμη κατανομή μαγνήτισης

Όσον αφορά την συνάρτηση κατανομής μαγνήτισης, είναι γνωστό [48] ότι, η συμπεριφορά της για την περίπτωση του προτύπου Baxter-Wu αναμένεται να είναι παρόμοια με εκείνη του μοντέλου Ising [49] εκτός από τις συνέπειες της απουσίας συμμετρίας αντιστροφής spin- μαγνητικής ροπής. Οι δυο καταστάσεις της αυθόρμητα σπασμένης συμμετρίας στο τετραγωνικό πλέγμα Ising φαίνεται να αντιστοιχούν στην προκειμένη περίπτωση στις δυο καταστάσεις με μέσες

μαγνητίσεις m_0 και $-\frac{m_0}{3}$. Επιπλέον, για θερμοκρασίες χαμηλότερες από την

κρίσιμη τιμή και μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο το ολοκληρωμένο στατιστικό βάρος της κατανομής γύρω από τον αριστερό λοβό (κορυφή) είναι περίπου τριπλάσιο από το αντίστοιχο γύρω από τη δεξιά κορυφή ώστε η συνολική μέση τιμή της μαγνήτισης να ισούται με το μηδέν.

Στην περίπτωση ενός τετραγωνικού ή κυβικού πλέγματος Ising στην κρίσιμη θερμοκρασία, η συνάρτηση κατανομής $P_{L0}(m)$, όπως έχει επαληθευτεί ([22], [109], [110], [111]), υπακούει σε μια σχέση κλιμάκωσης της μορφής

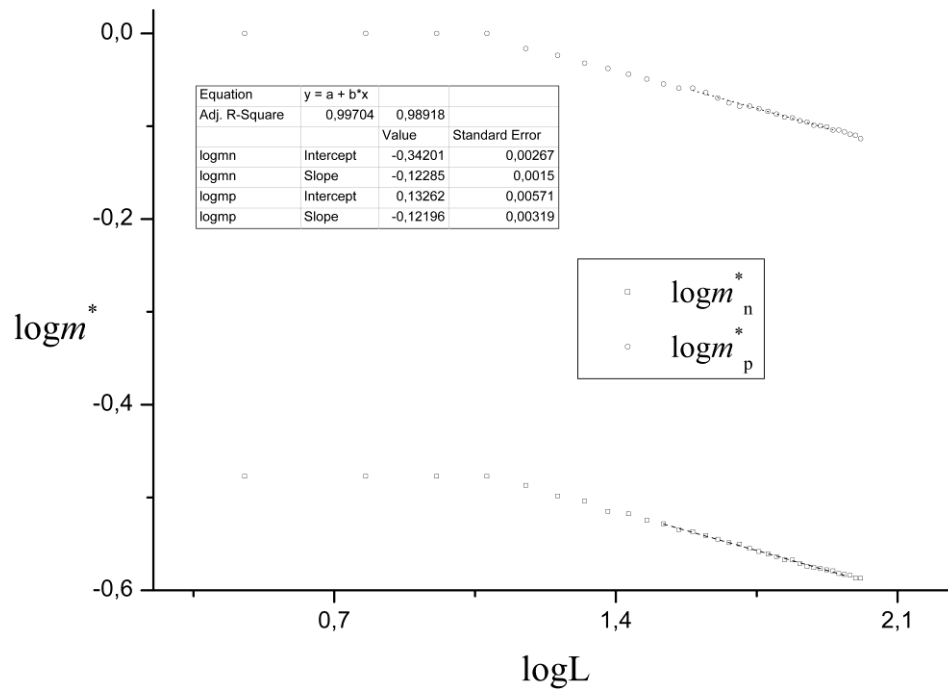
$$P_{L0}(m) = L^x \tilde{P}(mL^y) \quad (7.7),$$

όπου η ανακλιμακωμένη συνάρτηση $\tilde{P}(\psi)$ πιστεύεται ότι έχει μία οικουμενική μορφή στα πλαίσια της ίδιας Κλάσης Παγκοσμιότητας, ενώ αν η υπόθεση υπερκλιμάκωσης είναι έγκυρη, οι εκθέτες θα είναι ίσοι με το λόγο $\frac{\beta}{\nu}$ ([22], [109], [110], [111]).

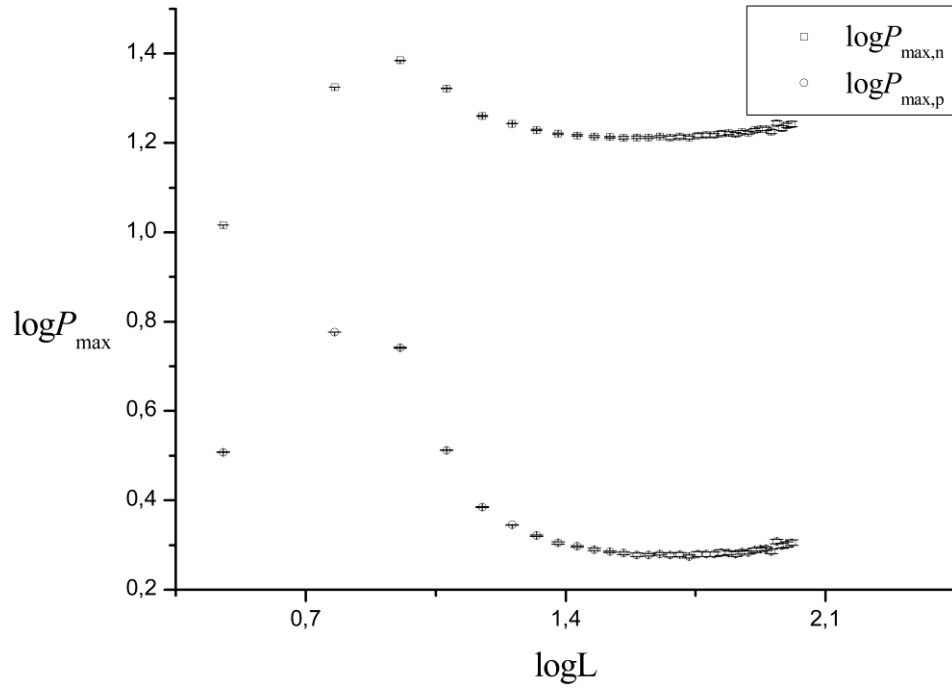
Προκειμένου να ελεγχθεί η εγκυρότητα της παραπάνω εξίσωσης, στην περίπτωση του μοντέλου Baxter-Wu κατασκευάζουμε το διάγραμμα 7.5, όπου απεικονίζονται οι λογάριθμοι των θέσεων του σιδηρομαγνητικού και του σιδηριμαγνητικού μεγίστου της συνάρτησης κατανομής μαγνήτισης στο κρίσιμο σημείο, δηλαδή οι $m_{p,L}^*$ και $m_{n,L}^*$ αντίστοιχα, σε συνάρτηση με το λογάριθμο του μεγέθους L του πλέγματος για ανεξάρτητα παραλληλόγραμμα πλέγματα με περιοδικές συνοριακές συνθήκες ($L=3-102$). Οι κλίσεις των αντίστοιχων ευθειών προκύπτουν ίσες με $-0,123 \pm 0,002$ και $-0,122 \pm 0,003$, οι οποίες είναι και οι δύο σε καλή συμφωνία με την αναμενόμενη τιμή $-\frac{\beta}{\nu} = -0,125$, δεδομένου ότι

οι εκθέτες β και ν έχουν τις γνωστές τιμές που ο Baxter [16] και άλλοι επιστήμονες προσδιόρισαν αναλυτικά, με άλλα λόγια $\beta = \frac{1}{12}$ και $\nu = \frac{2}{3}$.

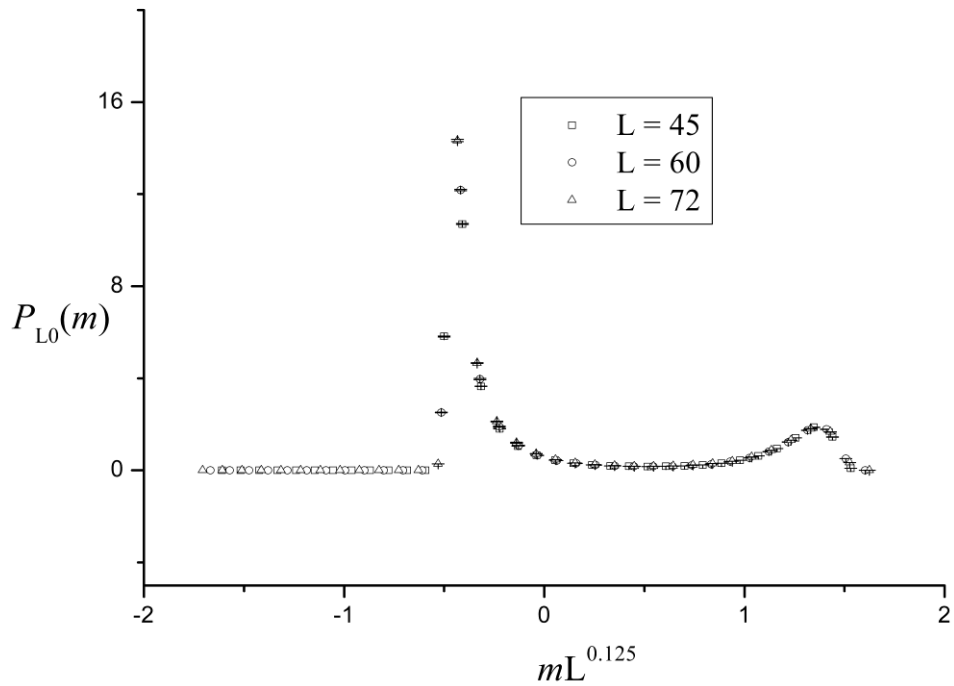
Εντελώς απροσδόκητα και σε προφανή αντίθεση με αρκετές θεωρητικές προβλέψεις ([22], [109], [110], [111]) συμπεριφέρονται οι λογάριθμοι των δυο μεγίστων της συνάρτησης κατανομής της μαγνήτισης του πλέγματος στο κρίσιμο σημείο ως συναρτήσεις του λογαρίθμου του πλεγματού μεγέθους L για ανεξάρτητα πλέγματα με περιοδικές συνοριακές συνθήκες, αφού οι κλίσεις των σχετικών διαγραμμάτων είναι σχεδόν μηδενικές για μεγάλα L (βλέπε διάγραμμα 7.6). Για την επιβεβαίωση του παραπάνω αποτελέσματος ελέγξαμε ότι οι γραφικές παραστάσεις $P_{L0}(m)$ ως προς $\psi = mL^{\frac{\beta}{\nu}}$ συμπίπτουν για διάφορες τιμές του L (βλέπε διάγραμμα 7.7), αν θέσουμε $x = 0$.



Διάγραμμα 7.5: Γραφικές παραστάσεις των λογαρίθμων των θέσεων m_p^* του σιδηρομαγνητικού μεγίστου και των θέσεων m_n^* του σιδηριμαγνητικού μεγίστου της κατανομής μαγνήτισης ως προς το λογάριθμο του μεγέθους L του πλέγματος στο κρίσιμο σημείο για μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο (έχουμε θεωρήσει όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 102×105 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες στο κρίσιμο σημείο υπό μηδενικό εξωτερικό πεδίο).



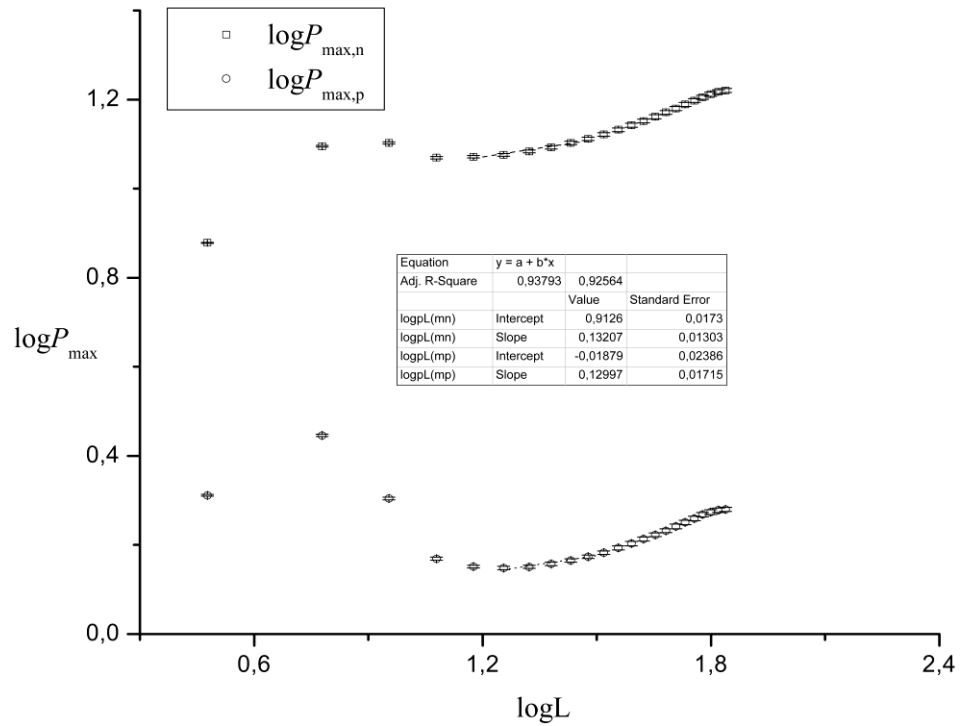
Διάγραμμα 7.6: Γραφική παράσταση των λογαρίθμων των σιδηρομαγνητικών μεγίστων $P_{\max,p}$ και των σιδηρομαγνητικών μεγίστων $P_{\max,n}$ της συνάρτησης κατανομής μαγνήτισης σε συνάρτηση με το λογάριθμο του μεγέθους L του πλέγματος στο κρίσιμο σημείο για μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο (έχουμε θεωρήσει όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 102×105 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες στο κρίσιμο σημείο υπό μηδενικό εξωτερικό πεδίο).



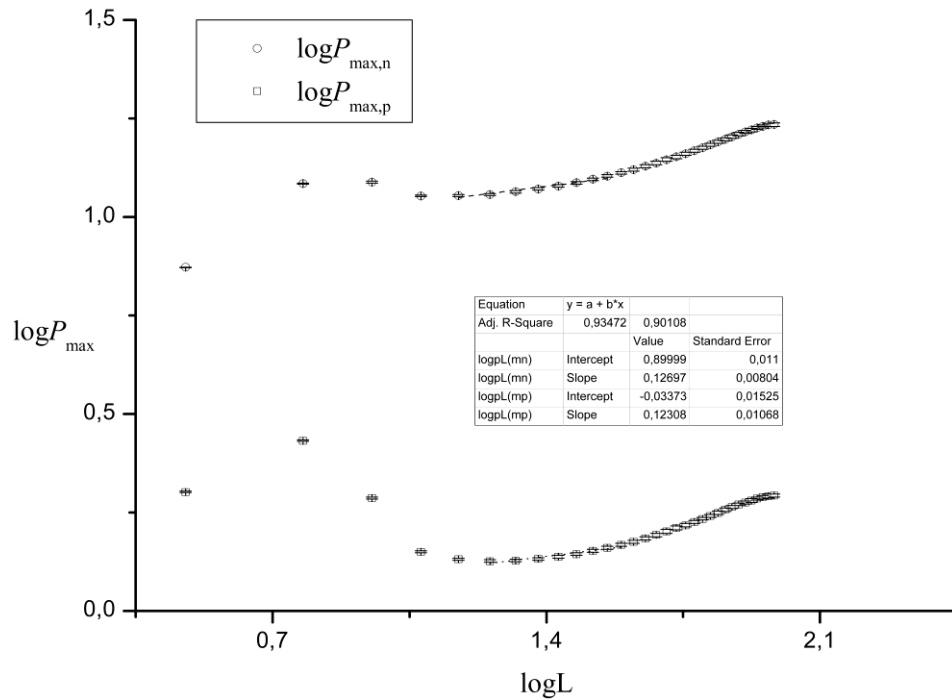
Διάγραμμα 7.7: Γραφική παράσταση της ανακλιμακωμένης συνάρτησης κατανομής μαγνήτισης $P_{L0}(m)$ σε συνάρτηση με την ανακλιμακωμένη μεταβλητή $mL^{\frac{\beta}{\nu}}$ στο κρίσιμο σημείο με μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο για τρία διαφορετικά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu (45×48 , 60×63 και 72×75) με περιοδικές συνοριακές συνθήκες.

Η παραπάνω διαδικασία επαναλαμβάνεται και για την περίπτωση υποπλεγμάτων Binder [22] με μεγέθη την πρώτη φορά από $L = 3$ μέχρι $L = 69$ (για συνολικό πλέγμα 69×72) και τη δεύτερη από $L = 3$ μέχρι $L = 96$ (για συνολικό πλέγμα 96×99). Όπως προηγουμένως, οι υπολογισμοί μας εστιάζονται σε υποπλέγματα που επηρεάζονται λιγότερο από τις περιοδικές συνοριακές συνθήκες του μεγάλου πλέγματος (στη δεύτερη περίπτωση μικρότερα από 48×51). Τα αποτελέσματα για τις θέσεις των μεγίστων της κατανομής μαγνήτισης $m_{p,L}^*$ και $m_{n,L}^*$ είναι και πάλι σε καλή συμφωνία με τις θεωρητικά αναμενόμενες τιμές, χωρίς να παρουσιάζουν καμιά σημαντική διαφορά με τα αντίστοιχα των ανεξάρτητων πλεγμάτων. Τα πράγματα διαφοροποιούνται σημαντικά για την περίπτωση των μεγίστων της κατανομής $P_{\max, p}$ και $P_{\max, n}$. Όπως φαίνεται και στα διαγράμματα 7.8- 7.9, υπάρχουν περιοχές όπου οι λογαριθμοί των μεγίστων $P_{\max}$ σε συνάρτηση με τους λογαριθμούς των πλεγματικών μεγεθών L είναι με καλή προσέγγιση ευθείες με κλίσεις $0,125 \pm 0,007$, δηλαδή είναι ίσες στα πλαίσια του στατιστικού σφάλματος με $\frac{\beta}{\nu} = 0,125$, δηλαδή με τη θεωρητικά προβλεπόμενη τιμή του εκθέτη χ της εξίσωσης (7.7). Μάλιστα, οι περιοχές αυτές επεκτείνονται όσο μεγαλώνει το μέγεθος του συνολικού πλέγματος. Στα τελευταία αποτελέσματα αποτυπώνεται ανάγλυφα η εξάρτηση της τιμής του εκθέτη χ από τις συνοριακές συνθήκες, μιας εξάρτησης που ως τώρα διέφευγε της προσοχής των ερευνητών ([22], [109],

[110], [111]). Εικάζουμε ότι αυτό το συμπέρασμα θα μπορούσε να επεκταθεί και για άλλα πρότυπα πέρα από το Baxter-Wu.



Διάγραμμα 7.8: Γραφική παράσταση του $\log P_{\max} = f(\log L)$, όπου $P_{\max,p}$ το σιδηρομαγνητικό και $P_{\max,n}$ το σιδηριμαγνητικό μέγιστο της κατανομής μαγνήτισης, στο κρίσιμο σημείο υπό μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο (έχουμε θεωρήσει όλα τα δυνατά υποπλέγματα Binder από 3×6 ως 69×72 σε ένα 69×72 συνολικό πλέγμα Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες στο κρίσιμο σημείο).



Διάγραμμα 7.9: Γραφική παράσταση του $\log P_{\max} = f(\log L)$, όπου $P_{\max,p}$ το σιδηρομαγνητικό και $P_{\max,n}$ το σιδηριμαγνητικό μέγιστο της κατανομής μαγνήτισης, στο κρίσιμο σημείο υπό μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο (έχουμε θεωρήσει όλα τα δυνατά υποπλέγματα Binder από 3×6 ως 96×99 σε ένα 96×99 συνολικό πλέγμα Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες στο κρίσιμο σημείο).

7.3 Οι κρίσιμοι σωρευτές Binder για τη μαγνήτιση

Στο σημείο αυτό είμαστε πλέον σε θέση, στηριγμένοι στα αποτελέσματα που προέκυψαν από την εφαρμογή του αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων στο πρότυπο Baxter-Wu, να ξαναδούμε τους υπολογισμούς των σωρευτών του Binder U_{L0} και U_L ([22], [23]) στο κρίσιμο σημείο, με τους οποίους είχαμε ασχοληθεί ξανά στην §5.3, χωρίς όμως να μπορέσουμε να καταλήξουμε σε κάποιο ακριβές ποσοτικό συμπέρασμα. Οι σωρευτές αυτοί προκύπτουν, όπως είδαμε στις §3.2 και §3.3, από τις σχέσεις

$$U_L = -\frac{\langle m^4 \rangle_L^{\text{con}}}{3\langle m^2 \rangle_L^2} \quad (7.8),$$

$$U_{L0} = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3\langle m^2 \rangle_L^2} \quad (7.9).$$

όπου

$$\langle m^4 \rangle_L^{\text{con}} = \langle m^4 \rangle_L - 3\langle m^2 \rangle_L^2 - 4\langle m \rangle_L \langle m^3 \rangle_L + 12\langle m^2 \rangle_L \langle m \rangle_L^2 - 6\langle m \rangle_L^4 \quad (7.10)$$

και

$$\langle m^k \rangle_L = \int_{-\infty}^{+\infty} m^k P_L(m) dm \quad (7.11).$$

Παραπάνω ο συμβολισμός “con” σημαίνει “conventional”, δηλαδή «συμβατικός» [23]. Είναι προφανές ότι για $H = 0$ και $L \rightarrow +\infty$ θα ισχύει

$$U_{L0} = U_L \quad (7.12),$$

δηλαδή στην περίπτωση που έχουμε μηδενικό εξωτερικό πεδίο οι δυο σωρευτές μας δίνουν τις ίδιες πληροφορίες.

Έχειδειχτεί [22] ότι στο κρίσιμο σημείο (H_c, T_c) οι παραπάνω ποσότητες είναι οικουμενικές συναρτήσεις του λόγου $\frac{\xi}{L}$. Κάτι τέτοιο σημαίνει ότι στο

κρίσιμο σημείο και για όλα τα συστήματα που ανήκουν στην ίδια κλάση παγκοσμιότητας παίρνουν μια παγκόσμια σταθερή τιμή U^* , ανεξάρτητη από το μέγεθος L του πλέγματος. Η σταθερή αυτή τιμή είναι φυσικά διαφορετική από την αντίστοιχη των αλλαγών φάσης πρώτης τάξης. Η συμπεριφορά τους στο κρίσιμο σημείο για το απλό μοντέλο Ising ερμηνεύτηκε θεωρητικά από τους Burkhardt και Derrida [66], με τη θεωρία των σύμμορφων αναλλοίωτων (conformal invariance theory). Από την άλλη μεριά, σχετικά πρόσφατες έρευνες στο ίδιο πρότυπο [54- 56], όπως είδαμε στην §3.3, πρότειναν την εισαγωγή διορθώσεων κλιμάκωσης (correction-to-scaling terms) εξαιτίας της συμπεριφοράς των αντίστοιχων θερμοδυναμικών συναρτήσεων ([67], [71], [72]). Στην περίπτωση περιοδικών συνοριακών συνθηκών, οι παραπάνω διορθώσεις έχει προταθεί ότι παίρνουν τη μορφή [34]

$$U_L|_{H=0} = U_{L0}|_{H=0} = U^* + A_S L^{-\Delta} + \dots \quad (7.13),$$

όπου

$$\Delta = \frac{\gamma}{\nu} \quad (7.14)$$

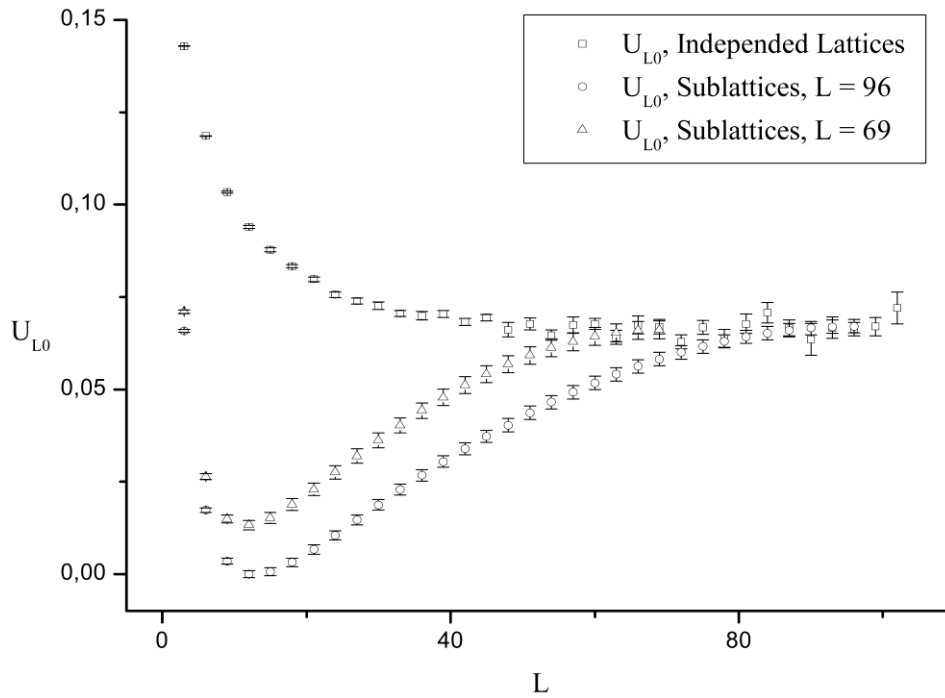
και A_S είναι ένας σταθερός συντελεστής. Ένα άλλο σημαντικό σημείο είναι η ισχυρή εξάρτηση των σωρευτών Binder στο κρίσιμο σημείο από τις συνοριακές συνθήκες [73]. Τούτο σημαίνει ότι η οικουμενική τους τιμή θα πρέπει να αναζητηθεί για αρκετά μεγάλα μεγέθη πλεγμάτων.

Επειδή η κατανομή μαγνήτισης στο κρίσιμο σημείο με $\beta_c = \frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και $H = 0$ τόσο για ανεξάρτητα πλέγματα με περιοδικές

συνοριακές συνθήκες όσο και για την περίπτωση πεπερασμένων υποπλεγμάτων τύπου Binder έχει ήδη υπολογιστεί με σημαντική ακρίβεια, αξιοποιούμε τον τύπο (7.3) προκειμένου να υπολογίσουμε τους U_L και U_{L0} ώστε να ελεγχθεί η εγκυρότητα της (7.12) στο μοντέλο Baxter-Wu. Για το προαναφερθέν κρίσιμο σημείο λοιπόν ξεκινάμε σχεδιάζοντας τις γραφικές παραστάσεις του U_{L0} (ή ισοδύναμα του U_L) ως προς το μέγεθος L του πλέγματος (δες διάγραμμα 7.10) στο ίδιο διάγραμμα για διάφορες συνοριακές συνθήκες. Για την περίπτωση των ανεξάρτητων πλεγμάτων προσαρμόζουμε στο αντίστοιχο διάγραμμα που προέκυψε τη μαθηματική έκφραση (7.5), βρίσκοντας το σταθερό όρο ίσο με $0,010 \pm 0,009$ ενώ ο εκθέτης προκύπτει ίσος με $-0,30 \pm 0,03$, τιμή που διαφέρει αισθητά από την αναμενόμενη $-\Delta = -\frac{\gamma}{\nu} = -1,75$. Ακολουθώντας

εφαρμόζουμε και πάλι τη μέθοδο προεκβολής (extrapolation) της §7.1, οπότε διαπιστώνουμε ότι οι σωρευτές Binder για το πρότυπο Baxter-Wu συγκλίνουν στο κρίσιμο σημείο στην τιμή $0,066 \pm 0,002$, η οποία θα μπορούσε να θεωρηθεί ίση με $\frac{1}{15}$, ενώ ο εκθέτης Δ της πρώτης διόρθωσης κλιμάκωσης στην

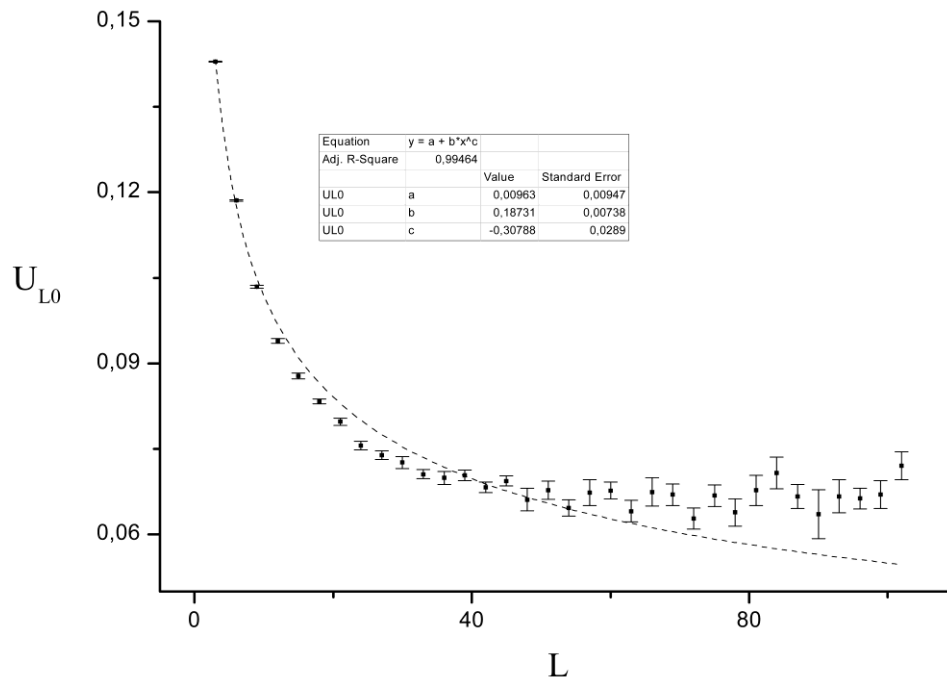
τιμή $1,8 \pm 0,1$, δηλαδή είναι κατά προσέγγιση ίσος με $\frac{\gamma}{\nu} = 1,75$ (δες διάγραμμα 7.11 και πίνακα 7.4). Αυτή η μη τετριμμένη αλλά και αισθητά μικρότερη από το $0,222$ τιμή, αποτελεί την υπογραφή μιας αλλαγής φάσης ανώτερης τάξης, όπως ακριβώς και στην περίπτωση του προτύπου Ising [23].



Διάγραμμα 7.10: Συγκριτικό διάγραμμα των σωρευτών του Binder σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu (έχουμε θεωρήσει όλα τα ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 102×105 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες) με τους ίδιους σωρευτές όπως προκύπτουν για την περίπτωση των υποπλεγμάτων τύπου Binder από 3×6 μέχρι 69×72 σε ένα 69×72 πλέγμα Baxter-Wu και για την περίπτωση των υποπλεγμάτων τύπου Binder από 3×6 μέχρι 96×99 σε ένα 96×99 πλέγμα Baxter-Wu, αμφότερα με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Όλες οι προσομοιώσεις έχουν πραγματοποιηθεί με τον καινούριο αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων στο κρίσιμο σημείο.

Πίνακας 7.4: Σύγκλιση των σωρευτών του Binder στο μοντέλο Baxter-Wu σε θερμοκρασία $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και εξωτερικό μαγνητικό πεδίο $H = 0$ (κρίσιμο σημείο).

L	U_{L00}	$ErrU_{L00}$	w	$Errw$
3- 102	0,010	0,009	-0,30	0,03
6- 102	0,052	0,002	-0,68	0,03
9- 102	0,058	0,002	-0,88	0,06
12- 102	0,061	0,001	-1,07	0,09
15- 102	0,063	0,001	-1,4	0,1
18- 102	0,0645	0,0009	-1,7	0,2
21- 102	0,0651	0,0009	-2,0	0,3
24- 102	0,065	0,001	-1,8	0,4
27- 102	0,065	0,001	-2,0	0,7
30- 102	0,065	0,001	-2	1
33- 102	0,065	0,002	-2	1



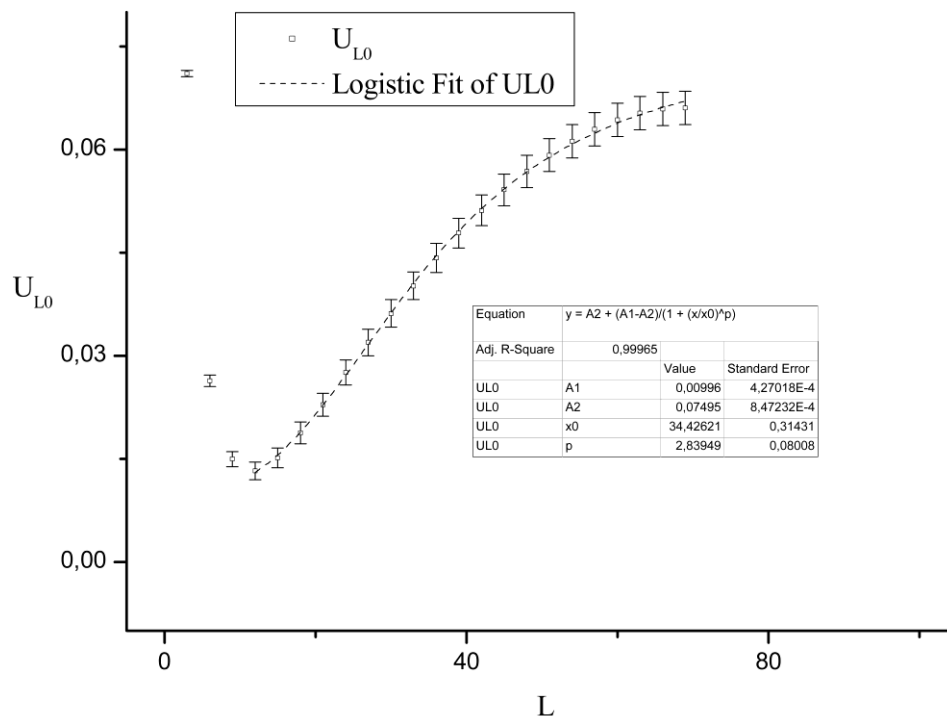
Διάγραμμα 7.11: Γραφική παράσταση των σωρευτών του Binder σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 102×105 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Όλες οι προσομοιώσεις έχουν πραγματοποιηθεί με τον καινούριο αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων στο κρίσιμο σημείο.

Διαφορετικά συμπεριφέρονται οι διορθώσεις κλιμάκωσης των σωρευτών U_L και U_{L0} στην περίπτωση των πεπερασμένων υποπλεγμάτων τύπου Binder [22] γιατί επηρεάζονται ισχυρά από την αλλαγή των συνοριακών συνθηκών [73], αν και εξακολουθούν να συγκλίνουν την τιμή $0,069 \pm 0,005$, η οποία είναι και αυτή ίση με $\frac{1}{15}$ στα πλαίσια του στατιστικού σφάλματος (δες διάγραμμα 7.12). Η

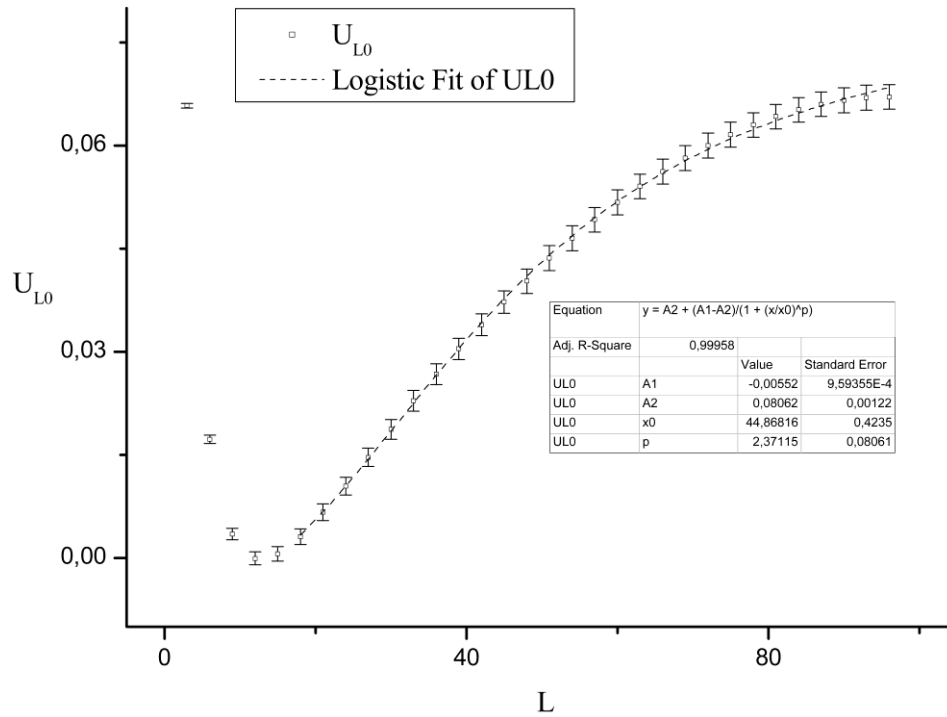
σύγκλισή τους μπορεί και πάλι να περιγραφεί για αρκετά μεγάλες τιμές του μεγέθους L των υποπλεγμάτων από μια συνάρτηση νόμου δύναμης όπως η (7.5) αλλά με αρνητικό συντελεστή A_S . Αν λάβουμε υπόψη και τα μικρότερα πλεγματικά μεγέθη, με εξαίρεση τα 3×6 , 6×9 και 9×12 , οι μεγάλες διορθώσεις κλιμάκωσης των οποίων δεν είναι εύκολο να περιγραφούν, φαίνεται ότι οι τιμές των σωρευτών σε συνάρτηση με το πλεγματικό μέγεθος ακολουθούν με σημαντική ακρίβεια (ο συντελεστής προσδιορισμού R^2 είναι τέτοιος ώστε $R^2 > 99,9\%$) τη λεγόμενη «λογιστική καμπύλη» [76], η οποία δίνεται από τη σχέση (βλέπε διαγράμματα 7.13 και 7.14)

$$y = A_2 + \frac{A_1 - A_2}{1 + \left(\frac{L}{L_0}\right)^w} \quad (7.15),$$

όπου A_1 , A_2 , L_0 και w είναι σταθερές. Η συνάρτηση αυτή εμφανίζεται συχνά στη βιολογία, στη γεωγραφία και στις οικονομικές επιστήμες κατά την περιγραφή της πληθυσμιακής εξέλιξης και άλλων οικονομικών μεγεθών [76], αλλά δεν είναι ιδιαίτερα συνηθισμένη στη στατιστική φυσική και στη θεωρία των κρίσιμων φαινομένων ([3], [6], [11]). Ο σταθερός όρος A_2 στη μαθηματική έκφραση (7.15) φαίνεται να συγκλίνει στο $\frac{1}{15}$ καθώς το μέγεθος του συνολικού πλέγματος μεγαλώνει. Επιπλέον, παρατηρούμε ότι η τιμή των σωρευτών για τα 3×6 υποπλέγματα είναι επίσης ίση με $\frac{1}{15}$, εφόσον τουλάχιστον το εξωτερικό πλέγμα με τις περιοδικές συνοριακές συνθήκες είναι αρκετά μεγάλο.



Διάγραμμα 7.12: Γραφική παράσταση των σωρευτών Binder σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για υποπλέγματα τύπου Binder από 3×6 μέχρι 69×72 σε ένα 69×72 πλέγμα Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Οι σχετικές προσομοιώσεις έχουν πραγματοποιηθεί με τον καινούριο αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων στο κρίσιμο σημείο.



Διάγραμμα 7.13: Γραφική παράσταση των σωρευτών Binder σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για υποπλέγματα τύπου Binder από 3×6 μέχρι 96×99 σε ένα 96×99 πλέγμα Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Οι σχετικές προσομοιώσεις έχουν πραγματοποιηθεί με τον καινούριο αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων στο κρίσιμο σημείο.

7.4 Ο κρίσιμος λόγος Binder για τη μαγνήτιση

Όπως είδαμε στο κεφάλαιο 3, ο λόγος Binder Q_L [67] δίνεται από τη μαθηματική έκφραση

$$Q_L = \frac{\langle m^2 \rangle_L^2}{\langle m^4 \rangle_L} = \frac{1}{3(1 - U_{L0})} \quad (7.16),$$

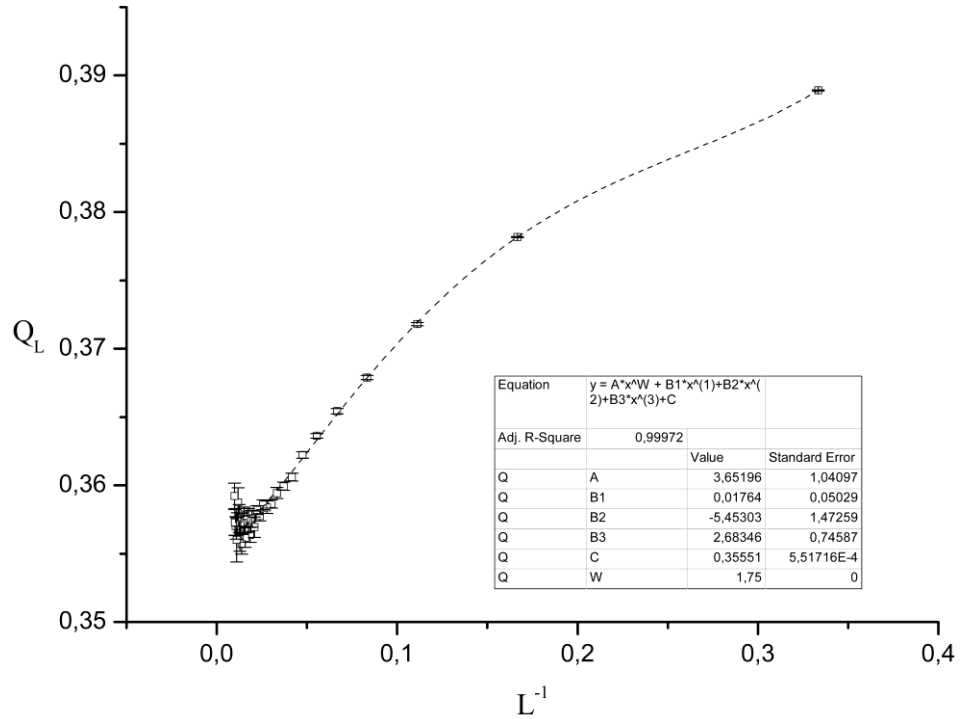
μέσω της οποίας άλλωστε συνδέεται με το σωρευτή U_{L0} . Ο υπολογισμός του απαιτεί λιγότερες αριθμητικές πράξεις σε σχέση με τους σωρευτές Binder, πράγμα το οποίο αποβαίνει χρήσιμο κατά τη μελέτη της κρίσιμης συμπεριφοράς με προσομοιώσεις Monte Carlo και ιδίως στον προσδιορισμό διορθωτικών όρων κλιμάκωσης. Εφαρμόζοντας σχέσεις κλιμάκωσης τριών μεταβλητών καταλήγουμε στην ακόλουθη έκφραση για το λόγο αυτόν στην κρίσιμη περιοχή ([71], [72])

$$Q(h, t, L) = Q^* + AL^{-\Delta} + B_1 L^{-y_1} + B_2 L^{-y_2} + B_3 L^{-y_3} + Q^{(1,0)} t L^{y_t} + Q^{(2,0)} t L^{2y_t} + Q^{(0,1)} h L^{y_h} \quad (7.17),$$

όπου A, B_1, B_2, B_3 σταθερές, ο εκθέτης Δ εξακολουθεί να δίνεται από τη σχέση (7.14), οι εκθέτες y_1, y_2, y_3 είναι αρνητικοί ακέραιοι και y_L, y_H είναι οι εκθέτες των σχέσεων κλιμάκωσης που περιγράφηκαν στο κεφάλαιο 2. Στο κρίσιμο σημείο αυτός γίνεται ([71], [72])

$$Q_{Lc} = Q^* + AL^{-\Delta} + B_1 L^{y_1} + B_2 L^{y_2} + B_3 L^{y_3} \quad (7.18).$$

Με σκοπό τον περαιτέρω έλεγχο της τελευταίας υπόθεσης παριστάνουμε γραφικά το λόγο Binder Q_L ως προς το αντίστροφο του μεγέθους L του πλέγματος (δες διάγραμμα 7.14) για ανεξάρτητα πλέγματα με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Στα σημεία που προκύπτουν προσαρμόζουμε τη μαθηματική έκφραση (7.18), κρατώντας όμως τους αντίστοιχους εκθέτες σταθερούς και ίσους με τις αναμενόμενες θεωρητικά τιμές, οπότε ο σταθερός όρος προκύπτει ίσος με $0,3551 \pm 0,0006$ (δες διάγραμμα 7.14). Αν οι εκθέτες δεν κρατηθούν σταθεροί, είναι πρακτικά αδύνατον να προκύψει σύγκλιση και αυτό ισχύει ανεξάρτητα με το ποια πλεγματικά μεγέθη θα συμπεριληφθούν τελικά στην προσαρμολή. Αν θυμηθούμε τη σχέση μεταξύ του λόγου του Binder Q_L και του σωρευτή U_{L0} αλλά και τα στατιστικά σφάλματα που προκύπτουν από τις δυο μεθόδους καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι οι τιμές των σωρευτών του Binder που υπολογίστηκαν με τις ανωτέρω μεθόδους είναι πρακτικά ίδιες μεταξύ τους.



Διάγραμμα 7.14: Πολυωνυμική προσαρμογή του διαγράμματος του λόγου Q_L του Binder σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 102×105 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Όλες οι προσομοιώσεις έχουν πραγματοποιηθεί με τον καινούριο αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων στο κρίσιμο σημείο.

Αναφορικά με την Κλάση Παγκοσμιότητας του μοντέλου Baxter-Wu λεπτομερείς υπολογισμοί των σωρευτών του Binder γενικά απουσιάζουν, όπως είδαμε και στην §3.4. Σε μια εργασία όμως του 2008 των Zhang και Deng [75] μελετήθηκε με τη βοήθεια προσομοιώσεων Monte Carlo ένα πλέγμα- αέριο για το οποίο υπάρχουν αρκετά στοιχεία ότι ανήκει σε αυτήν την Κλάση Παγκοσμιότητας. Για το λόγο Q βρέθηκε ότι υπακούει με αρκετά καλή ακρίβεια στη διορθωμένη εξίσωση κλιμάκωσης (7.17) με

$$y_1 = \frac{y_2}{2} = \frac{y_3}{3} = -1 \quad (7.19),$$

$$Q^* = 0,823(2) \quad (7.20).$$

Ωστόσο, τα αποτελέσματα που δίνονται στην παρούσα ενότητα, τα οποία έχουμε επιβεβαιώσει πέραν του αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων, τόσο με τον αλγόριθμο Metropolis στην §5.3 όσο και με εκείνον της εντροπικής δειγματοληψίας (Entropic Sampling) των Wang και Landau, αντιστοιχούν στην τιμή

$$Q^* = 0,357 \pm 0,002 \quad (7.21).$$

Αυτή είναι λιγότερο από το 50% εκείνης που υπολόγισαν οι παραπάνω ερευνητές, πράγμα το οποίο σημαίνει, αν φυσικά κάποια πλευρά δεν έχει κάνει ένα σοβαρό λάθος, ότι η αντίληψη πως οι σωρευτές Binder είναι κοινοί σε όλα τα μέλη μιας Κλάσης Παγκοσμιοτητας χρειάζεται αναθεώρηση ([70], [71], [72]). Παρόμοια πράγματα ισχύουν και για άλλα παγκόσμια τμήματα των σχέσεων κλιμάκωσης της παρούσας αλλά και των προηγούμενων ενοτήτων. Μια επιπλέον αξιοσημείωτη παρατήρηση, έστω και αν στερείται προς το παρόν οποιουδήποτε θεωρητικού υπόβαθρου, είναι ότι σε κάθε περίπτωση, ακόμα και στα ιδιαίτερα ακριβή αποτελέσματα των Salas and Sokal [67] για το μοντέλο Ising, η σύγκλιση των σωρευτών αυτών στο κρίσιμο σημείο για περιοδικές συνοριακές συνθήκες θα μπορούσε να περιγραφεί με ακρίβεια χρησιμοποιώντας την εκθετική συνάρτηση (7.5).

Κλείνουμε τη μελέτη της συμπεριφοράς των μαγνητικών μεγεθών του μοντέλου Baxter-Wu στην κρίσιμη θερμοκρασία, εξετάζοντας αν θέση του ολικού ελαχίστου του λόγου Binder Q_L και του αντίστοιχου σωρευτή U_{L0} τείνουν στο μηδέν καθώς αυξάνει το πλήθος $L \times (L+3)$ των πλεγματοειδών σημείων. Για το σκοπό αυτόν παριστάνουμε γραφικά τις τιμές των συναρτήσεων $Q_{Lmin} = f(L^{-1})$ και $H_0 = f(L)$ για $L = 15, 18, 21, 24, \dots, 99$ και $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ (βλέπε τα διαγράμματα 7.15, 7.16), όπου H_0 η τιμή του εξωτερικού πεδίου η οποία αντιστοιχεί στο ελάχιστο του Q_L (μετρούμενη σε μονάδες J) και Q_{Lmin} το αντίστοιχο ελάχιστο, ενώ το βάθος Depth του σχηματιζόμενου πηγαδιού θα προκύπτει από τη σχέση

$$Depth = \lim_{L \rightarrow \pm\infty} Q_L - Q_{min} = \frac{1}{2} - Q_{0cmin} \quad (7.22),$$

αφού η τιμή του λόγου Q_L παρουσία μαγνητικού πεδίου και απουσία αλλαγής φάσης είναι περίπου $\frac{1}{2}$. Μετά προεκβάλλουμε τα αποτελέσματα στο όριο $L \rightarrow +\infty$ χρησιμοποιώντας την εξίσωση (7.5) όπως πριν.

Από την παραπάνω διαδικασία συμπεραίνουμε ότι το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο H_0 το οποίο αντιστοιχεί στο ελάχιστο του U_{L0} είναι με καλή προσέγγιση συνάρτηση του L της μορφής (7.4) και για μεγάλες τιμές του L συγκλίνει στην τιμή

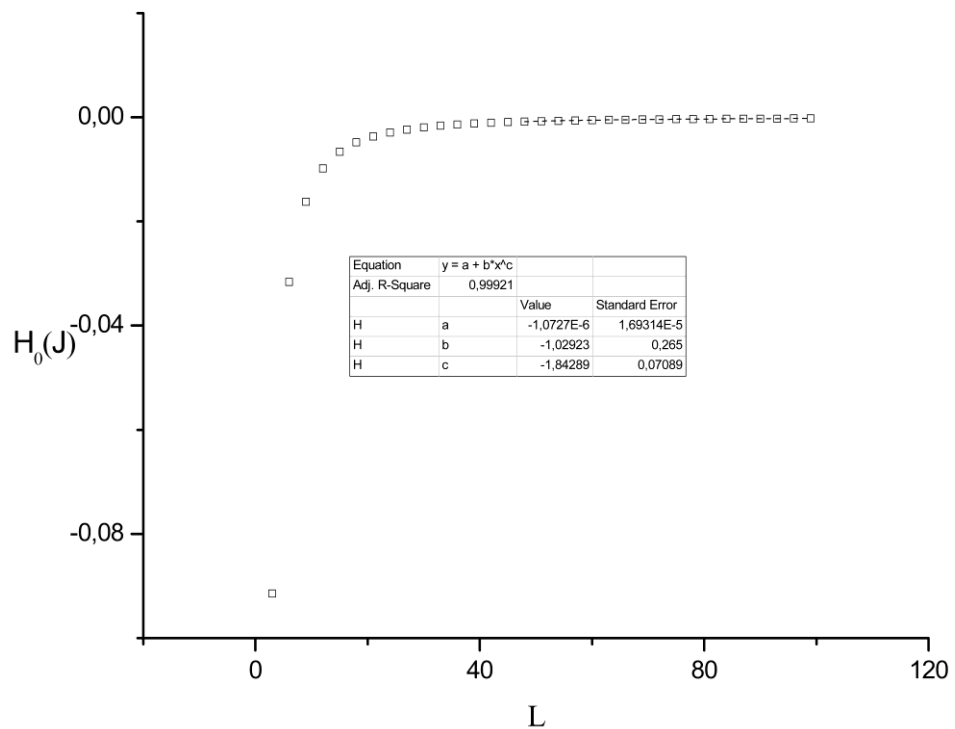
$$\lim_{L \rightarrow +\infty} H_0 = 0,000001 \pm 0,000020 \quad (7.23),$$

ενώ ο αντίστοιχος εκθέτης w γίνεται τότε $1,84 \pm 0,07$ (βλέπε διάγραμμα 7.15). Επομένως η τιμή του εκθέτη w μπορεί να θεωρηθεί ίση, στα πλαίσια του στατιστικού σφάλματος, με την προβλεπόμενη από τη Θεωρία Κλιμάκωσης Πεπερασμένου Μεγέθους (Finite-Size Scaling), δηλαδή με την τιμή

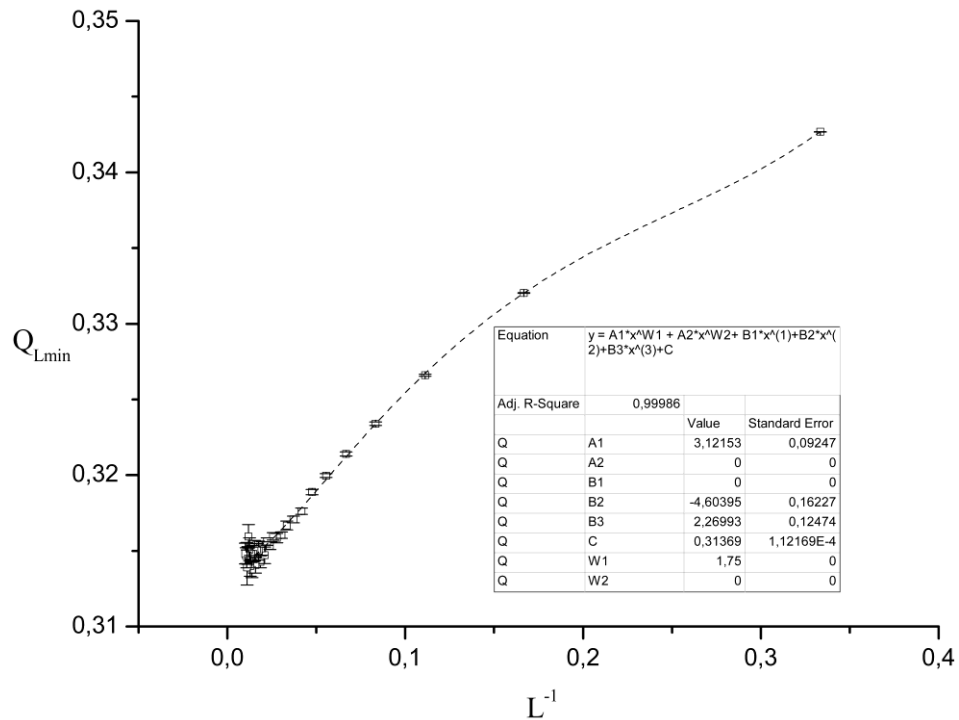
$$y_h = \frac{\beta + \gamma}{\nu} = 1,875 \quad (7.24).$$

Αυτή ως γνωστόν καθορίζεται από τους κρίσιμους εκθέτες β , γ και ν της αντίστοιχης «Κλάσης Παγκοσμιότητας» (“Universality Class”). Παράλληλα, η προσαρμογή της σχέσης (7.17) στο διάγραμμα $Q_{Lmin} = f(L^{-1})$ με $t = 0$ και με τις τιμές των εκθετών σταθερές (βλέπε διάγραμμα 7.16) δίνει για την οριακή τιμή Q_{min} του ελαχίστου του λόγου Binder την $0,3137 \pm 0,0001$, το οποίο σημαίνει

$$\lim_{L \rightarrow +\infty} U_{L0min} = U_{0min} \approx U^* = \frac{1}{15} \quad (7.25).$$



Διάγραμμα 7.15: Γραφική παράσταση της θέσης του ελαχίστου $H_0 = f(L)$ του λόγου του Binder Q_L στο μοντέλο Baxter-Wu για $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του νέου αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων (χρησιμοποιούμε όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu διαστάσεων από 3×6 έως 99×102 και περιοδικές συνοριακές συνθήκες).



Διάγραμμα 7.16: Γραφική παράσταση του ελαχίστου του σωρευτή Binder $Q_{Lmin} = f(L^{-1})$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του νέου αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων.

Τα αποτελέσματα αυτών των προσαρμογών (fitting), παρότι τα μεγαλύτερα σφάλματα, μας οδηγούν στο συμπέρασμα ότι στην κρίσιμη περιοχή το ελάχιστο του λόγου Binder Q_L στο θερμοδυναμικό όριο συμπίπτει με τη σταθερή τιμή του για μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Η μικρή απόκλιση μάλιστα μεταξύ των τιμών του παρούσα και απουσία μαγνητικού πεδίου οφείλεται μάλλον σε ένα σταθερό όρο διορθώσεων που εισάγει το τελευταίο στο λόγο Binder Q_L , όπως φαίνεται από το συνδυασμό των (7.5), (7.17) και (7.24). Στην περίπτωση του μοντέλου Ising αυτό το ελάχιστο συμπίπτει για κάθε μέγεθος πλέγματος με την κρίσιμη τιμή του λόγου Binder Q_L . Αυτή η απόκλιση στη συμπεριφορά των δυο μοντέλων συνδέεται με τις διαφορετικές συμμετρίες τους. Ως γενική παρατήρηση, ο λόγος του Binder Q_L και ο αντίστοιχος σωρευτής U_{L0} φαίνεται να παρέχουν λιγότερες πληροφορίες για τη μορφή της κατανομής $P_L(m)$ παρουσία μαγνητικού πεδίου σε σχέση με τον U_L , προκύπτουν όμως απλούστερα από προσομοιώσεις Monte Carlo, αφού απαιτούν λιγότερες αριθμητικές πράξεις, πράγμα το οποίο αποβαίνει χρήσιμο κατά τη μελέτη της κρίσιμης συμπεριφοράς.

7.5 Η κρίσιμη θερμοχωρητικότητα

Στην ενότητα αυτή θα μελετήσουμε την κλιμάκωση πεπερασμένου μεγέθους της θερμοχωρητικότητας του μοντέλου Baxter-Wu στο επακριβώς γνωστό κρίσιμο σημείο με $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και $H = 0$. Σημειώνουμε πως στη διάρκεια

αυτού και των επόμενων κεφαλαίων όταν αναφερόμαστε σε θερμοχωρητικότητα θα εννοούμε τη θερμοχωρητικότητα υπό σταθερό μαγνητικό πεδίο C_H , η οποία συνήθως χρησιμοποιείται κατά τη μελέτη μαγνητικών συστημάτων. Επειδή εστιάζουμε στη συμπεριφορά της θερμοχωρητικότητας για $H = 0$ και διάφορες θερμοκρασίες, προσδιορίζουμε για $T = T_c$ και $H = 0$, όπου $\beta_c = \frac{k_B T_c}{J} = 2,269$, την κρίσιμη πυκνότητα πιθανότητας της ενέργειας $P_{L0}(E)$.

Για τη μελέτη της συμπεριφοράς της εργαζόμαστε με πεπερασμένα ορθογώνια πλέγματα $L \times (L+3)$ με περιοδικές συνοριακές συνθήκες $L = 3, 6, 9, 12, \dots, 99$. Ο τύπος αυτός των συνοριακών συνθηκών επιλέγεται γιατί είναι ευκολότερο να εφαρμοστεί στη μελέτη της συμπεριφοράς ενεργειακών μεγεθών στο δοσμένο πρότυπο. Για κάθε προσομοίωση, εκτελούμε 10^7 σαρώσεις με τον αλγόριθμο Metropolis ώστε το σύστημα να έρθει σε κατάσταση ισορροπίας και 10^8 με το νέο αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων [104] για να προκύψουν κατά το δυνατόν «ανεξάρτητες» μικροκαταστάσεις. Από τους υπολογισμούς αυτούς δεν αναμένεται να προκύψει κάποιο νέο φυσικό αποτέλεσμα αλλά να αξιολογηθεί ο αλγόριθμος πλειάδων τριγώνων στον υπολογισμό ενεργειακών ποσοτήτων και ιδιαίτερα της κατανομής ενέργειας και του αντίστοιχου σωρευτή Binder V_{L0} , η συμπεριφορά των οποίων θα μας απασχολήσει στην επόμενη ενότητα.

Έτσι, το πρώτο στάδιο των υπολογισμών μας είναι η εύρεση της πυκνότητας πιθανότητας της ενέργειας $P_{L0}(E)$ για κάθε πλεγματοειδές μέγεθος L στο κρίσιμο σημείο με $\beta_c = \frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και $H = 0$ από τις μικροκαταστάσεις δίνουν οι προσομοιώσεις Monte Carlo. Έπειτα είναι πολύ εύκολο να βρεθεί η αντίστοιχη κατανομή $P_L(E)$ για μια σχετικά κοντινή θερμοκρασία $T \neq T_c$ πολλαπλασιάζοντας την $P_{L0}(E)$ με έναν παράγοντα $\exp[-E(\beta - \beta_c)]$ και κανονικοποιώντας τη νέα κατανομή στη μονάδα (μέθοδος του μονού ιστογράμματος ή single-histogram method). Έτσι έχουμε

$$P_L(E) = \frac{P_{L0}(E) \exp[-E(\beta - \beta_c)]}{\sum_E P_{L0}(E) \exp[-E(\beta - \beta_c)]} \quad (7.26),$$

Οι k -τάξης στατιστικές ροπές της ενέργειας που είδαμε στην §3.5 προκύπτουν από τη μαθηματική έκφραση

$$\langle E^k \rangle = \sum_E E^k P_L = \frac{\sum_E E^k P_{L0}(E) \exp[-E(\beta - \beta_c)]}{\sum_E P_{L0}(E) \exp[-E(\beta - \beta_c)]} \quad (7.27).$$

Φυσικά, η εσωτερική ενέργεια του συστήματος δεν είναι παρά η 1^η τάξης ενεργειακή στατιστική ροπή, ενώ η θερμοχωρητικότητα ανά δεσμό θα δίνεται από τον τύπο

$$c_L = \frac{1}{2Nk_B^2 T^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (7.28),$$

όπου N ο αριθμός των spin- μαγνητικών ροπών του συστήματος.

Έτσι, από τις παραπάνω σχέσεις και την κρίσιμη κατανομή ενέργειας $P_{L0}(E)$ που προέκυψε με τη βοήθεια του νέου αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων για ανεξάρτητα πλέγματα $L \times (L+3)$ με $L = 3, 6, 9, 12, \dots, 99$ και περιοδικές συνοριακές συνθήκες, παίρνουμε τις αντίστοιχες στατιστικές ροπές της ενέργειας και την αντίστοιχη ειδική θερμότητα. Οι προσομοιώσεις Monte Carlo για κάθε μέγεθος πλέγματος επαναλαμβάνονται για δέκα διαφορετικούς σπόρους (SEEDS) της γεννήτριας τυχαίων αριθμών, με συνέπεια να μπορούν να υπολογιστούν μέσες τιμές και στατιστικά σφάλματα για κάθε ποσότητα που μας ενδιαφέρει. Οι τιμές των κρίσιμων εκθετών, ήδη γνωστοί από τις εργασίες του Baxter [12], είναι $\beta = \frac{1}{12}$, $\gamma = \frac{7}{6}$ και $\nu = \alpha = \frac{2}{3}$. Επομένως οι εκθέτες

κλιμάκωσης που ελέγχουμε είναι $\frac{\alpha}{\nu} = 1$, $\frac{\beta}{\nu} = 0,125$, $\frac{\gamma}{\nu} = 1,75$ και

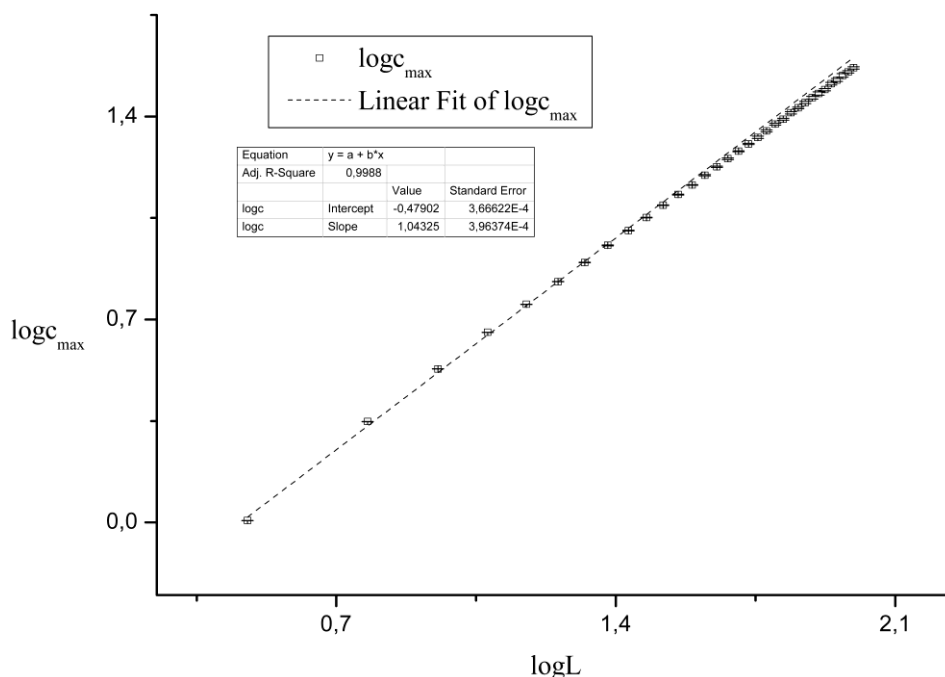
$$\frac{\beta + \gamma}{\nu} = 1,875.$$

Στο διάγραμμα 7.17 παριστάνεται γραφικά ο λογάριθμος του μεγίστου της θερμοχωρητικότητας $c_{\max}$ σε συνάρτηση με το λογάριθμο του μεγέθους L του πλέγματος για ανεξάρτητα ορθογώνια πλέγματα και περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Η γραμμική προσαρμογή (linear fit) στο διάγραμμα 7.17 δίνει κλίση $1,0433 \pm 0,0004$. Η προφανής ασυμφωνία μεταξύ του παραπάνω

αποτελέσματος και της θεωρητικά αναμενόμενης τιμής $\frac{\alpha}{\nu} = 1$ θεωρούμε ότι

οφείλεται στο πεπερασμένο μέγεθος του πλέγματος. Για να το αποδείξουμε αυτό, ακολουθούμε την απλή τεχνική προεκβολής που ήδη εφαρμόσαμε στις προηγούμενες παραγράφους [34, 47]. Θεωρούμε ως ένα πρώτο σύνολο μεγεθών πλέγματος το σύνολο με $L = 3-99$, ως δεύτερο εκείνο με μεγέθη $L = 6-99$, ως τρίτο εκείνο με μεγέθη $L = 9-99$ και ούτω καθεξής μέχρι το σύνολο $L = 60-99$. Για κάθε ένα από τα παραπάνω σύνολα υπολογίζουμε την κλίση της ευθείας $\log c_{\max}$ ως προς $\log L$. Τα αποτελέσματα φαίνονται στον πίνακα 7.5. Οι τιμές

τους μεταβάλλονται αργά και αυτό σημαίνει ότι δεν μπορούν να ανήκουν όλες στην ίδια ευθεία. Εμείς προεκβόλλουμε τις παραπάνω τιμές προσαρμόζοντας στα αντίστοιχα σημεία τους μια κατάλληλη μη γραμμική συνάρτηση, συνήθως της μορφής της συνάρτησης νόμου δύναμης (7.5) ή της εκθετική συνάρτησης (7.6). Τώρα, η κλίση του λογαρίθμου των μεγίστων της θερμοχωρητικότητας $C_{\max}$ σε συνάρτηση με το λογάριθμο του πλεγματοειδούς μεγέθους L υπολογίζεται ίση με $0,992 \pm 0,009$, η οποία είναι μια πολύ καλή προσέγγιση της αναμενόμενης θεωρητικά τιμής $\frac{\alpha}{\nu} = 1$.

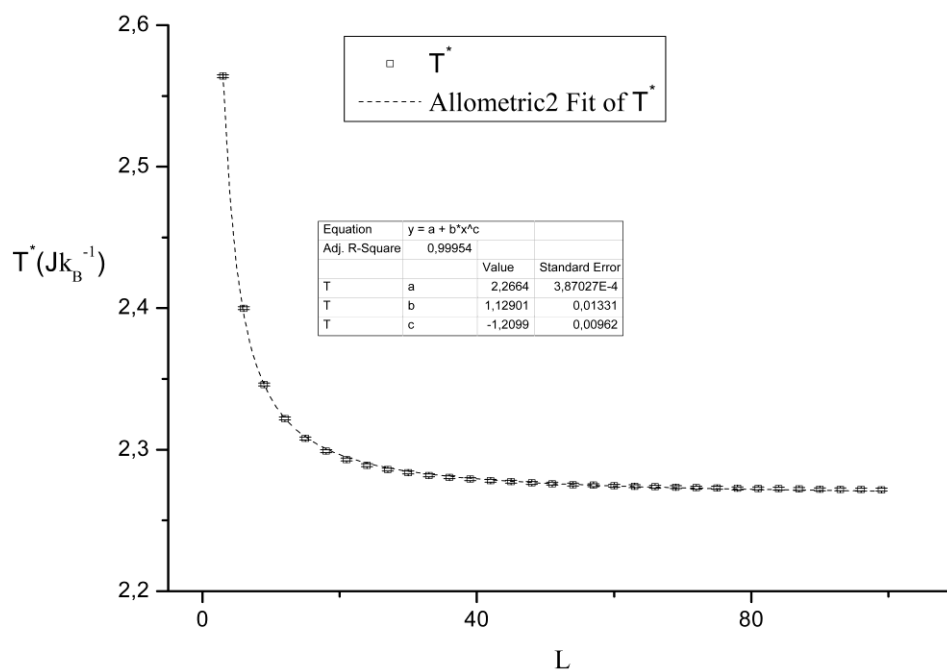


Διάγραμμα 7.17: Γραφική παράσταση του λογαρίθμου της μέγιστης θερμοχωρητικότητας $\log C_{\max}$ σε συνάρτηση με το λογάριθμο του μεγέθους L του πλέγματος υπό μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο (χρησιμοποιούμε όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu διαστάσεων από 3×6 έως 99×102 και περιοδικές συνοριακές συνθήκες).

Πίνακας 7.5: Πίνακας σύγκρισης της κλίσης του λογαρίθμου της μέγιστης θερμοχωρητικότητας ανά δεσμό $\log c_{\max}$ σε συνάρτηση με το λογάριθμο του μεγέθους L του πλέγματος υπό μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο.

L	Slope $\log c_{\max}$	ErrSlope $\log c_{\max}$
3- 99	1,0433	0,0004
6- 99	1,0049	0,0006
9- 99	0,9962	0,0009
12- 99	0,995	0,001
15- 99	0,995	0,001
18- 99	0,995	0,002
21- 99	0,995	0,002
24- 99	0,993	0,003
27- 99	0,993	0,003
30- 99	0,993	0,003
33- 99	0,993	0,004
36- 99	0,995	0,004
39- 99	0,996	0,005
42- 99	0,994	0,006
45- 99	0,995	0,007

Διαφορετική είναι η εικόνα αναφορικά με τη συμπεριφορά της θερμοκρασίας T^* του μεγίστου της θερμοχωρητικότητας για μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος, η οποία παριστάνεται γραφικά στο διάγραμμα 7.18. Εδώ γίνεται προσρμογή (fitting) με τη μη γραμμική συνάρτηση νόμου δύναμης (7.6) και αρχικά βρίσκουμε για την κρίσιμη θερμοκρασία την τιμή $2,2664 \pm 0,0004$, ενώ για τον εκθέτη $-1,21 \pm 0,01$. Η διαφορά ανάμεσα στην τελευταία τιμή και στη θεωρητικά αναμενόμενη, η οποία είναι $-\frac{1}{v} = -1,5$, μας οδηγεί στην επανάληψη της γνωστής διαδικασίας προειβολής των αποτελεσμάτων μας (βλέπε πίνακα 7.6), οπότε ο εκθέτης προκύπτει $-1,42 \pm 0,08$, δηλαδή πολύ κοντά στο 1,5. Αντίθετα, η κρίσιμη θερμοκρασία που βρίσκουμε είναι $2,269 \pm 0,001$, δηλαδή περίπου ίση με την αναμενόμενη τιμή 2,269. Αυτό δηλώνει ότι η χρησιμοποιούμενη μέθοδος και συγκεκριμένα ο νέος αλγόριθμος πλειάδων τριγώνων δίνει με ικανοποιητική ακρίβεια και την κρίσιμη θερμοκρασία.



Διάγραμμα 7.18: Γραφική παράσταση της θερμοκρασίας μέγιστης θερμοχωρητικότητας T^* σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος υπό μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο (χρησιμοποιούμε όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu διαστάσεων από 3×6 έως 99×102 και περιοδικές συνοριακές συνθήκες).

Πίνακας 7.6: Πίνακας σύγκλισης της θερμοκρασίας μέγιστης θερμοχωρητικότητας T^* σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος υπό μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο.

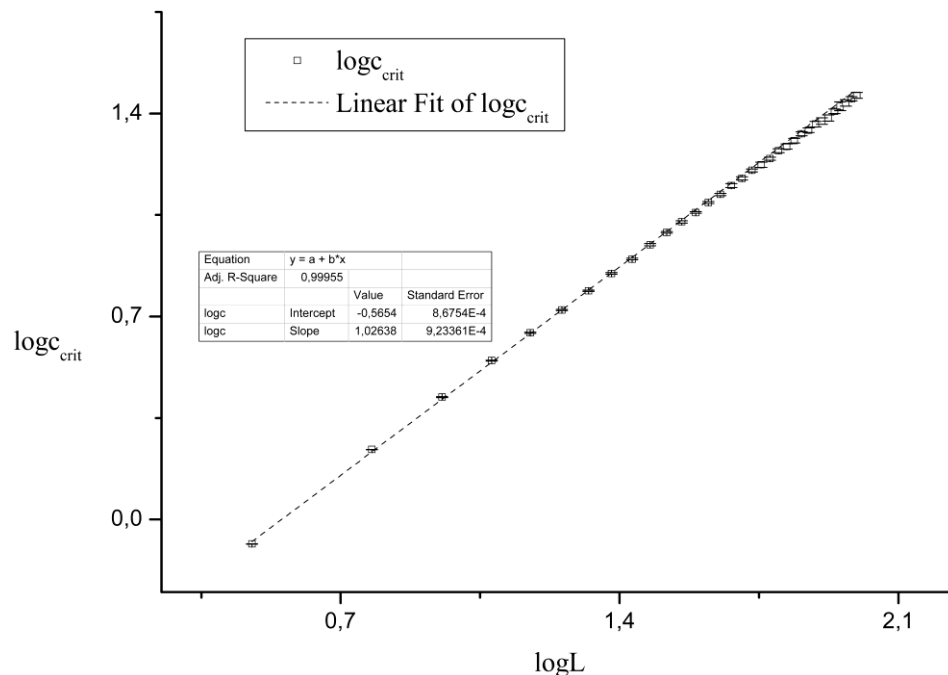
L	T_{cL}	$ErrT_{cL}$	w	Errw
3- 99	2,2664	0,0004	-1,21	0,01
6- 99	2,2682	0,0001	-1,320	0,006
9- 99	2,2686	0,0001	-1,353	0,007
12- 99	2,26892	0,00005	-1,398	0,005
15- 99	2,26896	0,00006	-1,404	0,008
18- 99	2,26883	0,00007	-1,381	0,009
21- 99	2,26873	0,00008	-1,36	0,01
24- 99	2,26880	0,00009	-1,38	0,02
27- 99	2,2687	0,0001	-1,39	0,02
30- 99	2,2690	0,0001	-1,42	0,02
33- 99	2,2689	0,0001	-1,40	0,03
36- 99	2,2690	0,0002	-1,44	0,04
39- 99	2,2691	0,0002	-1,45	0,05
42- 99	2,2691	0,0002	-1,45	0,07
45- 99	2,2693	0,0002	-1,52	0,08

Ο λεπτομερής έλεγχος της τελευταίας παρατήρησης μας οδηγεί στο σχεδιασμό του διαγράμματος του λογαρίθμου της θερμοχωρητικότητας $\log C_{crit}$, όπου C_{crit} η θερμοχωρητικότητα στο κρίσιμο σημείο για $H = 0$, σε συνάρτηση

με το λογάριθμο του μεγέθους L του πλέγματος για ανεξάρτητα ορθογώνια πλέγματα και περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Αν ως κρίσιμη θερμοκρασία επιλεγεί η αναμενόμενη τιμή της (2,269), όπως άλλωστε προέκυψε από την παραπάνω διαδικασία, προκύπτει για την κλίση της ευθείας προσαρμογής $1,0264 \pm 0,0009$ (βλέπε διάγραμμα 7.7). Πάλι η προφανής ασυμφωνία μεταξύ

του παραπάνω αποτελέσματος και της θεωρητικά αναμενόμενης τιμής $\frac{\alpha}{\nu} = 1$

[18] οφείλεται στο πεπερασμένο μέγεθος του πλέγματος και για να το αποδείξουμε ακολουθούμε την απλή τεχνική προεκβολής που ήδη εφαρμόσαμε στις προηγούμενες παραγράφους [108]. Τώρα, η κλίση του λογαρίθμου των κρίσιμων τιμών της θερμοχωρητικότητας C_{crit} σε συνάρτηση με το λογάριθμο του πλεγματού μεγέθους L υπολογίζεται ίση με $1,000 \pm 0,001$, η οποία είναι μια πολύ καλή προσέγγιση της τιμής $\frac{\alpha}{\nu} = 1$ (βλέπε πίνακα 7.7).



Διάγραμμα 7.19: Γραφική παράσταση του λογαρίθμου της θερμοχωρητικότητας ανά δεσμό $\log c_{crit}$ σε συνάρτηση με το λογάριθμο του μεγέθους L του πλέγματος για θερμοκρασία

$\frac{k_B T}{J} = 2,269$ και μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο (χρησιμοποιούμε όλα τα δυνατά

ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu διαστάσεων από 3×6 έως 99×102 και περιοδικές συνοριακές συνθήκες).

Πίνακας 7.7: Πίνακας σύγκρισης της κλίσης του λογαρίθμου της θερμοχωρητικότητας $\log c_{\text{crit}}$ σε συνάρτηση με το λογάριθμο του μεγέθους L του πλέγματος σε θερμοκρασία $\frac{k_B T}{J} = 2,269$ μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο.

L	Slope $\log c_{\text{crit}}$	Err Slope $\log c_{\text{crit}}$
3- 99	1,0264	0,0009
6- 99	1,006	0,001
9- 99	1,001	0,002
12- 99	1,001	0,003
15- 99	1,002	0,003
18- 99	1,003	0,004
21- 99	1,003	0,005
24- 99	0,999	0,006
27- 99	0,998	0,007
30- 99	0,994	0,008

Από τη συμπεριφορά αυτή του αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι ο αλγόριθμος αυτός είναι γενικά αποτελεσματικός για εκτιμήσεις κρίσιμων φυσικών μεγεθών που εξαρτώνται τόσο από τη θερμοκρασία όσο και από το μαγνητικό πεδίο. Επίσης επιτρέπει και τον μάλλον ακριβή υπολογισμό της κρίσιμης θερμοκρασίας.

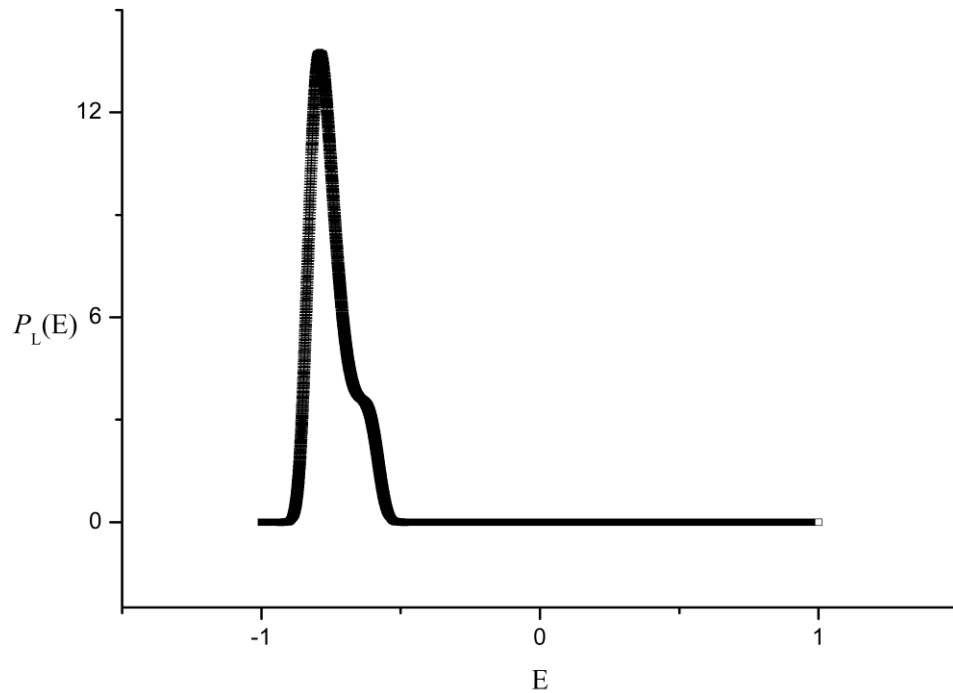
7.6 Η κρίσιμη κατανομή της ενέργειας

Σε ότι αφορά την κατανομή της ενέργειας, παρόλο έχει μελετηθεί επαρκώς όχι μόνο απουσία αλλαγών φάσης αλλά και για αλλαγές φάσης $1^{\text{ης}}$ τάξης σε μοντέλα τύπου Ising [24], λίγα πράγματα είναι γνωστά για τη συμπεριφορά της στα κρίσιμα σημεία, εκτός ίσως από το γεγονός ότι θα πρέπει να υπακούει σε κάποιου είδους σχέση κλιμάκωσης [41]. Ένα πρώτο βήμα λοιπόν είναι, βασισμένοι στα αποτελέσματα των προσομοιώσεων Monte Carlo, να σχεδιάσουμε την πυκνότητα πιθανότητας της ενέργειας $P_{L0}(E)$ σε συνάρτηση με την ενέργεια E (σε μονάδες $2NJ$) στο κρίσιμο σημείο υπό μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο (βλέπε διάγραμμα 7.20) για $L = 72$ και για $L = 36, 72, 90$ (βλέπε διάγραμμα 7.21). Από αυτά τα διαγράμματα είναι προφανές ότι η κατανομή $P_{L0}(E)$ δεν είναι προφανώς κανονική (Gaussian), έχει ένα μέγιστο και ένα στάσιμο σημείο, το οποίο δεν είναι ούτε τοπικό μέγιστο ούτε τοπικό ελάχιστο. Η σχέση κλιμάκωσης για αυτήν υποθέτουμε ότι θα είναι της μορφής

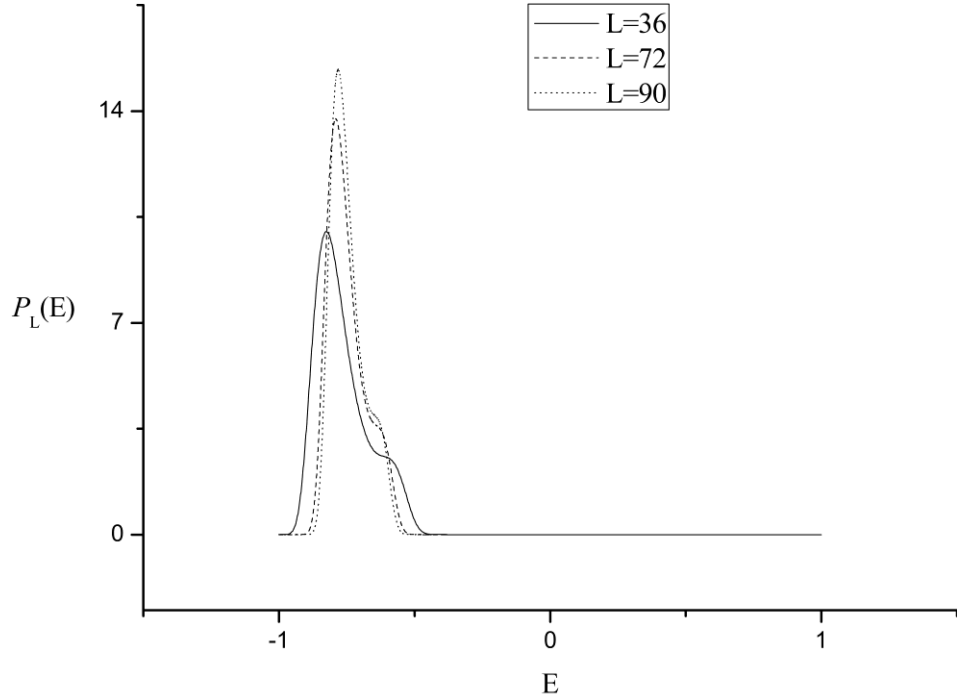
$$P_L(E) = L^x \tilde{P}[(E - E_0)L^y] \quad (7.29),$$

όπου η συνάρτηση κλιμάκωσης $\tilde{P}(\psi)$ ενδέχεται να είναι Παγκόσμια στα πλαίσια μας Κλάσης Οικουμενικότητας ενώ οι εκθέτες x και y πρέπει να συνδέονται με

τους κρίσιμους εκθέτες, αν και η ακριβής σχέση με αυτούς πρέπει να αναζητηθεί. Ο σταθερός όρος E_0 είναι η λεγόμενη «κεντρική τιμή» της ενέργειας, με άλλα λόγια η τιμή της ενέργειας ανά δεσμό η οποία βρίσκεται στο κέντρο της κατανομής της ενέργειας. Η υπόθεσή μας αυτή στηρίχθηκε στο γεγονός ότι παρόμοια συμπεριφορά, αλλά με μηδενική «κεντρική τιμή», εμφανίζει η κατανομή μαγνήτισης [22], η οποία όπως είδαμε υπακούει στη σχέση (7.6).



Διάγραμμα 7.20: Γραφική παράσταση $P_{L0} = f(E)$ στο μοντέλο Baxter-Wu, για $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$, $H = 0$ και $L = 72$, όπως προκύπτει από τα αποτελέσματα του νέου αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων.



Διάγραμμα 7.21: Γραφικές παραστάσεις $P_{L0} = f(E)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $L = 36$, $L = 72$, $L = 90$, $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και $H = 0$, όπως προκύπτουν από τα αποτελέσματα του νέου αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων. Τα στατιστικά σφάλματα παραλείπονται για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.

Αφού τίποτε ουσιαστικά δεν είναι γνωστό για τις ακριβείς τιμές των εκθετών x και y θα προσπαθήσουμε στη συνέχεια να τους συνδυάσουμε με επαρκώς τεκμηριωμένα αποτελέσματα της Θεωρίας Κλιμάκωσης Πεπερασμένου Μεγέθους (Finite-Size Scaling Theory) για την εσωτερική ενέργεια και τη θερμοχωρητικότητα [18] αλλά και να τους υπολογίσουμε μέσω αποτελεσμάτων κατάλληλων προσομοιώσεων Monte Carlo. Ξεκινάμε από το γεγονός ότι η $P_L(E)$ πρέπει να είναι κανονικοποιημένη [77], πράγμα που σημαίνει ότι

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P_L(E) dE = 1 \quad (7.30),$$

και ότι η k -τάξης στατιστική ροπή της ενέργειας προκύπτει από τη σχέση

$$\langle E^k \rangle_L = \int_{-\infty}^{+\infty} E^k P_L(E) dE \quad (7.31).$$

Φυσικά, όταν $k = 1$ παίρνουμε την εσωτερική ενέργεια

$$\langle E \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} E P_L(E) dE \quad (7.32).$$

Από τη θερμοδυναμική εξίσωση

$$\langle E \rangle = g + Ts - Hm \quad (7.33),$$

όπου g είναι η ελεύθερη ενέργεια κατά Gibbs και S είναι η εντροπία, αμφότερες ανά δεσμό, από τις σχέσεις κλιμάκωσης για την ελεύθερη ενέργεια κατά Gibbs και τη μαγνήτιση αλλά και τις σχέσεις μεταξύ των κρίσιμων εκθετών που εξηγήθηκαν αναλυτικά στο κεφάλαιο 2, έχουμε

$$\langle E \rangle = Ts + \tilde{g} L^{\frac{\alpha-2}{\nu}} + \tilde{m} L^{\frac{\beta(\delta+1)}{\nu}} \quad (7.34),$$

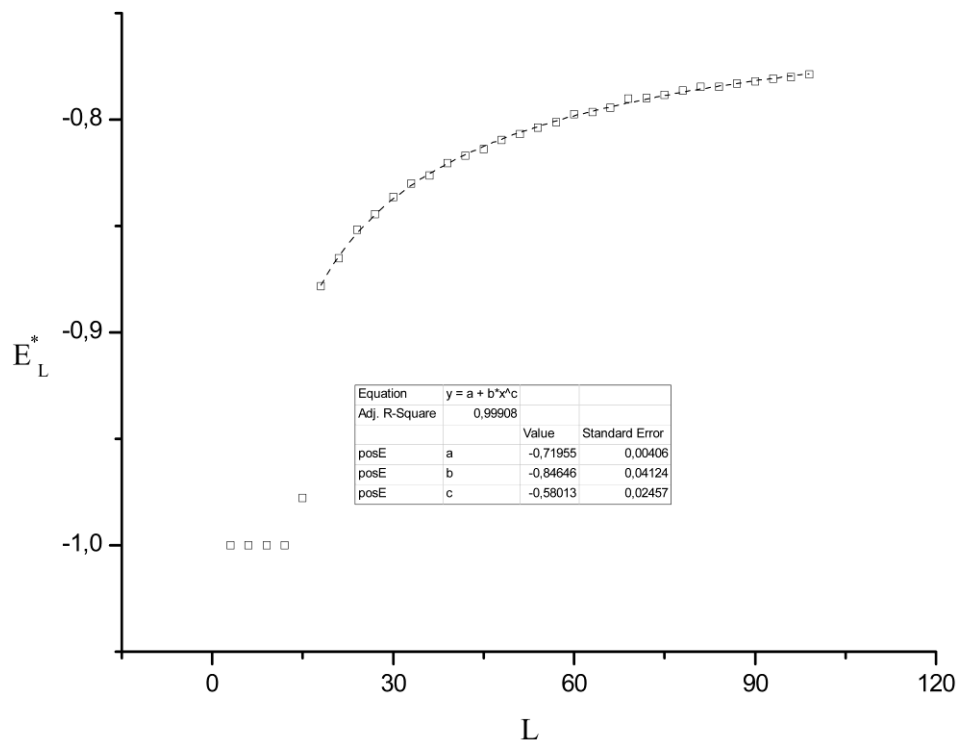
το οποίο σημαίνει

$$\langle E \rangle \approx E_{av} + (\tilde{g} + \tilde{m}) L^{\frac{\alpha-2}{\nu}} \approx E_{av} + (\tilde{g} + \tilde{m}) L^{-d} \quad (7.35).$$

Εδώ συμβολίζουμε με E_{av} τη μέση ενέργεια του άπειρου πλέγματος, ενώ $\tilde{g}$ και $\tilde{m}$ είναι οι αντίστοιχοι σταθεροί συντελεστές της δύναμης του L στις μαθηματικές εκφράσεις για την ελεύθερη ενέργεια κατά Gibbs και τη μαγνήτιση αντίστοιχα. Σημειώνουμε στο σημείο αυτό πως η τελευταία εξίσωση θεωρούμε ότι ισχύει κατά προσέγγιση ακόμα και αν η σχέση υπερκλιμάκωσης και η ανισότητες του Josephson δεν ισχύουν σαν ισότητες [3].

Για να ελέγξουμε την εγκυρότητα της βασικής προτεινόμενης εξίσωσης (7.29) στην περίπτωση του μοντέλου Baxter-Wu, στο διάγραμμα 7.22 παριστάνουμε γραφικά τις τιμές E_L^* που αντιστοιχούν στα μέγιστα της κατανομής ενέργειας ως προς το μέγεθος L του πλέγματος ενώ στο διάγραμμα 7.23 το λογάριθμο των μεγίστων P_{max} της κατανομής ενέργειας σε συνάρτηση με το λογάριθμο του μεγέθους L του πλέγματος για ανεξάρτητα παραλληλόγραμμα πλέγματα με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Στην πρώτη περίπτωση κάνουμε προσαρμογή (fitting) των αποτελεσμάτων μας στη συνάρτηση νόμου δύναμης (7.5) για $L \geq 18$, βρίσκοντας ότι ο σταθερός όρος είναι $-0,720 \pm 0,004$ ενώ ο εκθέτης $-0,58 \pm 0,02$. Ακολουθώντας τη μέθοδο προεκβολής (extrapolation) η οποία εξηγήθηκε στις προηγούμενες ενότητες, εύκολα διαπιστώνουμε ότι η ενεργειακή σταθερά E_0 συγκλίνει στην τιμή $-0,764 \pm 0,004$ ενώ η σύγκλιση του εκθέτη κλιμάκωσης γ δεν είναι ικανοποιητική. Εισάγοντας έναν επιπλέον όρο διόρθωσης τάξης L^{-4} στην αντίστοιχη σχέση κλιμάκωσης (7.5) προκύπτει τελικά για το E_0 η τιμή $-0,71 \pm 0,01$, ενώ για τον εκθέτη γ η τιμή $0,51 \pm 0,06$ περίπου

ιση με $\frac{d}{2} - \frac{\alpha}{2\nu} = \frac{1}{2}$ (βλέπε πίνακα 7.8). Σημειώνουμε ότι το συγκεκριμένο αποτέλεσμα είναι σε συμφωνία με όσα έχουν ήδη βρεθεί από άλλους ερευνητές για το ενεργειακό φάσμα του προτύπου ([93], [94], [95]). Στη δεύτερη περίπτωση, η κλίση η οποία υπολογίζεται από την ακολουθούμενη προεκβολή των αποτελεσμάτων της γραμμικής προσαρμογής (linear fitting) είναι $0,497 \pm 0,007$, σε καλή συμφωνία με την τιμή $\frac{d}{2} - \frac{\alpha}{2\nu} = \frac{1}{2}$, αφού οι κρίσιμοι εκθέτες α και ν παίρνουν τις τιμές που έχουν υπολογίσει αναλυτικά ο Baxter και άλλοι ερευνητές [29], δηλαδή $\alpha = \nu = \frac{2}{3}$ (δες διάγραμμα 7.23 και πίνακα 7.9). Εδώ θα πρέπει να τονιστεί πως η προτεινόμενη εξίσωση (7.29) χρειάζεται σημαντική τροποποίηση αν θέλουμε να περιγράψουμε πλέγματα με μέγεθος $L \leq 15$.



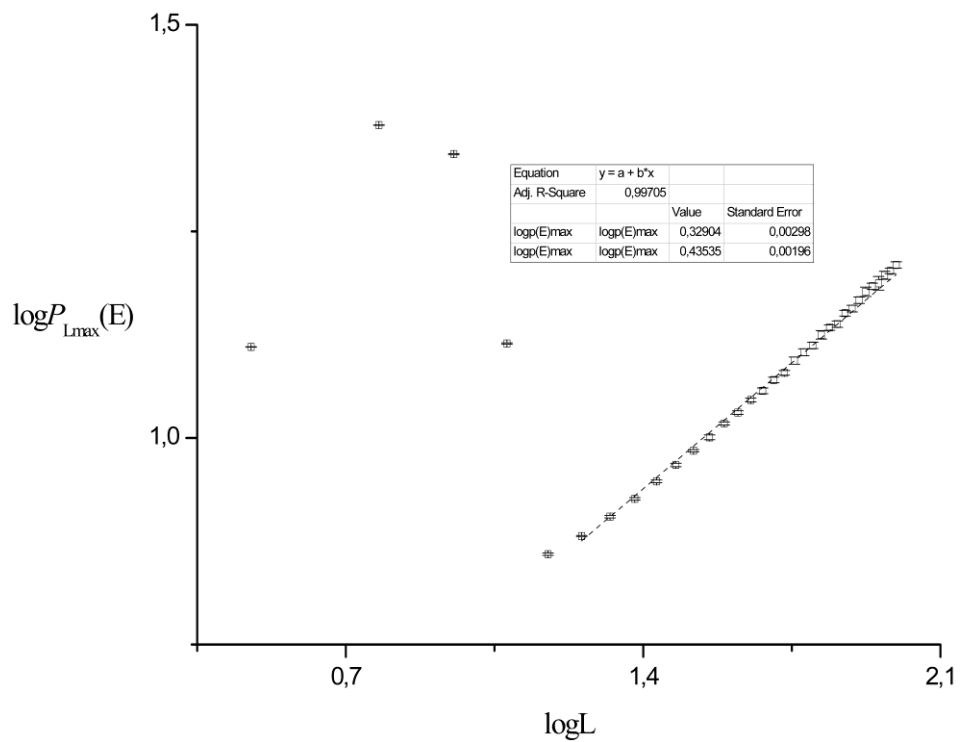
Διάγραμμα 7.22: Γραφική παράσταση των θέσεων του μεγίστου E_L^* της πυκνότητας πιθανότητας της ενέργειας σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για θερμοκρασία $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο (χρησιμοποιούμε όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu διαστάσεων από 3×6 έως 99×102 και περιοδικές συνοριακές συνθήκες).

Πίνακας 7.8: Πίνακας σύγκρισης των θέσεων του μεγίστου E_L^* της πυκνότητας πιθανότητας της

ενέργειας σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για θερμοκρασία $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$

και μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο (χρησιμοποιούμε όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu διαστάσεων από 3×6 έως 99×102 και περιοδικές συνοριακές συνθήκες).

L	E_{0L}	$ErrE_{0L}$	$ExponentE_{0L}$	$ErrExponentE_{0L}$
18- 99	-0,720	0,004	-0,58	0,02
21- 99	-0,717	0,005	-0,56	0,03
24- 99	-0,708	0,007	-0,51	0,04
27- 99	-0,712	0,008	-0,54	0,05
30- 99	-0,71	0,01	-0,52	0,06
33- 99	-0,72	0,01	-0,56	0,07
36- 99	-0,728	0,008	-0,66	0,08
39- 99	-0,73	0,01	-0,7	0,1
42- 99	-0,741	0,007	-0,8	0,1
45- 99	-0,748	0,006	-1,0	0,1
48- 99	-0,749	0,007	-1,0	0,2
51- 99	-0,755	0,006	-1,2	0,2
54- 99	-0,757	0,007	-1,2	0,3
57- 99	-0,758	0,008	-1,3	0,3



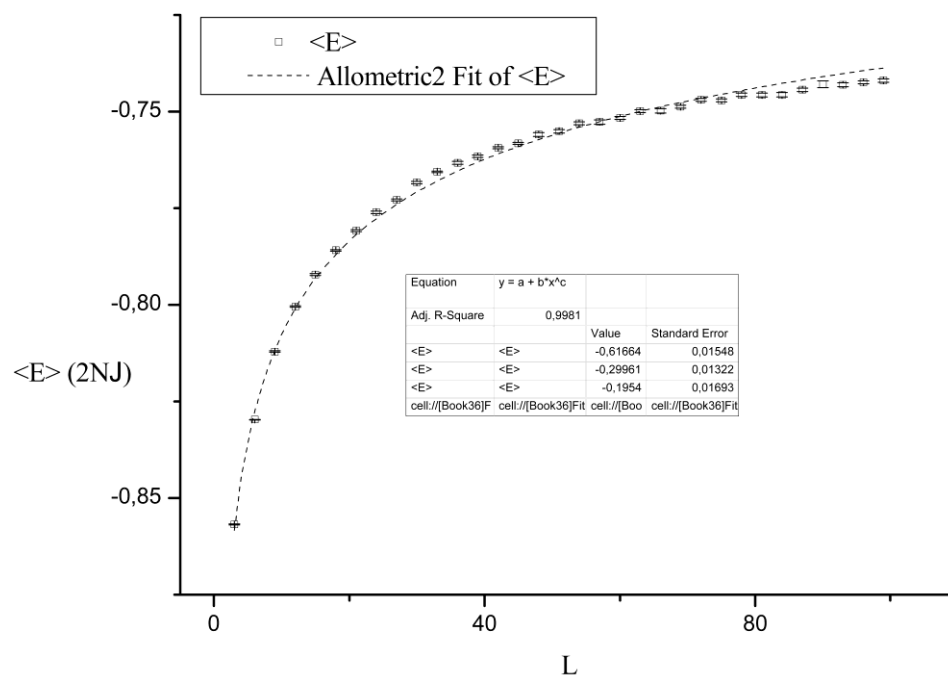
Διάγραμμα 7.23: Γραφική παράσταση του λογαρίθμου του μεγίστου $\log P_{Lmax}$ της πυκνότητας πιθανότητας της ενέργειας σε συνάρτηση με το λογάριθμο του μεγέθους L του πλέγματος για θερμοκρασία $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο (χρησιμοποιούμε όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu διαστάσεων από 3×6 έως 99×102 και περιοδικές συνοριακές συνθήκες).

Πίνακας 7.9: Πίνακας σύγκλισης της κλίσης του λογαρίθμου της μέγιστης τιμής της πυκνότητας πιθανότητας της ενέργειας $\log P_{Lmax}$ σε συνάρτηση με το λογάριθμο του μεγέθους L του πλέγματος για θερμοκρασία $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο (χρησιμοποιούμε όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu διαστάσεων από 3×6 έως 99×102 και περιοδικές συνοριακές συνθήκες).

L	Slope $\log P_{Lmax}$	Err Slope $\log P_{Lmax}$
15- 99	0,427	0,002
18- 99	0,435	0,002
21- 99	0,451	0,003
24- 99	0,458	0,003
27- 99	0,463	0,003
30- 99	0,466	0,004
33- 99	0,469	0,004
36- 99	0,474	0,005
39- 99	0,474	0,005
42- 99	0,479	0,006
45- 99	0,480	0,007
48- 99	0,488	0,009
51- 99	0,49	0,01
54- 99	0,49	0,01
57- 99	0,49	0,01
60- 99	0,49	0,02

Κατόπιν χρησιμοποιούμε δεδομένα από τις προσομοιώσεις Monte Carlo για να ελέγξουμε την αξιοπιστία της προσεγγιστικής εξίσωσης (7.35) για την εσωτερική ενέργεια στο κρίσιμο σημείο. Στο διάγραμμα 7.24 παριστάνουμε γραφικά τις μέσες τιμές της ενέργειας του συστήματος, οι οποίες αντιστοιχούν στην εσωτερική ενέργειά του, σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για ανεξάρτητα συστήματα και περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Στο πρώτο στάδιο εκτελούμε προσαρμογή (fitting) στα αποτελέσματά μας της μη γραμμικής συνάρτησης νόμου δύναμης (7.5) και ο σταθερός όρος προκύπτει ίσος με $-0,62 \pm 0,02$ ενώ ο εκθέτης γίνεται $-0,20 \pm 0,02$. Ακολουθώντας τη μέθοδο προεκβολής (extrapolation) η οποία εφαρμόστηκε και παραπάνω, είναι εύκολο να βρούμε ότι η εσωτερική ενέργεια του άπειρου συστήματος συγκλίνει στην τιμή $-0,71 \pm 0,2$, η οποία είναι περίπου ίση με τη θεωρητικά αναμενόμενη $-\frac{\sqrt{2}}{2}$ [29], ενώ ο αντίστοιχος κρίσιμος εκθέτης στην τιμή $-1,8 \pm 0,4$, μια τιμή στατιστικά ίση με τη διάσταση $d = 2$ του συστήματος (δες πίνακα 7.10). Όπως είναι φανερό, οι τιμές των E_0 και E_{av} είναι ίσες αν και από τα προαναφερθέντα προκύπτει πως το οικουμενικό τμήμα της κατανομής (7.29) στο κρίσιμο σημείο δεν είναι καμπύλη Gauss. Αυτό ακριβώς το αποτέλεσμα φαίνεται και στο διάγραμμα 7.25, όπου έχουν σχεδιαστεί από κοινού οι ενεργειακές ποσότητες

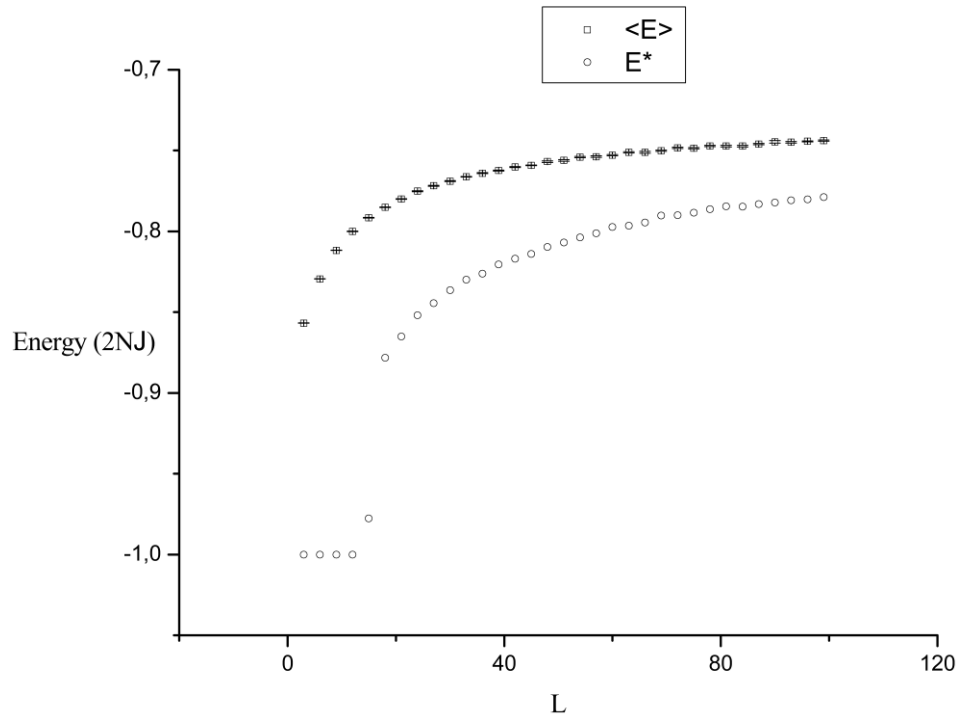
E_L^* και $\langle E \rangle_L$ συναρτήσει του L . Σημειώνουμε ότι στην περίπτωση της μέσης ενέργειας εργαστήκαμε για τη γνωστή κρίσιμη θερμοκρασία 2,269 και μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο.



Διάγραμμα 7.24: Γραφική παράσταση της μέσης τιμής της ενέργειας $\langle E \rangle$ σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για θερμοκρασία $\frac{k_B T}{J} = 2,269$ και μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο (χρησιμοποιούμε όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu διαστάσεων από 3×6 έως 99×102 και περιοδικές συνοριακές συνθήκες).

Πίνακας 7.10: Πίνακας σύγκρισης της μέσης τιμής της ενέργειας $\langle E \rangle$ σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για θερμοκρασία $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο (χρησιμοποιούμε όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu διαστάσεων από 3×6 έως 99×102 και περιοδικές συνοριακές συνθήκες).

L	E_{av}	$ErrE_{av}$	Exponent $\langle E \rangle$	ErrExponent $\langle E \rangle$
3- 99	-0.62	0.02	-0.20	0.02
6- 99	-0.680	0.003	-0.55	0.02
9- 99	-0.690	0.003	-0.69	0.02
12- 99	-0.697	0.003	-0.77	0.03
15- 99	-0.704	0.003	-0.87	0.03
18- 99	-0.708	0.003	-0.92	0.03
21- 99	-0.712	0.003	-0.98	0.04
24- 99	-0.713	0.003	-0.99	0.05
27- 99	-0.714	0.004	-1.06	0.06
30- 99	-0.701	0.007	-1.13	0.08
33- 99	-0.701	0.009	-1.2	0.1
36- 99	-0.708	0.009	-1.3	0.1
39- 99	-0.712	0.008	-1.5	0.2
42- 99	-0.72	0.01	-1.5	0.2
45- 99	-0.72	0.01	-1.8	0.2
48- 99	-0.70	0.03	-1.6	0.4
51- 99	-0.71	0.03	-1.8	0.4



Διάγραμμα 7.25: Κοινό διάγραμμα της μέσης τιμής της ενέργειας $\langle E \rangle$ και της θέσης μεγίστου της κατανομής ενέργειας E^* σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο και θερμοκρασία $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ αντίστοιχα (χρησιμοποιούμε όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu διαστάσεων από 3×6 έως 99×102 και περιοδικές συνοριακές συνθήκες).

7.7 Ο κρίσιμος σωρευτής Binder της ενέργειας

Ένα επιπλέον σημαντικό σημείο της έρευνάς μας είναι ο ανηγμένος σωρευτής 4^{ης} τάξης του Binder (reduced 4th order Binder cumulant) V_{L0} για την ενέργεια. Η εξίσωση ορισμού του, όπως είδαμε στην §3.5 είναι [24]

$$V_{L0} = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle_L}{3 \langle E^2 \rangle_L^2} \quad (7.36).$$

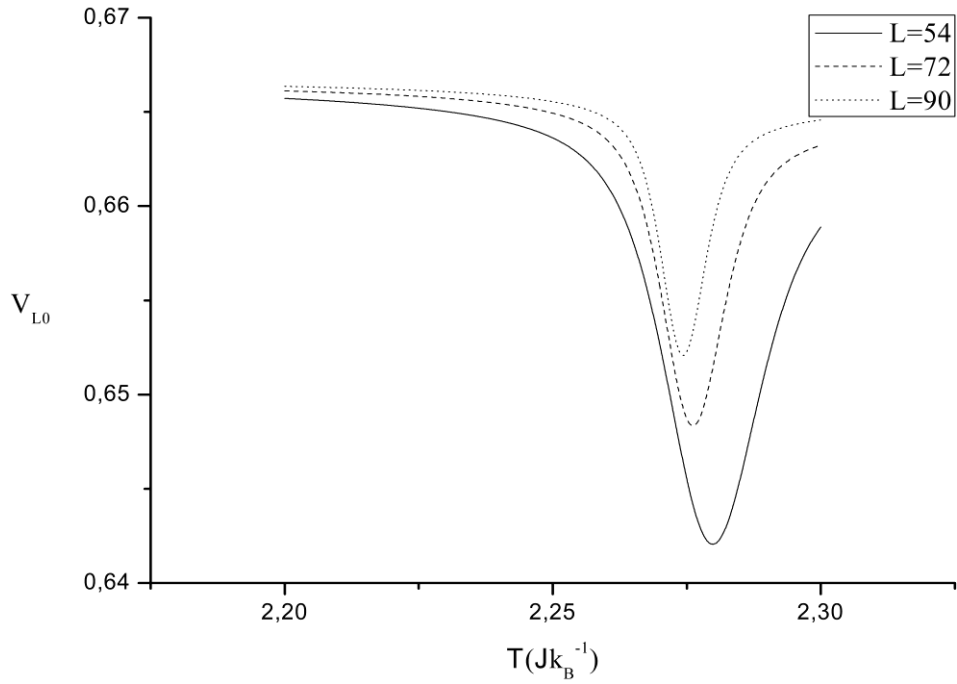
Ο σωρευτής αυτός είναι ανάλογος του αντίστοιχου για τη μαγνήτιση. Αν και το μέγεθος αυτό δε φαίνεται να έχει κάποια προφανή πειραματική σημασία, είναι μια ιδιαίτερα χρήσιμη ποσότητα στις υπολογιστικές προσομοιώσεις φυσικών συστημάτων, αφού συμπεριφέρεται εντελώς διαφορετικά στην περίπτωση αλλαγών φάσης πρώτου ή δεύτερου είδους [17].

Στο διάγραμμα 7.26 απεικονίζονται οι μεταβολές του σωρευτή V_{L0} με τη θερμοκρασία υπό μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο για τρία διαφορετικά

πλεγματικά μεγέθη. Ως γνωστόν, μακριά από σημεία αλλαγών φάσης και καθώς το μέγεθος L του πλέγματος αυξάνει, ο σωρευτής τείνει στην αναμενόμενη τιμή $\frac{2}{3}$, αφού σε αυτές τις συνθήκες και για μεγάλες τιμές του L η κατανομή της ενέργειας είναι πρακτικά Gaussian, οπότε $\langle E^4 \rangle_L = \langle E^2 \rangle_L^2$. Κοντά σε ένα κρίσιμο σημείο ο σωρευτής V_{L0} παρουσιάζει ένα χαρακτηριστικό ελάχιστο, η τιμή του οποίου αυξάνει με το πλεγματικό μέγεθος L . Η θερμοκρασία αυτού του ελαχίστου T_{0L} δεν είναι η ίδια με εκείνη του μεγίστου της θερμοχωρητικότητας αλλά αναμένεται αμφότερες να συγκλίνουν στην κρίσιμη θερμοκρασία ακολουθώντας κάποια σχέση κλιμάκωσης καθώς το πλεγματικό μέγεθος L αυξάνει. Η ερευνητική ομάδα Κρισίμων Φαινομένων και Στατιστικής Φυσικής του τμήματος Φυσικής του Πανεπιστημίου Αθηνών ισχυρίστηκε [46] ότι η διαφορά της ελάχιστης τιμής $V_{L0}^{\min}$ του σωρευτή της ενέργειας από το $\frac{2}{3}$ ακολουθεί τη σχέση κλιμάκωσης

$$\frac{2}{3} - V_{L0}^{\min} = L^{-d+\frac{\alpha}{\nu}} \tilde{V}(tL^{\frac{1}{\nu}}) \quad (7.37),$$

όπου t είναι η ανηγμένη θερμοκρασία που είδαμε στο κεφάλαιο 2, με την τιμή T_{0L} στη θέση της απόλυτης θερμοκρασίας T . Η σχέση αυτή, αν και υποστηρίζεται από τα αποτελέσματα προσομοιώσεων Monte Carlo, δεν είχε ως τώρα αποδειχτεί, αν και προκύπτει με έμμεσο τρόπο από τα αποτελέσματα της επιστημονικής εργασίας των Challa, Landau και Binder [24].



Διάγραμμα 7.26: Γραφικές παραστάσεις $V_{L0} = f(T)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $L = 54$, $L = 72$, $L = 90$, $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και $H = 0$, όπως προκύπτουν από τα αποτελέσματα του νέου αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων. Τα στατιστικά σφάλματα παραλείπονται για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.

Για να την αποδείξουμε θα στηριχτούμε στις σχέσεις (7.30), (7.31), (7.32) και στην προσέγγιση (7.35) της προηγούμενης ενότητας. Ξεινάμε με την αντικατάσταση

$$u = (E_0 - E)L^y \quad (7.38),$$

οπότε οι εξισώσεις (7.30), (7.31) και (7.32) γράφονται αντίστοιχα

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{P}(u) du = L^{y-x} \quad (7.39),$$

$$\langle E^k \rangle = L^{x-y} \int_{-\infty}^{+\infty} (E_0 + uL^{-y})^k \tilde{P}(u) du \quad (7.40),$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (E_0 + uL^{-y}) \tilde{P}(u) du = L^{y-x} \langle E \rangle \quad (7.41).$$

Αξιοποιώντας τώρα την προσέγγιση (7.35) παίρνουμε

$$\int_{-\infty}^{+\infty} u \tilde{P}(u) du = (E_{av} - E_0) L^{2y-x} + (\tilde{g} + \tilde{m}) L^{2y-x-d} \quad (7.42).$$

Αναπτύσσοντας σε σειρές Taylor τη μαθηματική έκφραση (7.38) και κρατώντας μόνο τους τρεις πρώτους όρους έχουμε

$$\langle E^k \rangle \approx L^{x-y} E_0^k \int_{-\infty}^{+\infty} \left[1 + \frac{kuL^{-y}}{E_0} + \frac{k(k-1)}{2} \frac{u^2 L^{-2y}}{E_0^2} \right] \tilde{P}(u) du \quad (7.43),$$

$$\langle E^k \rangle \approx E_0^k + k E_0^{k-1} L^{x-2y} \int_{-\infty}^{+\infty} u \tilde{P}(u) du + \frac{k(k-1)}{2} E_0^{k-2} L^{x-3y} \int_{-\infty}^{+\infty} u^2 \tilde{P}(u) du \quad (7.44).$$

Για $k = 2$ ο τύπος (7.44) γράφεται

$$\langle E^2 \rangle \approx E_0^2 + 2 E_0 L^{x-2y} \int_{-\infty}^{+\infty} u \tilde{P}(u) du + L^{x-3y} \int_{-\infty}^{+\infty} u^2 \tilde{P}(u) du \quad (7.45).$$

Χρησιμοποιώντας την (7.35) έχουμε

$$\langle E^2 \rangle \approx E_0^2 + 2 E_0 (E_{av} - E_0) + 2 E_0 (\tilde{g} + \tilde{m}) L^{-d} + L^{x-3y} \int_{-\infty}^{+\infty} u^2 \tilde{P}(u) du \quad (7.46).$$

Τώρα, από την εξίσωση για τη θερμοχωρητικότητα (7.28) παίρνουμε τον τύπο

$$c_L \approx \frac{L^{x-3y+d}}{T^2} \int_{-\infty}^{+\infty} u^2 \tilde{P}(u) du - \frac{L^d \langle E \rangle^2}{T^2} \quad (7.47),$$

ο οποίος γίνεται

$$L^{x-3y} \int_{-\infty}^{+\infty} u^2 \tilde{P}(u) du \approx (E_{av} - E_0)^2 + [2 E_{av} (\tilde{g} + \tilde{m}) + c_L T^2] L^{-d} + (\tilde{g} + \tilde{m})^2 L^{-2d} \quad (7.48).$$

Εδώ θα πρέπει να τονιστεί ότι τελικά η παραπάνω προσέγγιση είναι ανεξάρτητη από το είδος του μοντέλου ή την Κλάση Παγκοσμιότητας στην οποία αυτό ανήκει. Επομένως τα ανωτέρω αποτελέσματα αναμένεται να ισχύουν όχι μόνο για το μοντέλο Baxter-Wu, το οποίο μελετάται στην παρούσα διατριβή, αλλά επίσης και σε κάθε άλλη περίπτωση στην οποία εφαρμόζεται η Θεωρία Κλιμάκωσης Πεπερασμένου Μεγέθους (Finite-Size Scaling Theory).

Στηριγμένοι στους τύπους (7.42), (7.43), (7.46) και (7.48) παίρνουμε με προάξεις

$$\langle E^2 \rangle \approx E_{av}^2 + c_L T^2 L^{-d} + 2(E_{av} + E_0)(\tilde{g} + \tilde{m})L^{-d} + (\tilde{g} + \tilde{m})^2 L^{-2d} \quad (7.49),$$

$$\langle E^4 \rangle \approx E_0^4 + 4E_0^3 L^{x-2y} \int_{-\infty}^{+\infty} u \tilde{P}(u) du + 6L^{x-3y} E_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} u^2 \tilde{P}(u) du \quad (7.50),$$

$$\langle E^4 \rangle \approx E_0^4 + 4E_0^3 (E_{av} - E_0) + 4E_0^3 (\tilde{g} + \tilde{m})L^{-d} + 6L^{x-3y} E_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} u^2 \tilde{P}(u) du \quad (7.51),$$

$$\begin{aligned} \langle E^4 \rangle \approx & E_0^4 + 4E_0^3 (E_{av} - E_0) + 6E_0^2 c_L T^2 L^{-d} + 6E_0^2 (E_{av} - E_0)^2 + \\ & + 12E_0^2 (E_{av} - E_0)(\tilde{g} + \tilde{m})L^{-d} + 4E_0^3 (\tilde{g} + \tilde{m})L^{-d} + 6E_0^2 (\tilde{g} + \tilde{m})^2 L^{-2d} \end{aligned} \quad (7.52),$$

$$\begin{aligned} \langle E^4 \rangle \approx & E_0^2 (3E_0^2 - 8E_{av} E_0 + 6E_{av}^2) + 6E_0^2 c_L T^2 L^{-d} + \\ & + 12E_0^2 (E_{av} - E_0)(\tilde{g} + \tilde{m})L^{-d} + 4E_0^3 (\tilde{g} + \tilde{m})L^{-d} + 6E_0^2 (\tilde{g} + \tilde{m})^2 L^{-2d} \end{aligned} \quad (7.53).$$

Χρησιμοποιώντας τη μαθηματική έκφραση της Θεωρίας Κλιμάκωσης Πεπερασμένου Μεγέθους για τη θερμοχωρητικότητα [18] στο κρίσιμο σημείο από το κεφάλαιο 2 και κρατώντας μόνο τους όρους για τους οποίους οι εκθέτες του μεγέθους L είναι μεγαλύτεροι, βρίσκουμε

$$\langle E^2 \rangle \approx E_{av}^2 + c_L T^2 L^{-d} \quad (7.54),$$

$$\langle E^4 \rangle \approx E_0^2 (3E_0^2 - 8E_{av} E_0 + 6E_{av}^2) + 6E_0^2 c_L T^2 L^{-d} \quad (7.55).$$

Έτσι, η εξίσωση (7.55) γράφεται

$$V_{L0} \approx 1 - \frac{E_0^2 (3E_0^2 - 8E_{av} E_0 + 6E_{av}^2) + 6E_0^2 c_L T^2 L^{-d}}{3(E_{av}^2 + c_L T^2 L^{-d})^2} \quad (7.56).$$

Εισάγοντας εκ νέου τη μαθηματική έκφραση της Θεωρίας Κλιμάκωσης Πεπερασμένου Μεγέθους για τη θερμοχωρητικότητα στο κρίσιμο σημείο από το κεφάλαιο 2 και με τη βοήθεια αναπτυγμάτων Taylor καταλήγουμε στην εξίσωση

$$V_{L0} = V_0^* + V_{01} \tilde{c} T^2 L^{-d+\frac{\alpha}{\nu}} + O(L^{-d}) + O\left(L^{-2d+\frac{2\alpha}{\nu}}\right) \quad (7.57),$$

όπου

$$V_{01} \approx -\frac{2E_0^2}{E_{av}^4} + (3E_0^2 - 8E_{av}E_0 + 6E_{av}^2) \frac{2E_0^2}{3E_{av}^6} \quad (7.58)$$

και

$$V_0^* \approx 1 - (3E_0^2 - 8E_{av}E_0 + 6E_{av}^2) \frac{E_0^2}{3E_{av}^4} \quad (7.59).$$

Εδώ $\tilde{C}$ είναι ο σταθερός συντελεστής της δύναμης του L στην αντίστοιχη μαθηματική έκφραση της θερμοχωρητικότητας. Ο τύπος (7.57) είναι όμοιος με τον (7.37) αλλά με κατάλληλους όρους διορθώσεων κλιμάκωσης. Μόνη εξαίρεση είναι η οριακή τιμή V_0^* . Λαμβάνοντας όμως υπόψη την ισότητα των E_0 και E_{av}

με την τιμή $-\frac{\sqrt{2}}{2}$, όπως είδαμε στην §7.6, αντίστοιχα, αυτή προκύπτει τελικά ίση με $\frac{2}{3}$. Έτσι η (7.57) παίρνει τη μορφή

$$V_{L0} = \frac{2}{3} - \frac{4\tilde{C}T^2}{3E_0^2} L^{-d+\frac{\alpha}{v}} + O(L^{-d}) + O\left(L^{-2d+\frac{2\alpha}{v}}\right) \quad (7.60),$$

η οποία ταυτίζεται με την (7.37), ενώ ο συντελεστής της μεγαλύτερης δύναμης του L παίρνει αρνητικές τιμές.

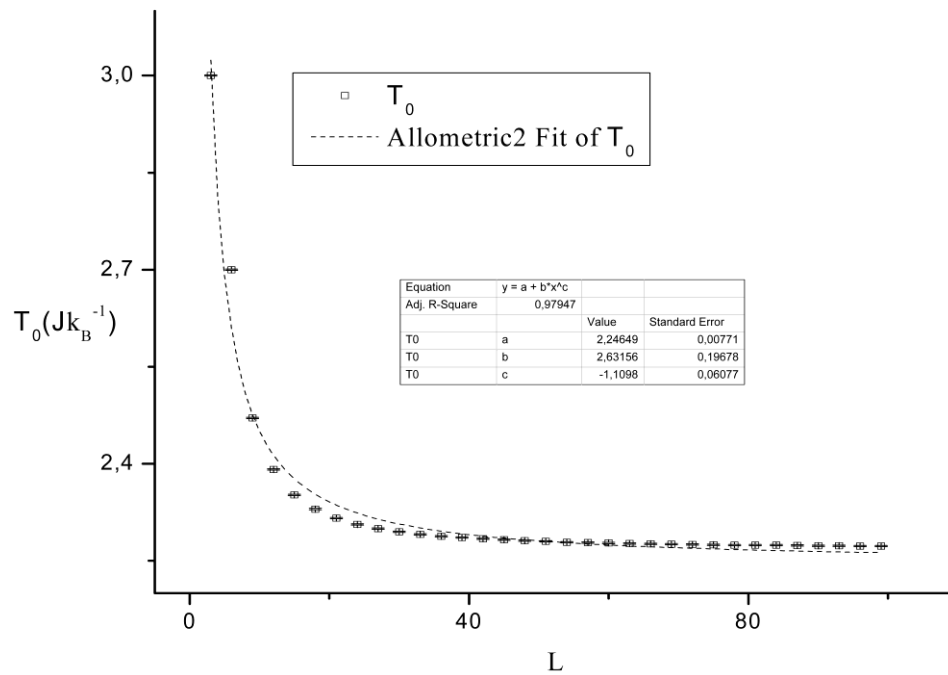
Στη συνέχεια ελέγχουμε τα παραπάνω αποτελέσματα με τη βοήθεια προσομοιώσεων Monte Carlo. Χρησιμοποιούμε για το σκοπό αυτόν τα αποτελέσματα που προέκυψαν από τις παραπάνω προσομοιώσεις σε ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu και περιοδικές συνοριακές συνθήκες, σε συνδυασμό με τη μέθοδο του μονού ιστογράμματος [16] ώστε να έχουμε εικόνα της συμπεριφοράς του σωρευτή της ενέργειας V_{L0} για θερμοκρασίες σχετικά κοντά στην κρίσιμη και μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Στο διάγραμμα (7.27) φαίνεται ότι ο σωρευτής παρουσιάζει ολικό ελάχιστο για μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο και θερμοκρασίες σχετικά κοντά στην κρίσιμη. Στο διάγραμμα (7.28) παριστάνονται γραφικά οι θερμοκρασίες T_{0L} αυτού του ελαχίστου σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος. Από τη σχέση (7.37) είναι προφανές ότι η T_{0L} πρέπει να προσεγγίζει την κρίσιμη θερμοκρασία T_c με νόμο δύναμης

$L^{-\frac{1}{v}}$, δηλαδή ότι η θερμοκρασία T_{0L} συμπεριφέρεται καθώς αυξάνει το L όπως ακριβώς και η ψευδοκρίσιμη θερμοκρασία για την οποία παρατηρείται η μέγιστη τιμή της θερμοχωρητικότητας. Αυτό εξετάζεται με την προσρμογή (fitting) της θερμοκρασίας του ελαχίστου T_{0L} απουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου για διάφορες τιμές του πλεγματού μεγέθους L στη συνάρτηση (7.5). Έτσι προκύπτει για την κρίσιμη θερμοκρασία η τιμή $2,246 \pm 0,008$, αρκετά διαφορετική από την κρίσιμη, ενώ από την άλλη, η τιμή του εκθέτη w προκύπτει

$1,11 \pm 0,06$, η οποία διαφέρει αισθητά από τον αντίστροφο κρίσιμο εκθέτη του μήκους συσχέτισης ν . Στο σημείο αυτό επαναλαμβάνουμε την ήδη γνωστή διαδικασία προεκβολής (βλέπε διάγραμμα 7.27 και πίνακα 7.11). Τα αποτελέσματά μας μάλιστα τα αντιπαραβάλλουμε με εκείνα που προκύπτουν από την προσαρμογή μιας πιο σύνθετης μη γραμμικής συνάρτησης, της

$$y = a L^w + b L^{-2} + c \quad (7.61).$$

Με αυτήν τη συνάρτηση, όπως και με παρόμοιες που έχουν χρησιμοποιηθεί στη βιβλιογραφία [46], επιτυγχάνεται μια καλύτερη εκτίμηση της κρίσιμης θερμοκρασίας T_c όπως και του εκθέτη w . Προκύπτει ότι η κρίσιμη θερμοκρασία είναι ίση με $2,269 \pm 0,001$ ενώ ο αντίστοιχος εκθέτης ίσος με $-1,6 \pm 0,1$, τιμή που είναι πλησιέστερη στη θεωρητικά αναμενόμενη [29] $-\frac{1}{\nu} = -1,5$.

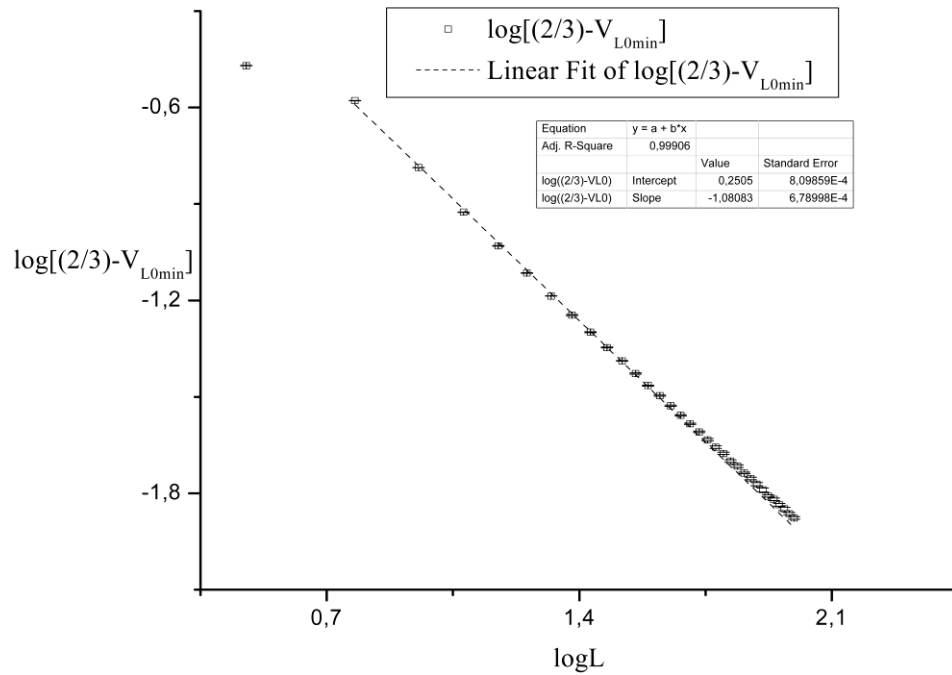


Διάγραμμα 7.27: Γραφική παράσταση της θερμοκρασίας του ελαχίστου $T_0 = f(L)$ του σωρευτή του Binder V_{L0} στο μοντέλο Baxter-Wu υπό μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του νέου αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων (χρησιμοποιούμε όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu διαστάσεων από 3×6 έως 99×102 και περιοδικές συνοριακές συνθήκες).

Πίνακας 7.11: Πίνακας σύγκρισης της θερμοκρασίας ελάχιστου του σωρευτή ενέργειας T_{0L} σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος υπό μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο.

L	T_{0L}	$ErrT_{0L}$	w	$Errw$
3- 99	2,246	0,008	-1,11	0,06
6- 99	2,2711	0,0003	-1,825	0,009
9- 99	2,26992	0,00009	-1,740	0,004
12- 99	2,26966	0,00007	-1,716	0,005
15- 99	2,26951	0,00008	-1,700	0,006
18- 99	2,26945	0,00009	-1,691	0,009
21- 99	2,2693	0,0004	-1,67	0,01
24- 99	2,2691	0,0004	-1,64	0,01
27- 99	2,26932	0,00008	-1,68	0,01
30- 99	2,2692	0,0001	-1,66	0,02
33- 99	2,2692	0,0001	-1,66	0,02
36- 99	2,2693	0,0001	-1,68	0,03
39- 99	2,2694	0,0002	-1,69	0,03
42- 99	2,2693	0,0002	-1,69	0,05
45- 99	2,2694	0,0002	-1,70	0,06
48- 99	2,2692	0,0003	-1,65	0,08
51- 99	2,2694	0,0004	-1,7	0,1
54- 99	2,2692	0,0005	-1,6	0,1
57- 99	2,2696	0,0005	-1,8	0,2
60- 99	2,2695	0,0007	-1,7	0,2
63- 99	2,269	0,001	-1,5	0,3
66- 99	2,270	0,001	-1,8	0,4
69- 99	2,269	0,002	-1,5	0,5

Στο διάγραμμα 7.28 παριστάνουμε γραφικά το λογάριθμο της ποσότητας $\left(\frac{2}{3} - V_{L0min}\right)$, όπου V_{L0min} η ελάχιστη τιμή του σωρευτή της ενέργειας απουσία μαγνητικού πεδίου, σε συνάρτηση με το λογάριθμο του μεγέθους L του πλέγματος για ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 99×102 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Προσαρμόζοντας τα σημεία που προκύπτουν στην κατάλληλη εξίσωση ευθείας, εκτός του πρώτου, το οποίο εμφανώς δεν ανήκει στην ίδια ευθεία με τα υπόλοιπα, προκύπτει για την κλίση η τιμή $-1,0808 \pm 0,0007$. Αυτή διαφέρει σημαντικά από την αναμενόμενη θεωρητικά $-d + \frac{\alpha}{v} = -1$. Επαναλαμβάνοντας τη γνωστή διαδικασία προεκβολής (βλέπε πίνακα 7.12) καταλήγουμε στην τιμή $-1,02 \pm 0,02$, η οποία είναι ίση με τη θεωρητικά αναμενόμενη, στα πλαίσια φυσικά του στατιστικού σφάλματος.



Διάγραμμα 7.28: Γραφική παράσταση του $\log\left(\frac{2}{3} - V_{L0min}\right)$ σε συνάρτηση με το λογάριθμο

του μεγέθους L του πλέγματος για ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 99×102 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Όλες οι προσομοιώσεις έχουν πραγματοποιηθεί με τον καινούριο αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων στο κρίσιμο σημείο.

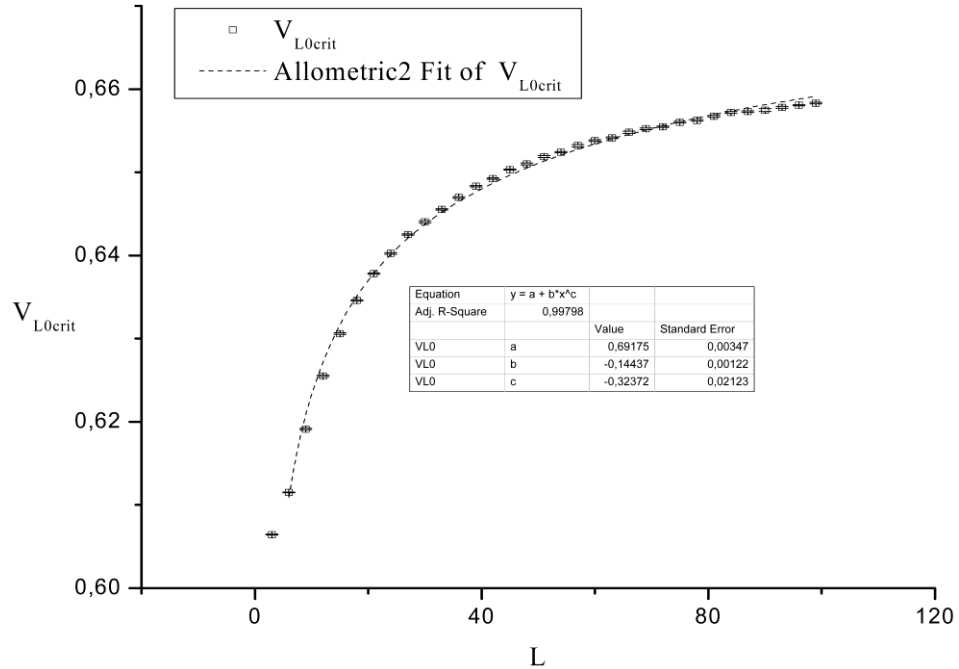
Πίνακας 7.12: Πίνακας σύγκρισης της του $\log\left(\frac{2}{3} - V_{L0min}\right)$ σε συνάρτηση με το λογάριθμο

του μεγέθους L του πλέγματος υπό μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο.

L	$\text{Slope } \log\left(\frac{2}{3} - V_{L0min}\right)$	$\text{ErrSlope } \log\left(\frac{2}{3} - V_{L0min}\right)$
6- 99	-1,0808	0,0007
9- 99	-1,0524	0,0009
12- 99	-1,045	0,001
15- 99	-1,035	0,001
18- 99	-1,031	0,002
21- 99	-1,029	0,002
24- 99	-1,028	0,003
27- 99	-1,027	0,003
30- 99	-1,027	0,003
33- 99	-1,027	0,004
36- 99	-1,023	0,005
39- 99	-1,022	0,005
42- 99	-1,023	0,006
45- 99	-1,021	0,007
48- 99	-1,020	0,008
51- 99	-1,020	0,009
54- 99	-1,02	0,01
57- 99	-1,03	0,01
60- 99	-1,02	0,02
63- 99	-1,02	0,02
66- 99	-1,02	0,02
69- 99	-1,02	0,02

Για την περαιτέρω επαλήθευση των μαθηματικών εκφράσεων (7.57) και (7.60) εργαζόμαστε στο κρίσιμο σημείο μηδενικού εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Αξιοποιώντας τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων Monte Carlo με το νέο αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων κατασκευάζουμε το διάγραμμα των τιμών του σωρευτή V_{L0} της ενέργειας σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος (βλέπε διάγραμμα 7.29). Η προσαρμογή της συνάρτησης (7.5) σε όλα τα σημεία του διαγράμματος 7.29, εκτός από το πρώτο, δίνει αποτέλεσμα για την οριακή τιμή V_0^* του σωρευτή $0,692 \pm 0,003$, ενώ για τον εκθέτη του μεγέθους L του πλέγματος $-0,32 \pm 0,02$. Τόσο η μια όσο και η άλλη διαφέρουν αρκετά από τις θεωρητικά αναμενόμενες, οπότε καταφεύγουμε για μια φορά ακόμα στη γνωστή μέθοδο προεκβολής (extrapolation). Με αυτήν (βλέπε πίνακα 7.13) καταλήγουμε στην τιμή $0,667 \pm 0,001$, δηλαδή $\frac{2}{3}$ για το V_0^* , ενώ για τον

εκθέτη στη $-0,9 \pm 0,1$, η οποία είναι ίση με τη θεωρητικά αναμενόμενη $-d + \frac{\alpha}{v} = -1$, στα πλαίσια φυσικά του στατιστικού σφάλματος.



Διάγραμμα 7.29: Γραφική παράσταση του σωρευτή του Binder V_{L0} σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 99×102 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Όλες οι προσομοιώσεις έχουν πραγματοποιηθεί με τον καινούριο αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων στο κρίσιμο σημείο.

Πίνακας 7.13: Πίνακας σύγκλισης του σωρευτή της ενέργειας V_{L0} σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος σε θερμοκρασία $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο.

L	V_{L00}	Err V_{L00}	w	Errw
6- 99	0,692	0,003	-0,32	0,02
9- 99	0,678	0,001	-0,47	0,01
12- 99	0,6746	0,0006	-0,53	0,01
15- 99	0,6732	0,0005	-0,56	0,01
18- 99	0,6727	0,0005	-0,58	0,01
21- 99	0,6720	0,0006	-0,60	0,02
24- 99	0,6711	0,0007	-0,63	0,02
27- 99	0,6706	0,0008	-0,64	0,03
30- 99	0,6690	0,0007	-0,71	0,03
33- 99	0,6688	0,0006	-0,73	0,03
36- 99	0,6692	0,0009	-0,70	0,04
39- 99	0,670	0,001	-0,69	0,05
42- 99	0,669	0,001	-0,71	0,06
45- 99	0,668	0,002	-0,8	0,1
48- 99	0,668	0,002	-0,8	0,1
51- 99	0,667	0,002	-0,8	0,1
54- 99	0,670	0,004	-0,7	0,2
57- 99	0,670	0,005	-0,7	0,2
60- 99	0,666	0,003	-1,0	0,3
63- 99	0,668	0,006	-0,8	0,4

Με σκοπό ένα δεύτερο έλεγχο των αποτελεσμάτων μας επαναλαμβάνουμε την παραπάνω προεκβολή για το διάγραμμα $\log\left(\frac{2}{3} - V_{L0\text{critical}}\right) = f(\log L)$ στο κρίσιμο σημείο, το οποίο είναι με καλή προσέγγιση ευθεία για μεγάλες τιμές του μεγέθους L του πλέγματος (βλέπε πίνακα 7.14). Από τη διαδικασία αυτή η κλίση της ευθείας προκύπτει $-0,9 \pm 0,1$, αποτέλεσμα που είναι σε καλή συμφωνία τόσο με τα παραπάνω όσο και με το θεωρητικά αναμενόμενο, δηλαδή $-d + \frac{\alpha}{\nu} = -1$. Τα τελευταία αποτελέσματα επιβεβαιώνουν τις μαθηματικές εκφράσεις (7.57) και (7.60) του σωρευτή του Binder για την ενέργεια στο κρίσιμο σημείο, τουλάχιστον ως προς τους δυο πρώτους όρους.

Πίνακας 7.14: Πίνακας σύγκλισης της κλίσης του $\log\left(\frac{2}{3} - V_{L0\text{critical}}\right)$ σε συνάρτηση με το λογάριθμο του μεγέθους L του πλέγματος στο κρίσιμο σημείο.

L	Slope $\log\left(\frac{2}{3} - V_{L0critical}\right)$	ErrSlope $\log\left(\frac{2}{3} - V_{L0critical}\right)$
3- 99	-0,486	0,002
6- 99	-0,607	0,002
9- 99	-0,696	0,003
12- 99	-0,736	0,004
15- 99	-0,756	0,005
18- 99	-0,767	0,006
21- 99	-0,789	0,007
27- 99	-0,806	0,009
30- 99	-0,82	0,01
33- 99	-0,83	0,01
36- 99	-0,84	0,01
39- 99	-0,84	0,02
42- 99	-0,84	0,02
45- 99	-0,85	0,02
48- 99	-0,85	0,02
51- 99	-0,87	0,03
54- 99	-0,87	0,03
57- 99	-0,87	0,04
60- 99	-0,87	0,04
63- 99	-0,87	0,05
66- 99	-0,88	006
69- 99	-0,87	0,07
72- 99	-0,88	0,07
75- 99	-0,89	0,09
78- 99	-0,9	0,1
81- 99	-0,9	0,1

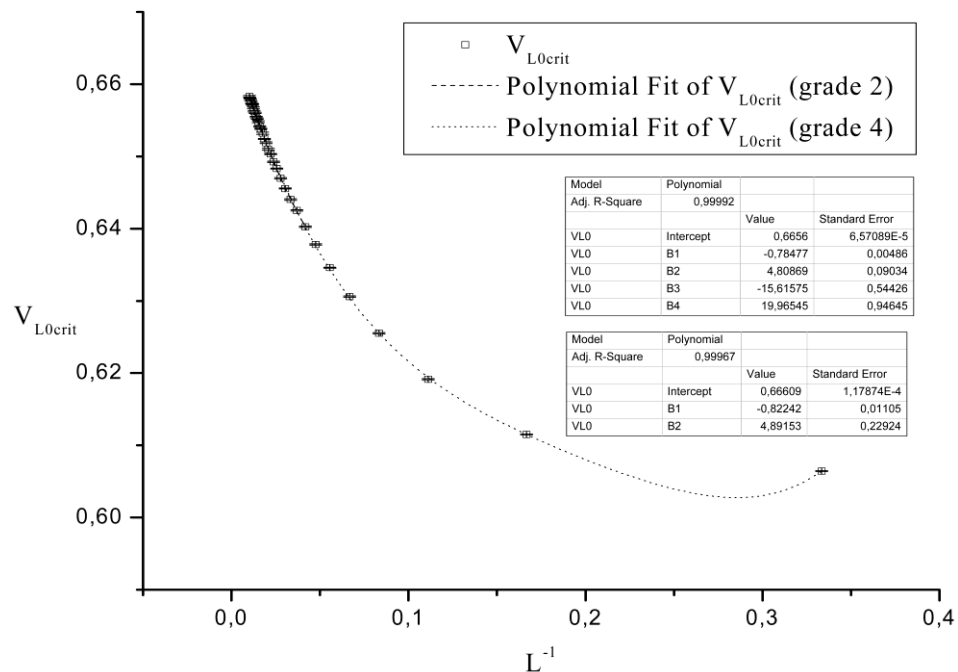
Ωστόσο η ισχυρότερη επιβεβαίωση της θεωρίας μας απαιτεί και τον έλεγχο κάποιων όρων ανώτερης τάξης. Αφού όμως στο δοσμένο κρίσιμο σημείο

ισχύει $\frac{\alpha}{v} = 1$ ενώ $d = 2$ (η διάσταση του συστήματος), όλοι οι εκθέτες στις (7.57)

και (7.60) αναμένεται να είναι ακέραιοι, είτε άρτιοι είτε περιττοί. Έτσι παριστάνουμε γραφικά τις τιμές του ενεργειακού σωρευτή V_{L0} ως προς το αντίστροφο του μεγέθους L του πλέγματος (δες διάγραμμα 7.30) για ανεξάρτητα πλέγματα με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Στα σημεία που προκύπτουν προσαρμόζουμε ενδεικτικά πολυώνυμα 2^{ου} βαθμού και 4^{ου} βαθμού, οπότε ο σταθερός όρος προκύπτει αντίστοιχα ίσος με $0,6661 \pm 0,0001$ και $0,66560 \pm 0,00007$ (δες διάγραμμα 7.30), ενώ οι συντελεστές προσδιορισμού (R^2) είναι αντίστοιχα 99,967% και 99,992%. Επίσης οι πρωτοβάθμιοι όροι και στα δυο πολυώνυμα πρακτικά ταυτίζονται. Τονίζουμε ότι αν οι εκθέτες δεν κρατηθούν σταθεροί, είναι πρακτικά αδύνατον να προκύψει σύγκλιση και αυτό

ισχύει ανεξάρτητα με το ποια πλεγματικά μεγέθη θα συμπεριληφθούν τελικά στην προσαρμογή.

Συνεκτιμώντας και τα στατιστικά σφάλματα που προκύπτουν από τις δυο μεθόδους καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι ο ενεργειακός σωρευτής του Binder, όπως και τα υπόλοιπα μεγέθη που εξετάστηκαν, συμπεριφέρονται σε γενικές γραμμές σύμφωνα με τις προβλέψεις της φαινομενολογικής θεωρίας για την πυκνότητα πιθανότητας που αναπτύξαμε στην παρούσα ενότητα βασισμένοι στη Θεωρία Κλιμάκωσης Πεπερασμένου Μεγέθους (Finite-Size Scaling). Η οριακή τιμή αυτού του σωρευτή για τα άπειρα συστήματα στο κρίσιμο σημείο είναι ίση με $\frac{2}{3} \approx 0,6666$, πράγμα που χαρακτηρίζει επίσης και την κανονική κατανομή [46].



Διάγραμμα 7.30: Πολυωνμική προσαρμογή του διαγράμματος σωρευτή του Binder V_{L0} σε συνάρτηση με το αντίστροφο του μεγέθους L του πλέγματος για ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 99×102 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Όλες οι προσομοιώσεις έχουν πραγματοποιηθεί με τον καινούριο αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων στο κρίσιμο σημείο.

7.8 Εισάγοντας ένα νέο στατιστικό σωρευτή για την ενέργεια

Από τη συζήτηση που ήδη έγινε για τον ενεργειακό σωρευτή του Binder, ο οποίος δίνεται από την εξίσωση (7.35), αλλά και τις σχετικές βιβλιογραφικές αναφορές, διαπιστώνουμε ότι παρέχει μια ασφαλή μέθοδο διάκρισης αλλαγών φάσης 1^{ης} τάξης αφού σε αυτές τείνει να παίρνει μια χαρακτηριστική τιμή καθώς το μέγεθος του μελετώμενου συστήματος τείνει στο άπειρο. Προβλημα παρουσιάζεται στην κρίσιμη περιοχή, αφού, όπως είδαμε, η τιμή του στο άπειρο

σύστημα είναι περίπου ίση με $\frac{2}{3}$ όπως και κατά την περίπτωση που δε λαμβάνει χώρα καμιά αλλαγή φάσης. Φυσικά η συμπεριφορά κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους [46] είναι σε κάθε περίπτωση εντελώς διαφορετική, ωστόσο το να στηριχθούμε στις σχετικές εξισώσεις για να διακρίνουμε αλλαγές φάσης δεν είναι πάντα η καλύτερη λύση.

Παρακάτω μελετάμε ένα διαφορετικό ανηγμένο σωρευτή $4^{\text{ης}}$ τάξης τύπου Binder για την ενέργεια

$$V_L = -\frac{\langle E^4 \rangle_L^{\text{con}}}{3\langle E^2 \rangle_L^2} \quad (7.62),$$

όπου

$$\langle E^4 \rangle_L^{\text{con}} = \langle E^4 \rangle_L - 3\langle E^2 \rangle_L^2 - 4\langle E \rangle_L \langle E^3 \rangle_L + 12\langle E^2 \rangle_L \langle E \rangle_L^2 - 6\langle E \rangle_L^4 \quad (7.63),$$

ενώ ο συμβολισμός “con” σημαίνει “conventional”, δηλαδή «συμβατικός» [23]. Η ποσότητα αυτή είναι ανάλογη του ανηγμένου σωρευτή $4^{\text{ης}}$ τάξης U_L που εισήγαγαν οι Binder και Landau [23] για τη μαγνήτιση. Στη συνέχεια εξετάζουμε αν είναι πράγματι αποτελεσματικότερος από τον ήδη χρησιμοποιούμενο σωρευτή V_{L0} , καθώς και τη δυνατότητα χρήσης του για τη διάκριση αλλαγών φάσης πολύπλοκων μοντέλων, στα οποία η παράμετρος τάξης είτε είναι εντελώς άγνωστη είτε εξαιρετικά δύσκολο να υπολογιστεί.

Βασισμένοι στα αποτελέσματα της προηγούμενης παραγράφου υπολογίζουμε την ποσότητα $\langle E^3 \rangle_L$, οπότε έχουμε

$$\langle E^3 \rangle_L \approx E_0^3 + 3E_0^2(E_{\text{av}} - E_0) + 3E_0^2(\tilde{g} + \tilde{m})L^{-d} + 3L^{x-3y}E_0 \int_{-\infty}^{+\infty} u^2 \tilde{P}(u) du \quad (7.64),$$

$$\langle E^3 \rangle_L \approx E_0^3 + 3E_0^2 L^{x-2y} \int_{-\infty}^{+\infty} u \tilde{P}(u) du + 3L^{x-3y} E_0 \int_{-\infty}^{+\infty} u^2 \tilde{P}(u) du \quad (7.65),$$

$$\begin{aligned} \langle E^3 \rangle_L &\approx E_0^3 + 3E_0^2(E_{\text{av}} - E_0) + 3E_0 c_L T^2 L^{-d} + 3E_0(E_{\text{av}} - E_0)^2 \\ &+ 6E_0(E_{\text{av}} - E_0)(\tilde{g} + \tilde{m})L^{-d} + 3E_0^2(\tilde{g} + \tilde{m})L^{-d} + 3E_0(\tilde{g} + \tilde{m})^2 L^{-2d} \end{aligned} \quad (7.66),$$

$$\begin{aligned} \langle E^3 \rangle_L &\approx (E_0 - E_{\text{av}})^3 + E_{\text{av}}^3 + 3E_0 c_L T^2 L^{-d} + \\ &+ 6E_0(E_{\text{av}} - E_0)(\tilde{g} + \tilde{m})L^{-d} + 3E_0^2(\tilde{g} + \tilde{m})L^{-d} + 3E_0(\tilde{g} + \tilde{m})^2 L^{-2d} \end{aligned} \quad (7.67).$$

Στη συνέχεια, χρησιμοποιώντας τη σχέση κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους για τη θερμοχωρητικότητα στο κρίσιμο σημείο και κρατώντας μόνο εκείνους τους όρους όπου οι εκθέτες του L είναι μεγαλύτεροι από τη διάσταση του πλέγματος παίρνουμε

$$\langle E^3 \rangle_L \approx (E_0 - E_{av})^3 + E_{av}^3 + 3E_0 c_L T^2 L^{-d} \quad (7.68).$$

Συνδυάζοντας τώρα τα αποτελέσματα της προηγούμενης ενότητας με τον προτεινόμενο ορισμό (7.63) προκύπτει ότι

$$\langle E^4 \rangle_L^{\text{con}} \approx 3E_0^4 - 8E_{av} E_0^3 + 6E_{av}^2 E_0^2 - E_{av}^4 - 4E_m (E_0 - E_{av})^3 - 3c_L^2 T^4 L^{-2d} \quad (7.69).$$

Τώρα, χρησιμοποιώντας τη σχέση κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους για τη θερμοχωρητικότητα στο κρίσιμο σημείο, την εξίσωση ορισμού (7.62) και αναπτύσσοντας σε σειρές Taylor καταλήγουμε τελικά στον τύπο

$$V_L = V^* + \frac{V^* T^2 \tilde{C}}{3E_{av}^4} L^{-d+\frac{\alpha}{\nu}} + \frac{T^2 \tilde{C}}{E_{av}^4} L^{-2d+\frac{2\alpha}{\nu}} + O(L^{-d}) + O\left(L^{-3d+\frac{3\alpha}{\nu}}\right) \quad (7.70),$$

όπου $\tilde{C}$ είναι ο σταθερός συντελεστής της δύναμης του L στη μαθηματική έκφραση της θερμοχωρητικότητας και

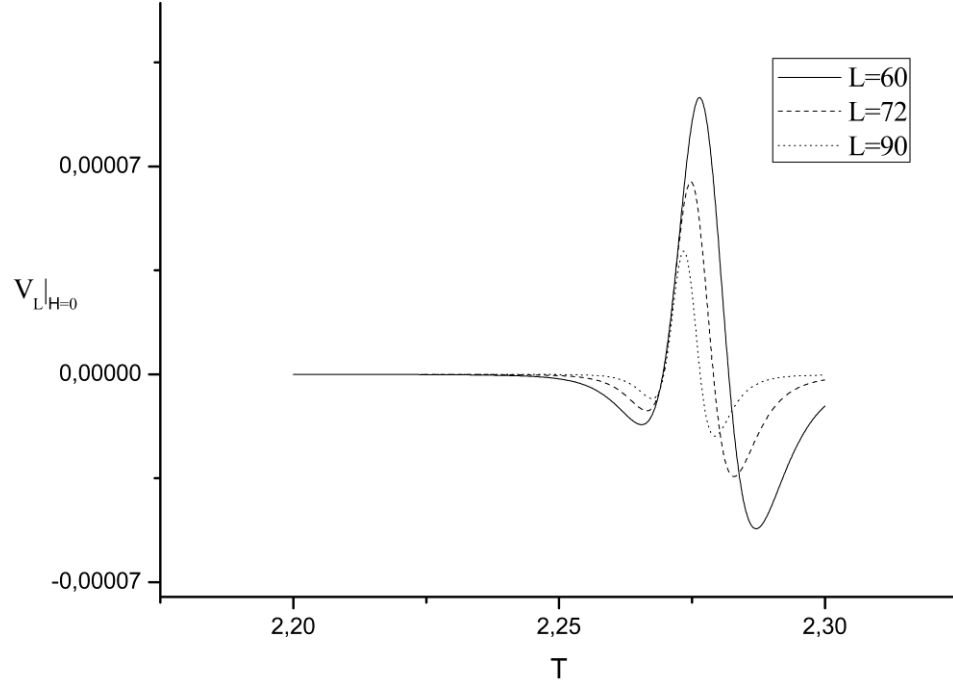
$$V^* = -\frac{3E_0^4 - 8E_{av} E_0^3 + 6E_{av}^2 E_0^2 - E_{av}^4 - 4E_{av} (E_0 - E_{av})^3}{3E_{av}^4} \quad (7.71).$$

Η οριακή τιμή V^* θα είναι ίση με το μηδέν, αν και η κατανομή της ενέργειας στο κρίσιμο σημείο δεν είναι κανονική (κατανομή Gauss), επειδή ισχύει $E_0 = E_{av}$. Για τον ίδιο λόγο η πρώτη δύναμη του πλεγματοειδούς μεγέθους L στην

εξίσωση (7.70) αναμένεται να είναι $L^{-2d+\frac{2\alpha}{\nu}}$ γιατί ο συντελεστής του όρου $\frac{V^* T^2 \tilde{C}}{3E_{av}^4} L^{-d+\frac{\alpha}{\nu}}$ είναι ίσος με το μηδέν.

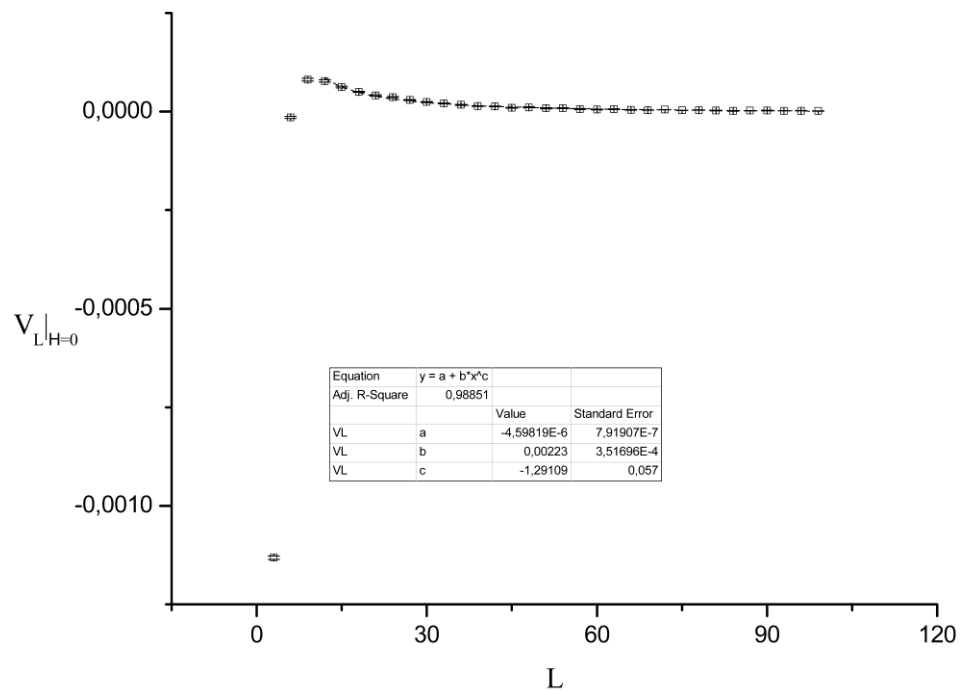
Με σκοπό να ελέγξουμε την εγκυρότητα των εξισώσεων (7.70) και (7.71) χρησιμοποιούμε τα αποτελέσματα προσομοιώσεων Monte Carlo που πραγματοποιήθηκαν με το νέο αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων υπό μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο για να σχεδιάσουμε το διάγραμμα του προτεινόμενου ενεργειακού σωρευτή σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος. Στο διάγραμμα 7.31 παριστάνουμε γραφικά τον προτεινόμενο ενεργειακό σωρευτή V_L ως προς την απόλυτη θερμοκρασία T για $H = 0$ για τρία διαφορετικά πλεγματοειδή μεγέθη L και πιο συγκεκριμένα για $L = 60$, $L = 72$ και

$L = 90$. Είναι προφανές ότι τόσο στο κρίσιμο σημείο όσο και μακριά από αυτό ο σωρευτής V_L παίρνει την τετριμμένη τιμή, δηλαδή γίνεται ίσος με το μηδέν.

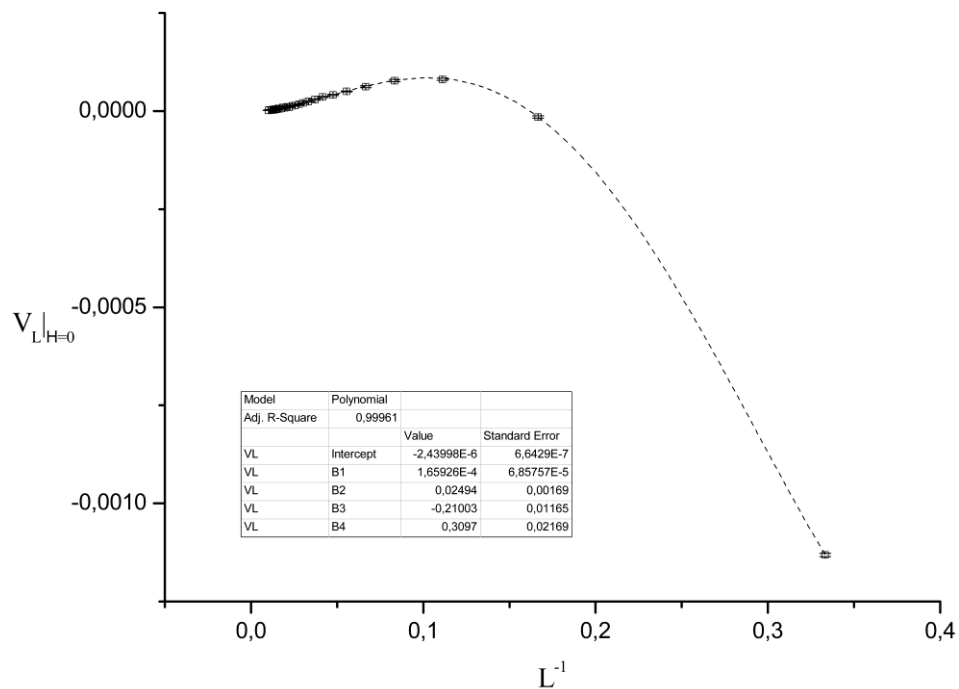


Διάγραμμα 7.31: Γραφικές παραστάσεις $V_L = f(T)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $L = 54$, $L = 72$, $L = 90$, $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και $H = 0$, όπως προκύπτουν από τα αποτελέσματα του νέου αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων. Τα στατιστικά σφάλματα παραλείπονται για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.

Για τον περαιτέρω έλεγχο των παραπάνω παρατηρήσεων παρουσιάζουμε στο διάγραμμα 7.32 την προσαρμογή του σωρευτή $V_L|_{H=0}$ για $L \geq 4$ στην εξίσωση (7.5) και την πολυωνυμική προσαρμογή (polynomial fitting) της ίδιας συνάρτησης για διάφορες τιμές του αντίστροφου πλεγματικού μεγέθους L^{-1} για $H = 0$ στο διάγραμμα 7.33. Από αυτά γίνεται ξεκάθαρο ότι ο σωρευτής V_L καθώς το μέγεθος του συστήματος μεγαλώνει τείνει στην τιμή $-2,4 \cdot 10^{-6} \pm 0,7 \cdot 10^{-6}$ (πρακτικά ίση με το μηδέν), σε πρώτη προσέγγιση με τη μορφή νόμου δύναμης. Ο αντίστοιχος εκθέτης w είναι κατά προσέγγιση ίσος με $-2d + \frac{2\alpha}{\nu}$, όπου το $\frac{\alpha}{\nu}$ παίρνει τιμή ίση με 1 [29] αν το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο ισούται με το μηδέν.



Διάγραμμα 7.32: Γραφική παράσταση του προτεινόμενου σωρευτή ενέργειας V_L σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 99×102 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Όλες οι προσομοιώσεις έχουν πραγματοποιηθεί με τον καινούριο αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων στο κρίσιμο σημείο.



Διάγραμμα 7.33: Πολυωνυμική προσρμογή του διαγράμματος του προτεινόμενου ενεργειακού σωρευτή V_L σε συνάρτηση με το αντίστροφο του μεγέθους L του πλέγματος για ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 99×102 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Όλες οι προσομοιώσεις έχουν πραγματοποιηθεί με τον καινούριο αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων στο κρίσιμο σημείο.

Συνοψίζοντας, ο στατιστικός σωρευτής που προτείνουμε παρουσιάζει την ιδιότητα να μηδενίζεται τόσο στα κρίσιμα σημεία όσο και εκεί όπου δεν παρατηρείται αλλαγή φάσης. Αυτό σημαίνει ότι ο σωρευτής αυτός δεν είναι αποτελεσματικότερος από τον ήδη χρησιμοποιούμενο. Επιπλέον, για τον ίδιο λόγο δεν παρουσιάζει ενδιαφέρον και για πραγματικά πειραματικά συστήματα, ακόμη και αν βρισκόταν ένας ακριβής τρόπος μέτρησης ενεργειακών στατιστικών ροπών ανώτερης τάξης. Φυσικά, ανακύπτει ένα εύλογο ερώτημα σχετικά με την τιμή του στις αλλαγές φάσης $1^{ου}$ είδους, ωστόσο η απάντηση σε αυτό απαιτεί λεπτομερέστερες αριθμητικές προσομοιώσεις σε περιοχή όπου παρατηρείται τέτοια φασική μετατροπή.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 8: ΜΕΛΕΤΗ ΤΟΥ ΠΡΟΤΥΠΟΥ BAXTER-WU ΠΑΡΟΥΣΙΑ ΑΡΝΗΤΙΚΟΥ ΕΞΩΤΕΡΙΚΟΥ ΜΑΓΝΗΤΙΚΟΥ ΠΕΔΙΟΥ

8.1 Κατασκευή φασικού διαγράμματος και υπολογισμός των κρίσιμων εκθετών

Στις προηγούμενες ενότητες ασχοληθήκαμε κυρίως με τις αλλαγές φάσης του προτύπου Baxter-Wu απουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Στην παρούσα ενότητα και στην επόμενη θα μελετήσουμε τι συμβαίνει στο πρότυπο αυτό παρουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Πέρα από τις γνωστές αλλαγές φάσης πρώτης και δεύτερης τάξης για μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο, από τη Χαμιλτονιανή του προτύπου που εξηγήθηκε στην §3.1 είναι εύκολο να διαπιστώσει κανείς πως οι σιδηριμαγνητικές καταστάσεις $(+ - -)$, $(- + -)$ και $(- - +)$ είναι ενεργειακά προτιμητέες για $T = 0$ και $-6 < H < 0$. Αν το αρνητικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο υπερβεί κατά απόλυτη τιμή το -6 , χαμηλότερης ενέργειας και επομένως ενεργειακά προτιμητέα είναι η κατάσταση με όλες τις spin- μαγνητικές ροπές αρνητικές, δηλαδή η $(- - -)$. Συνεπώς, αναμένεται να λαμβάνει χώρα αλλαγή φάσης για $T = 0$ και $H = -6$, ενώ για $T > 0$ προφανώς αυτή η αλλαγή φάσης θα λαμβάνει χώρα για διαφορετικές τιμές του μαγνητικού πεδίου. Έτσι προκύπτει μια φασική γραμμή στο επίπεδο T - H (απόλυτης θερμοκρασίας- εξωτερικού μαγνητικού πεδίου) μεταξύ της $(- - -)$ κατάστασης και των αντίστοιχων σιδηριμαγνητικών.

Το μεγαλύτερο μέρος των επιστημονικών ερευνών παρουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου αφορά το γενικευμένο πρότυπο των Wood και Griffiths [30], ενώ η παρουσία μόνο τριπλών αλληλεπιδράσεων, δηλαδή το απλό πρότυπο Baxter-Wu, εξετάζεται απλώς σαν μια ειδική περίπτωση. Στα 1976, ο Froyen και οι συνεργάτες του [49] προσπάθησαν να αποδώσουν το πλήρες διάγραμμα φάσεων του μοντέλου Baxter-Wu, βασισμένοι στα αποτελέσματα των Θεωριών Μέσου Πεδίου, ενώ, το 1981, οι Dóczy- Réger και Hemmer [50] επανέλαβαν την παραπάνω εργασία χρησιμοποιώντας θεωρία αλληλεπιδράσεων (interface theory). Την ίδια περίπου εποχή ([51][52]), ο ερευνητής Α. Μαλάκης έδωσε ένα ακριβέστερο φασικό διάγραμμα, στηριγμένος στην μέθοδο παραλλαγής (variational approximation). Ακολούθησε η αριθμητική εργασία των Chin και Landau στα 1987 [53], η οποία, με τη βοήθεια προσομοίωσης Monte Carlo βασισμένης σε τυπικό αλγόριθμο απλής αναστροφής spin, έδωσε ένα πλήρες και ακριβέστερο φασικό διάγραμμα, δείχνοντας επιπλέον ότι η προσέγγιση μέσου πεδίου ήταν ανακριβής όχι μόνο ποσοτικά αλλά και ποιοτικά. Από την άλλη, τα άλλα δυο προαναφερθέντα διαγράμματα ήταν μεν ποιοτικά σωστά, παρουσίαζαν όμως σημαντικές διαφορές τόσο από τα αποτελέσματα της προσομοίωσης Monte Carlo όσο και μεταξύ τους.

Από την πλευρά μας, σε αυτήν την ενότητα μελετούμε συστηματικά την αλλαγή φάσης στο μοντέλο Baxter-Wu παρουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου με σκοπό όχι μόνο να κατασκευάσουμε ένα όσο το δυνατόν πιο ακριβές φασικό

διάγραμμα αλλά και να υπολογίσουμε ποσοτικά στοιχεία αυτής της αλλαγής φάσης. Ιδιαίτερα μας ενδιαφέρουν οι κρίσιμοι εκθέτες και οι σωρευτές Binder όχι μόνο γιατί ως τώρα απουσίαζαν από τη σχετική βιβλιογραφία αλλά και γιατί μέσω αυτών μπορούν να εξαχθούν συμπεράσματα για το είδος της αλλαγής φάσης και, ενδεχομένως, την Κλάση Παγκοσμιότητας στην οποία αυτή ανήκει. Για τον προσδιορισμό τους μελετάμε την ανακλιμακωμένη συμπεριφορά της θερμοχωρητικότητας και της ισόθερμης μαγνητικής επιδεικτικότητας σε διαφορετικές θερμοκρασίες και μαγνητικά πεδία. Εργαζόμαστε με δυο τρόπους [112]: κατά τον πρώτο παραμένει σταθερό το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο και μεταβάλλεται η απόλυτη θερμοκρασία ενώ κατά το δεύτερο οι ρόλοι αντιστρέφονται και μεταβάλλεται το μαγνητικό πεδίο ενώ η θερμοκρασία παραμένει σταθερή.

Προφανώς για τις ανάγκες της ερευνάς μας αλγόριθμοι Monte Carlo απλής αναστροφής spin- μαγνητικής ροπής ή αναστροφής πλειάδων δεν ενδείκνυνται διότι κάθε φορά που χρειάζεται να μεταβληθούν οι εξωτερικές συνθήκες όπως η θερμοκρασία και το μαγνητικό πεδίο οι προσομοιώσεις μας πρέπει να επαναληφθούν, με ότι αυτό μπορεί να συνεπάγεται για το χρόνο και τους ανάλογους δαπανώμενους υπολογιστικούς πόρους. Φυσικά, η δυσκολία αυτή μπορεί να παρακαμφθεί με μεθόδους όπως εκείνη του μονού ιστογράμματος (single histogram method) ή των πολλαπλών ιστογραμμάτων (multiple histogram method) [16], ωστόσο η περιοχή για την οποία τα αποτελέσματά τους είναι ακριβή περιορίζεται γύρω από την εκάστοτε κεντρική τιμή [16]. Έτσι καταφύγαμε στους αλγόριθμους «Εντροπικής Δειγματοληψίας» (“Entropic Sampling”), οι οποίοι προτάθηκαν από τον Lee το 1993 [90] και βελτιώθηκαν σχετικά πρόσφατα από τους Wang και Landau [91].

Αντίθετα από τους συνήθεις αλγορίθμους Monte Carlo ([16], [78]) οι οποίοι δημιουργούν απευθείας μια κανονική κατανομή σε ορισμένη θερμοκρασία T και μαγνητικό πεδίο H , η μέθοδος «Εντροπικής Δειγματοληψίας» (“Entropic Sampling”) εκτιμά απευθείας αριθμούς μικροκαταστάσεων spin, συνήθως το $W(E)$ σε συνάρτηση με την ενέργεια ή το $W(E,M)$ σε συνάρτηση με την ενέργεια E και τη μαγνήτιση M . Ο λόγος που ο συγκεκριμένος αλγόριθμος ονομάζεται έτσι είναι ότι η προαναφερθείσα πυκνότητα των καταστάσεων συνδέεται με την εντροπία κατά Boltzmann στη μικροκανονική συλλογή σύμφωνα με την εξίσωση [10]

$$S(E, M) = k_B \ln [W(E, M)] \quad (8.1),$$

Στο μοντέλο που μελετάμε η μαγνήτιση M και η οφειλόμενη στις αλληλεπιδράσεις spin ενέργεια E δίνονται με βάση τη Χαμιλτονιανή του μοντέλου Baxter-Wu από τις εξισώσεις

$$E = -J \sum_{\langle i,j,k \rangle} \sigma_i \sigma_j \sigma_k \quad (8.2),$$

$$M = \sum_i \sigma_i \quad (8.3),$$

ώστε αυτή να γράφεται ως εξής

$$\mathcal{H} = E - \mathbf{H}M \quad (8.4).$$

Περισσότερα στοιχεία για τους αλγορίθμους «Εντροπικής Δειγματοληψίας» (“Entropic Sampling”) μπορεί να βρει ο ενδιαφερόμενος αναγνώστης στο Κεφάλαιο 4. Υπενθυμίζουμε εδώ όμως ότι στα πλαίσια της παρούσας διατριβής εργαζόμαστε σε δισδιάστατο φασικό χώρο ενέργειας- μαγνήτισης χρησιμοποιώντας το λιγότερο αυστηρό κριτήριο των Tsai, Wang και Landau ([54], [55], [56]), με τη βοήθεια του οποίου επιτυγχάνεται ταχύτερη σύγκλιση. Σύμφωνα με αυτό ένα ιστόγραμμα θεωρείται επίπεδο όταν ο αριθμός των βημάτων- διαταραχών είναι μεγαλύτερος ή ίσος από το 2000 και παραμένει αμετάβλητος για $10^6 L \times L$ απόπειρες μεταβολής spin- μαγνητικών ροπών, όπου L είναι η διάσταση του πλέγματος.

Χρησιμοποιώντας την εκτίμηση της πυκνότητας των καταστάσεων $W(E, M)$ που προκύπτει από την εφαρμογή του αλγορίθμου των Wang and Landau, μπορούμε να υπολογίσουμε θερμικούς μέσους όρους ποικίλων θερμοδυναμικών ποσοτήτων του προτύπου Baxter-Wu για οποιοδήποτε ζευγάρι τιμών απόλυτης θερμοκρασίας T και εξωτερικού μαγνητικού πεδίου H . Έστω ότι $Q(E, M)$ είναι ένα τέτοιο μέγεθος ([16], [54], [55], [56]), η μέση τιμή του θα δίνεται από τον τύπο

$$\langle Q \rangle_{T,H} = \frac{\sum_{E,M} Q(E, M) W(E, M) \exp \left[-\frac{1}{k_B T} (E - \mathbf{H}M) \right]}{\sum_{E,M} W(E, M) \exp \left[-\frac{1}{k_B T} (E - \mathbf{H}M) \right]} \quad (8.5).$$

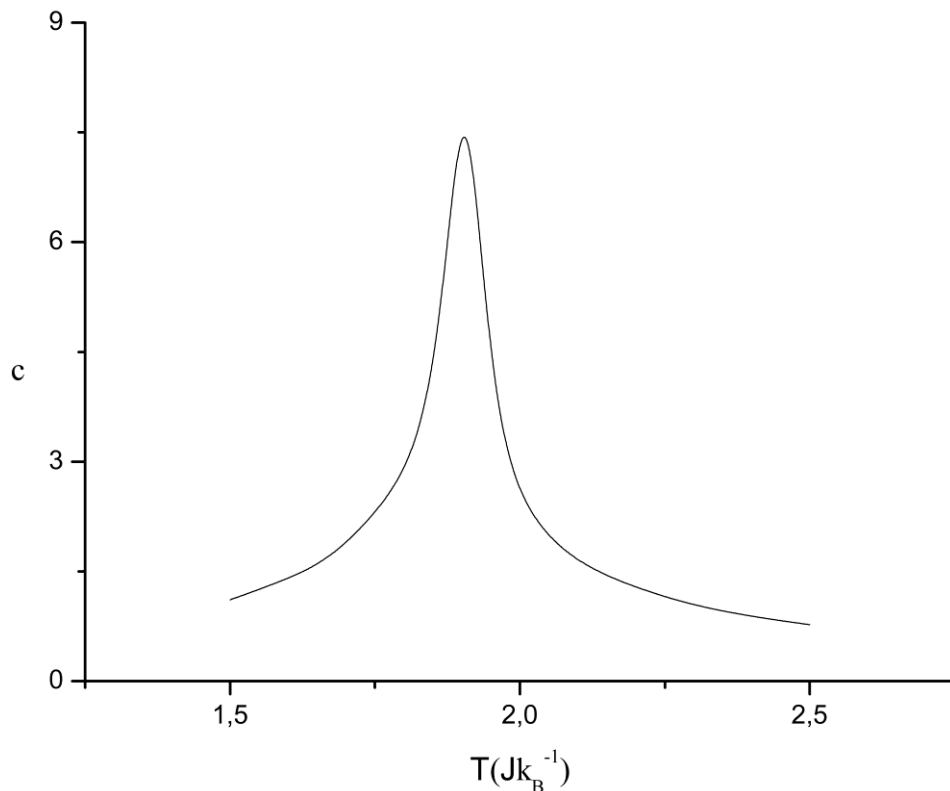
Στα πλαίσια αυτού του κεφαλαίου, ενδιαφερόμαστε κυρίως για τις μέσες τιμές των ποσοτήτων E , E^2 , M , M^2 . Από αυτές προκύπτει η θερμοχωρητικότητα C και η ισοθερμη μαγνητική επιδεκτικότητα χ_T από τις γνωστές σχέσεις διακυμάνσεων- απωλειών [9]

$$C = \frac{1}{k_B^2 T^2} \left(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right) \quad (8.6),$$

$$\chi_T = \frac{1}{k_B T} \left(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \right) \quad (8.7),$$

όπου k_B η γνωστή σταθερά του Boltzmann.

Είναι καλά τεκμηριωμένο [29] ότι για $H = 0$ η αλλαγή φάσης στο μοντέλο Baxter-Wu είναι πρώτης τάξης για θερμοκρασίες $T < T_c$ και δεύτερης τάξης για $T = T_c$, όπου T_c είναι η κρίσιμη θερμοκρασία., η οποία δίνεται από τη σχέση $\beta_c = \frac{k_B T_c}{J} = 2,269$. Επιπλέον, έχει διαπιστωθεί ([49], [50], [51], [52], [53]) ότι στο μοντέλο αυτό παρουσιάζεται μια ακόμα αλλαγή φάσης για $T = 0$ και $H = -6$. Η κατασκευή του φασικού διαγράμματος στο επίπεδο T - H γίνεται όπως περιγράφεται στη συνέχεια [112]. Αρχικά υπολογίζουμε τις πυκνότητες καταστάσεων $W(E, M)$ για ανεξάρτητα παραλληλόγραμμα $L \times (L+3)$ πλέγματα με περιοδικές συνοριακές συνθήκες και $L = 3, 6, 9, 12, \dots, 54$. Έπειτα για τις αρνητικές τιμές του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου $-5, -4,5, -4, -3,5, -3, -2,5, -2, -1,5, -1, -0,8, -0,6, -0,5, -0,4, -0,2, -0,1$ (σε μονάδες J) και για καθεμιά από τις προηγούμενες τιμές του L βρίσκουμε και παριστάνουμε γραφικά τη θερμοχωρητικότητα c_L σε συνάρτηση με την απόλυτη θερμοκρασία T εφαρμόζοντας τις εξισώσεις (8.5), (8.6). Από εκεί προκύπτει το μέγιστο της $c_L^{\max}$ και η θερμοκρασία του T_L^* (βλέπε διάγραμμα 8.1).



Διάγραμμα 8.1: Γραφική παράσταση της συνάρτησης $c = f(T)$ για $H = -3,5$ (σε μονάδες J), όπως προέκυψε με εφαρμογή του αλγορίθμου Wang-Landau Entropic Sampling για πλέγμα Baxter Wu 45×48 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Οι γραμμές των στατιστικών σφαλμάτων έχουν παραλειφθεί για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.

Τώρα μπορούμε από το αντίστοιχο διάγραμμα $T^* = f(L)$ να βρούμε την κρίσιμη θερμοκρασία και τον κρίσιμο εκθέτη $\frac{1}{\nu}$ του προτύπου για καθένα από τα παραπάνω μαγνητικά πεδία αξιοποιώντας τη σχέση κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους που είδαμε στη §2.3, δηλαδή την ([17], [18])

$$T_L^* = T_c (1 + x_{0T} L^{-\theta}) \quad (8.8),$$

με

$$\theta = \frac{1}{\nu} \quad (8.9).$$

Όσον αφορά τιμές της θερμοχωρητικότητας, σχεδιάζουμε το διάγραμμα $\log c_L^{\max} = f(L)$ για καθεμιά από τις παραπάνω τιμές του μαγνητικού πεδίου και προσαρμόζουμε τη γραμμική εξίσωση

$$\log c_L^{\max} = B + \frac{\alpha}{\nu} \log L \quad (8.10),$$

όπου B σταθερά, για τον υπολογισμό του λόγου $\frac{\alpha}{\nu}$. Αυτή προέρχεται από τη γενική σχέση Κλιμάκωσης Πεπερασμένου Μεγέθους ([17], [18])

$$c_L = L^{\alpha\theta} \tilde{c}_0(tL^\theta, hL^{\theta\beta+\theta\gamma}) \quad (8.11),$$

την οποία είδαμε στη §2.3. Παρόμοιοι υπολογισμοί μπορούν να γίνουν για την ισόθερμη μαγνητική επιδεκτικότητα, αλλά εδώ, αντί για την (8.10), χρησιμοποιούμε την εξίσωση

$$\log \chi_{T,L}^{\max} = B' + \frac{\gamma}{\nu} \log L \quad (8.12),$$

όπου B' σταθερά, και υπολογίζουμε το λόγο των κρίσιμων εκθετών $\frac{\gamma}{\nu}$ αντί για τον $\frac{\alpha}{\nu}$. Έχοντας επαναλάβει τις προσομοιώσεις Monte Carlo για δέκα διαφορετικούς σπόρους (SEEDS) της γεννήτριας τυχαίων αριθμών ανά μέγεθος πλέγματος, εύκολα βρίσκουμε τόσο τις μέσες τιμές όσο και τα στατιστικά σφάλματα για κάθε ποσότητα που μας ενδιαφέρει [16].

Για να καταστήσουμε τις ενέργειές μας πλήρως κατανοητές περιγράφουμε την ακριβή διαδικασία που ακολουθείται σε μια χαρακτηριστική περίπτωση, τον

υπολογισμό της κρίσιμης θερμοκρασίας και των κρίσιμων εκθετών α και ν για $H = -3,5$. Στα διαγράμματα 8.2 και 8.3 έχουμε σχεδιάσει τους λογαρίθμους των μεγίστων της θερμοχωρητικότητας ανά δεσμό $C_L^{\max}$ ως προς τους λογαρίθμους του μεγέθους του πλέγματος L καθώς και τις θέσεις αυτών των μεγίστων $T_{c,L}^*$ ως προς το μέγεθος του πλέγματος L , αντίστοιχα. Η αντίστοιχη γραμμική προσαρμογή (fitting) στο διάγραμμα 8.2 με τη βοήθεια της εξίσωσης (9.9) δίνει κλίση $0,646 \pm 0,002$. Για να αποφύγουμε την επίδραση του πεπερασμένου μεγέθους των πλεγμάτων μας, ακολουθούμε τη γνωστή από τα προηγούμενα κεφάλαια διαδικασία προεκβολής [33, 35]. Θεωρούμε ως πρώτη ομάδα το σύνολο των διαθέσιμων σημείων με πλεγματικά μεγέθη $L = 3-54$, ως δεύτερη τα σημεία με πλεγματικά μεγέθη $L = 6-54$, ως τρίτη τα σημεία $L = 9-54$ και ούτω καθεξής μέχρι τα σημεία με $L = 30-54$. Για κάθε ομάδα σημείων υπολογίζουμε τις κλίσεις των ευθειών $\log C_L^{\max} = f(\log L)$. Τα αποτελέσματα φαίνονται στον πίνακα 8.1. Όπως μπορούμε να δούμε, οι τιμές των κλίσεων μεταβάλλονται και προφανώς δεν μπορούν να αποτελούν σημεία ευθείας. Τις προεκβάλουμε λοιπόν χρησιμοποιώντας μη γραμμική προσαρμογή (non-linear curve fitting), χρησιμοποιώντας τις εξισώσεις [112]

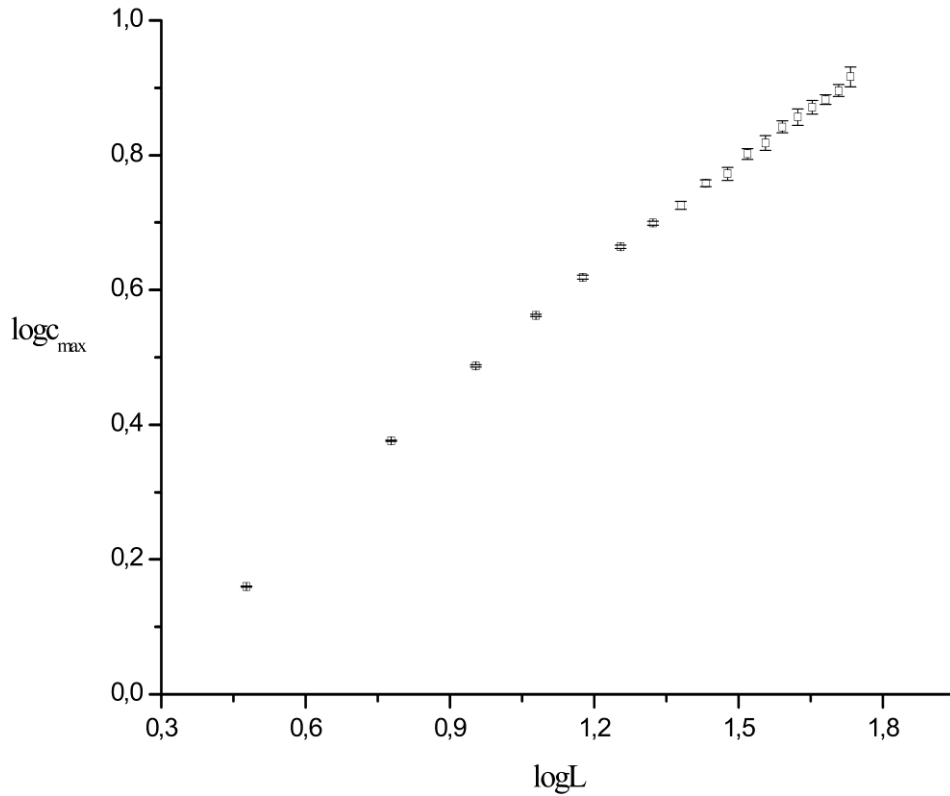
$$y = a L^w + b \text{ (συνάρτηση νόμου δύναμης)} \quad (8.13),$$

ή, εναλλακτικά,

$$y = a \exp(c L) + b \text{ (εκθετική συνάρτηση)} \quad (8.14),$$

όπου a , b , c και w είναι πραγματικοί αριθμοί-παράμετροι προσαρμογής. Τώρα η κλίση της ευθείας $\log C_L^{\max} = f(\log L)$ βρίσκεται ίση με $0,49 \pm 0,02$, η οποία θεωρείται μια σχετικά ακριβής εκτίμηση του κρίσιμου εκθέτη $\frac{\alpha}{\nu}$. Από την άλλη η μη γραμμική προσαρμογή στην καμπύλη των θερμοκρασιών (8.8) του διαγράμματος 8.3 δίνει τις τιμές $1,883 \pm 0,007$ για την κρίσιμη θερμοκρασία και $1,0 \pm 0,2$ για την τιμή του εκθέτη $\frac{1}{\nu}$. Η παραπάνω διαδικασία επαναλαμβάνεται και για την ισόθερμη μαγνητική επιδεικτικότητα στις ίδιες συνθήκες δίνοντας $T_c = 1,883 \pm 0,002$, $\frac{1}{\nu} = 1,07 \pm 0,06$ and $\frac{\gamma}{\nu} = 0,46 \pm 0,02$, οι οποίες είναι σε καλή συμφωνία με τις τιμές που προέκυψαν προηγουμένως. Από τους εκθέτες κλιμάκωσης $\frac{1}{\nu}$, $\frac{\alpha}{\nu}$ και $\frac{\gamma}{\nu}$ υπολογίζουμε τους κρίσιμους εκθέτες α , γ και ν [16]. Εναλλακτικά μπορούμε να θεωρήσουμε διορθώσεις στις σχέσεις κλιμάκωσης της §2.3 για τη θερμοχωρητικότητα της συνήθους μορφής $(1 + A' L^{-\omega})$ [17], όπου A' είναι μια σταθερή τιμή και ω είναι ο εκθέτης διορθώσεων κλιμάκωσης. Τόσο στις δοσμένες συνθήκες όσο και σε όλο το μήκος της φασικής γραμμής $H_c = H_c(T) < 0$, ο εκθέτης ω προκύπτει με καλή

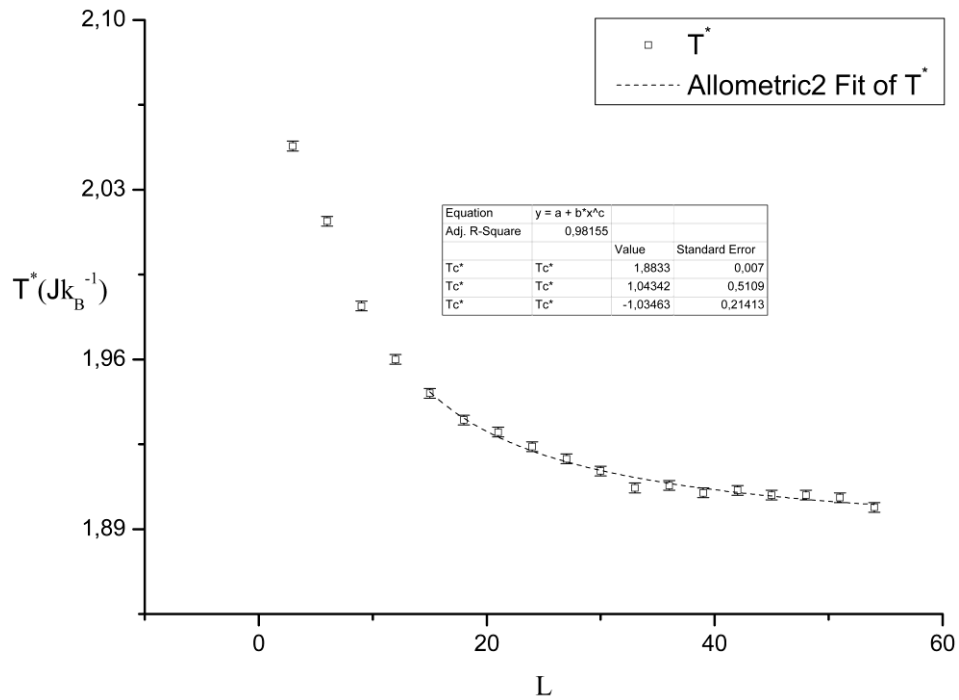
προσέγγιση ίσος με τη μονάδα ενώ τα αντίστοιχα αποτελέσματα υπό μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο συνηγορούν υπέρ της τιμής $\omega = 4$ η οποία έχει ήδη υπολογιστεί από τους Alcaraz και Xavier για το μοντέλο Baxter-Wu στις συνθήκες αυτές ([35], [36]).



Διάγραμμα 8.2: Γραφική παράσταση της συνάρτησης $\log c_{\max} = f(\log L)$ για $H = -3,5$ (σε μονάδες **J**) όπως προέκυψε με εφαρμογή του αλγορίθμου Wang-Landau Entropic Sampling για παραλληλόγραμμα πλέγματα Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες μεγέθους από 3×6 ως 54×57 .

Πίνακας 8.1: Πίνακας σύγκλισης της κλίσης του λογαρίθμου του μεγίστου της θερμοχωρητικότητας $c_{\max}$ σε συνάρτηση με το λογάριθμο του μεγέθους του πλέγματος L για $H = -3,5$.

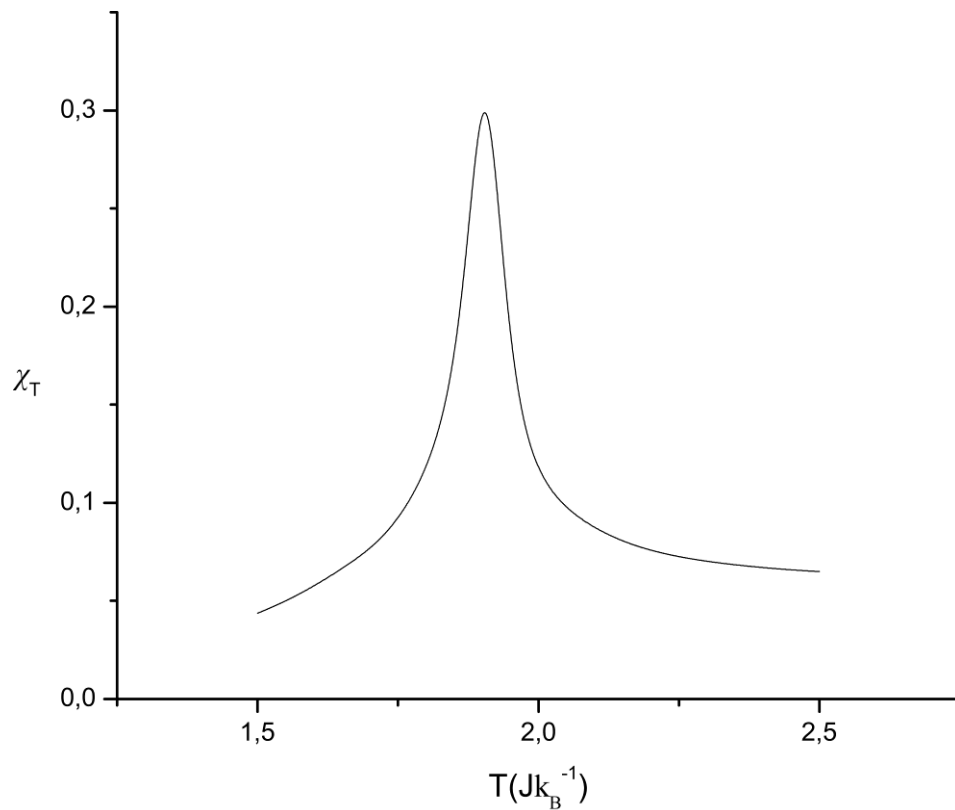
L	Slope $\log c_{\max} = f(\log L)$	Errslope $\log c_{\max} = f(\log L)$
3- 54	0,646	0,002
6- 54	0,587	0,002
9- 54	0,555	0,005
12- 54	0,541	0,006
15- 54	0,524	0,009
18- 54	0,518	0,010
21- 54	0,517	0,013
24- 54	0,518	0,021
27- 54	0,509	0,025
30- 54	0,524	0,039



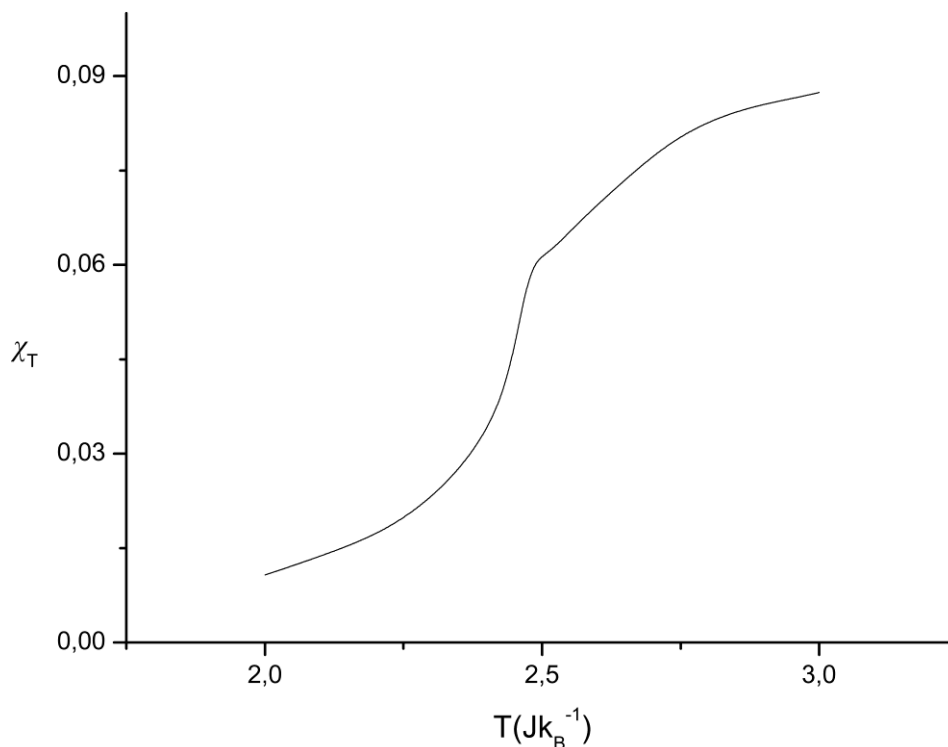
Διάγραμμα 8.3: Γραφική παράσταση της συνάρτησης $T^* = f(L)$ για $H = -3,5$ (σε μονάδες J) όπως προέκυψε με εφαρμογή του αλγορίθμου Wang-Landau Entropic Sampling για παραλληλόγραμμα πλέγματα Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες μεγέθους από 3×6 ως 54×57 .

Τα αποτελέσματα της προηγούμενης διαδικασίας φαίνονται στον πίνακα 8.2 για τη θερμοχωρητικότητα και στον πίνακα 8.3 για την ισόθερμη μαγνητική επιδεικτικότητα. Σημειώνουμε επίσης πως η διαδικασία υπολογισμού έχει πραγματοποιηθεί και απουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου για να συγκριθούν τα αποτελέσματα της μεθόδου μας με τους γνωστούς με ακρίβεια εκθέτες κλιμάκωσης στο αντίστοιχο κρίσιμο σημείο, δηλαδή με τους $\frac{1}{\nu} = 1,5$, $\frac{\alpha}{\nu} = 1$,

$\frac{\beta}{\nu} = 0,125$, $\frac{\gamma}{\nu} = 1,75$ και $\frac{\beta + \gamma}{\nu} = 1,875$. Όμως τότε, όπως και για κάποιες άλλες τιμές του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου H που σημειώνονται με αστερίσκο (*) στον πίνακα 8.3, δεν παρατηρείται κορυφή στο διάγραμμα της ισόθερμης μαγνητικής επιδεικτικότητας, τουλάχιστο για τα μεγέθη πλέγματος που μελετήσαμε (για να γίνει κατανοητή η διαφορά βλέπε διαγράμματα 8.4 και 8.5). Έτσι απλώς ελέγχουμε τη συμπεριφορά ανακλιμάκωσης των τιμών της ισόθερμης μαγνητικής επιδεικτικότητας για $T = T_c$, όπου T_c είναι η κρίσιμη θερμοκρασία που προέκυψε από τις μετρήσεις της θερμοχωρητικότητας (Πίνακας 8.2). Φυσικά, σε αυτές τις περιπτώσεις οι τιμές του κρίσιμου εκθέτη ν προέρχονται από τις μετρήσεις της θερμοχωρητικότητας. Όπως μπορούμε εύκολα να παρατηρήσουμε, οι κρίσιμες θερμοκρασίες και οι αντίστοιχες τιμές του κρίσιμου εκθέτη ν τόσο στον πίνακα 8.2 όσο και στον πίνακα 8.3 είναι ίσες στα πλαίσια του στατιστικού σφάλματος.



Διάγραμμα 8.4: Γραφική παράσταση της συνάρτησης $\chi_T = f(T)$ για $H = -3,5$ (σε μονάδες J), όπως προέκυψε με εφαρμογή του αλγορίθμου Wang-Landau Entropic Sampling για πλέγμα Baxter Wu 45×48 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Οι γραμμές των στατιστικών σφαλμάτων έχουν παραλειφθεί για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.



Διάγραμμα 8.5: Γραφική παράσταση της συνάρτησης $\chi_T = f(T)$ για $H = -1,5$ (σε μονάδες J), όπως προέκυψε με εφαρμογή του αλγορίθμου Wang-Landau Entropic Sampling για πλέγμα Baxter Wu 45×48 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Οι γραμμές των στατιστικών σφαλμάτων έχουν παραλειφθεί για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.

Πίνακας 8.2: Κρίσιμα σημεία και κρίσιμοι εκθέτες α , ν για $H \leq 0$.

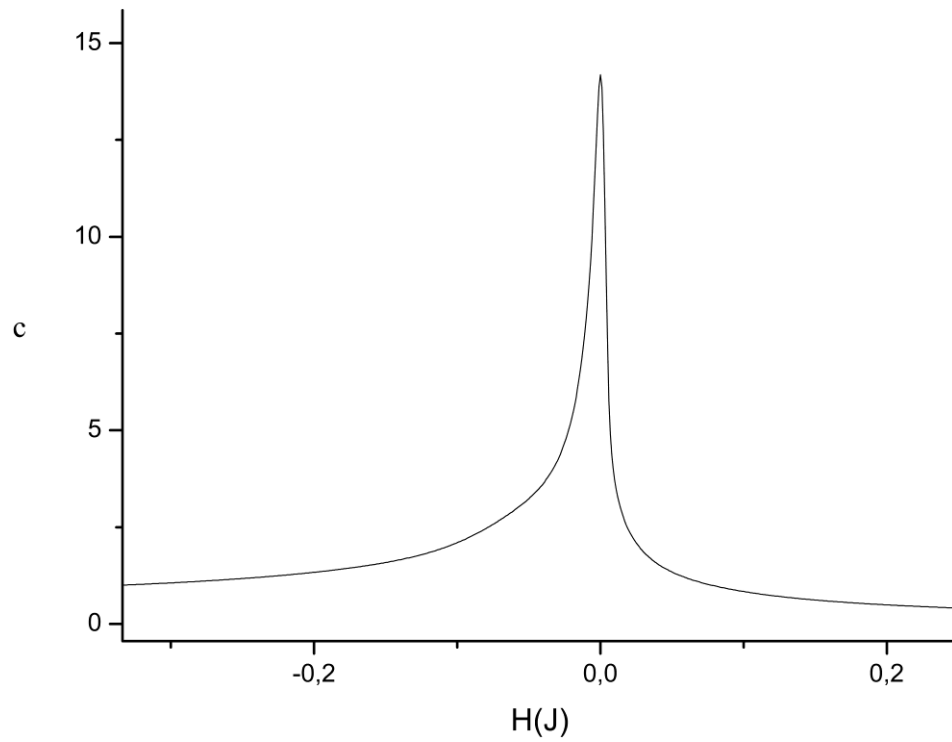
H	T_c	δT_c	ν	$\delta \nu$	α	$\delta \alpha$
+0,0	2,270	0,001	0,67	0,04	0,64	0,030
-0,1	2,324	0,002	0,95	0,03	0,56	0,009
-0,2	2,358	0,001	0,99	0,02	0,52	0,070
-0,4	2,410	0,002	0,94	0,07	0,53	0,030
-0,5	2,426	0,001	0,98	0,01	0,53	0,007
-0,6	2,440	0,002	0,99	0,02	0,55	0,010
-0,8	2,461	0,001	0,98	0,01	0,52	0,008
-1,0	2,471	0,001	0,99	0,01	0,50	0,010
-1,5	2,457	0,001	0,95	0,02	0,49	0,005
-2,0	2,389	0,001	1,00	0,02	0,51	0,006
-2,5	2,275	0,003	1,01	0,08	0,51	0,040
-3,0	2,111	0,007	0,90	0,20	0,47	0,080
-3,5	1,883	0,007	1,00	0,20	0,48	0,080
-4,0	1,591	0,008	1,00	0,20	0,50	0,100
-4,5	1,230	0,008	1,00	0,30	0,52	0,100
-5,0	0,85	0,02	1,00	0,30	0,50	0,100

Πίνακας 8.3: Κρίσιμα σημεία και κρίσιμοι εκθέτες γ , ν για $H \leq 0$. Για τις τιμές του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου που σημειώνονται με αστερίσκο (*) δεν παρατηρείται ολικό μέγιστο της ισόθερμης μαγνητικής επιδεκτικότητας, τουλάχιστον για τα πλεγματικά μεγέθη που μελετήθηκαν.

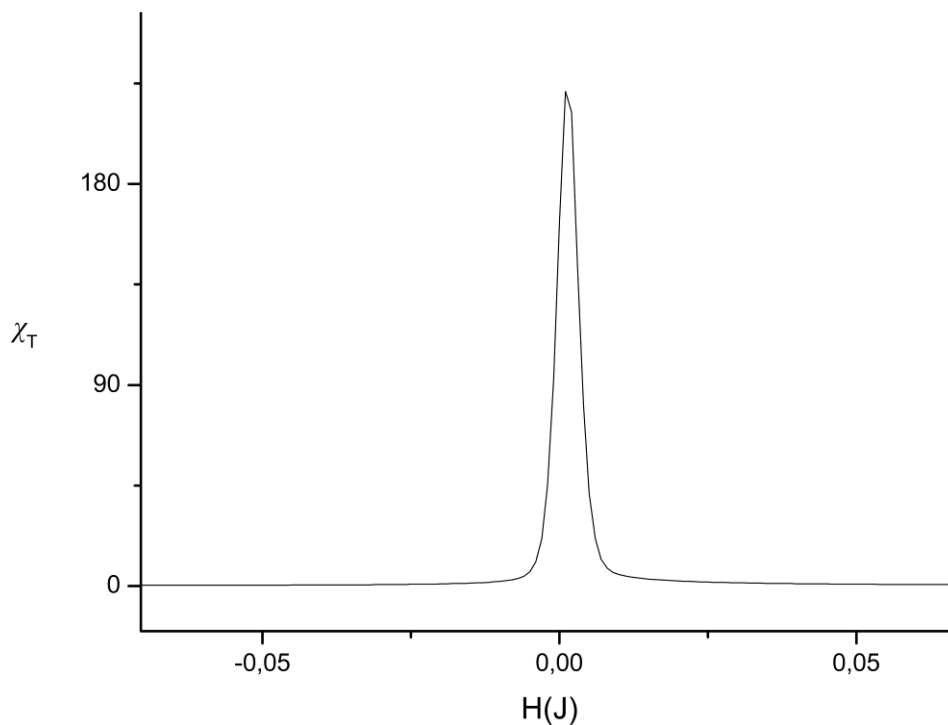
H	T_c	δT_c	ν	$\delta \nu$	γ	$\delta \gamma$
+0,0	2,270	0,001	0,67	0,04	1,150	0,060
-0,1	2,322	0,006	0,75	0,07	0,250	0,009
-0,2	2,340	0,010	0,84	0,08	0,263	0,009
-0,4	2,383	0,003	0,91	0,07	0,300	0,500
-0,5	2,448	0,003	0,70	0,30	0,220	0,090
-0,6*	2,455	0,020	1,00	0,02	0,316	0,005
-0,8*	2,489	0,020	0,98	0,01	0,267	0,001
-1,0*	2,500	0,080	0,99	0,01	0,270	0,001
-1,5*	2,470	0,020	0,95	0,02	0,206	0,002
-2,0	2,380	0,010	0,86	0,07	0,300	0,020
-2,5	2,279	0,003	0,79	0,08	0,310	0,020
-3,0	2,112	0,005	0,90	0,10	0,370	0,030
-3,5	1,883	0,003	0,93	0,06	0,422	0,006
-4,0	1,588	0,003	0,99	0,06	0,400	0,070
-4,5	1,230	0,003	0,95	0,07	0,460	0,010
-5,0	0,840	0,020	1,80	0,80	0,700	0,200

Επιπλέον, τα αποτελέσματά μας για την κρίσιμη συμπεριφορά του προτύπου Baxter-Wu στο κρίσιμο σημείο $(0, T_c)$ απουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου φαίνεται να δίνουν αρκετά καλές εκτιμήσεις των αντίστοιχων κρίσιμων εκθετών. Τα σχετικά μεγαλύτερα σφάλματα που παρατηρούνται συνδέονται με το χρησιμοποιούμενο αλγόριθμο Monte Carlo. Ας μην ξεχνάμε ότι οι αλγόριθμοι εντροπικής δειγματοληψίας, τουλάχιστο με τη μορφή που τους εφαρμόσαμε στα πλαίσια της παρούσας διατριβής, δεν είναι οι πλέον κατάλληλοι για τη μελέτη της κρίσιμης συμπεριφοράς ([16], [96]).

Η παραπάνω εργασία επαναλαμβάνεται κρατώντας σταθερές τις κρίσιμες τιμές της θερμοκρασίας που βλέπουμε στους πίνακες 8.2 και 8.3 και μεταβάλλοντας το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο με σκοπό τον έλεγχο των αποτελεσμάτων μας αλλά και την εύρεση του κρίσιμου εκθέτη β (βλέπε διαγράμματα 8.6, 8.7 και 8.8 και πίνακες 8.4 και 8.5). Φυσικά, και σε αυτήν την περίπτωση οι τιμές του κρίσιμου εκθέτη ν προέρχονται επίσης από τον πίνακα 8.2.



Διάγραμμα 8.6: Γραφική παράσταση της συνάρτησης $c = f(H)$ για $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$, όπως προέκυψε με εφαρμογή του αλγορίθμου Wang-Landau Entropic Sampling για πλέγμα Baxter Wu 45×48 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Οι γραμμές των στατιστικών σφαλμάτων έχουν παραλειφθεί για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.



Διάγραμμα 8.7: Γραφική παράσταση της συνάρτησης $\chi_T = f(H)$ για $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$,

όπως προέκυψε με εφαρμογή του αλγορίθμου Wang-Landau Entropic Sampling για πλέγμα Baxter Wu 45×48 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Οι γραμμές των στατιστικών σφαλμάτων έχουν παραλειφθεί για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.

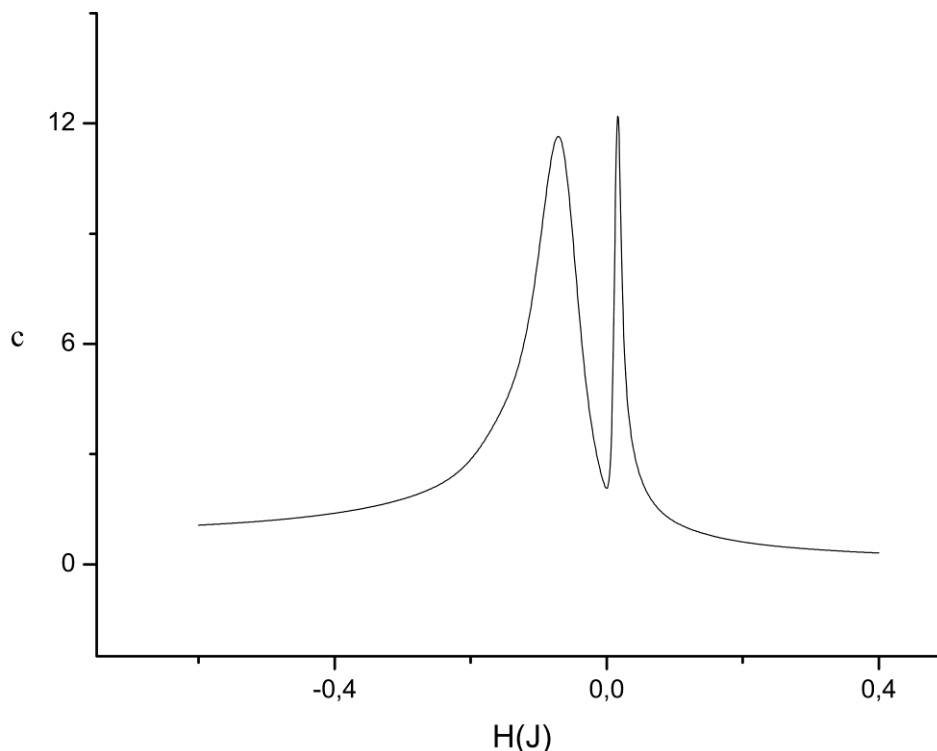
Πίνακας 8.4: Κρίσιμα σημεία και κρίσιμοι εκθέτες α , $(\beta+\gamma)$ για $H \leq 0$.

T	H_c	δH_c	ν	$\delta \nu$	$\beta+\gamma$	$\delta(\beta+\gamma)$	α	$\delta \alpha$
2,269	0,0000	0,0001	0,67	0,04	1,24	0,04	0,680	0,030
2,324	-0,130	0,010	0,95	0,03	0,60	0,10	0,480	0,010
2,358	-0,250	0,020	0,99	0,02	0,49	0,03	0,470	0,020
2,410	-0,430	0,030	0,94	0,07	0,55	0,06	0,500	0,030
2,426	-0,510	0,040	0,98	0,01	0,57	0,05	0,509	0,003
2,440	-0,600	0,050	0,99	0,02	0,73	0,05	0,502	0,002
2,461	-1,200	0,100	0,98	0,01	0,45	0,04	0,450	0,040
2,471	-1,290	0,090	0,99	0,01	0,40	0,04	0,491	0,001
2,457	-1,510	0,010	0,95	0,02	0,95	0,03	0,526	0,003
2,389	-2,003	0,009	1,00	0,02	1,04	0,06	0,521	0,001
2,275	-2,513	0,008	1,01	0,08	1,19	0,02	0,510	0,040
2,111	-3,002	0,004	0,90	0,20	1,20	0,20	0,460	0,080
1,883	-3,505	0,006	1,00	0,20	1,20	0,20	0,470	0,090
1,591	-4,002	0,003	1,00	0,20	1,20	0,30	0,470	0,100
1,230	-4,504	0,003	1,00	0,30	1,30	0,30	0,500	0,100

Πίνακας 8.5: Κρίσιμα σημεία και κρίσιμοι εκθέτες β , ν για $H \leq 0$. Για τις τιμές του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου που παραλείπονται δεν παρατηρείται καμμία κορυφή της ισόθερμης μαγνητικής επιδεκτικότητας, τουλάχιστον για τα πλεγματικά μεγέθη που μελετήθηκαν.

T	H_c	δH_c	ν	$\delta \nu$	γ	$\delta \gamma$	β	$\Delta \beta$
2,269	-0,0001	0,0003	0,67	0,04	1,150	0,050	0,09	0,010
2,389	-1,900	0,020	0,86	0,07	0,130	0,010	0,7281	0,0005
2,275	-2,503	0,007	0,79	0,08	0,308	0,008	0,770	0,060
2,114	-2,988	0,005	0,90	0,10	0,300	0,010	0,660	0,090
1,883	-3,506	0,005	0,93	0,06	0,380	0,050	0,740	0,060
1,591	-4,002	0,003	0,99	0,06	0,430	0,020	0,750	0,010
1,230	-4,504	0,003	0,95	0,07	0,460	0,030	0,787	0,009

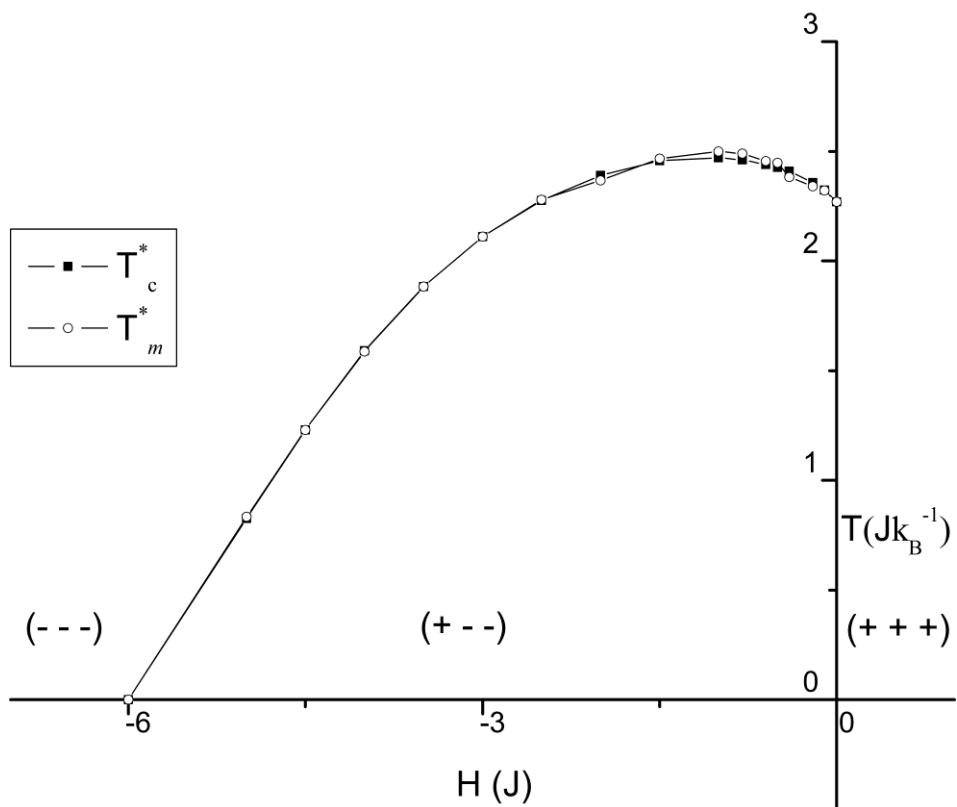
Ιδιαίτερη προσοχή χρειάζεται κατά την εύρεση του μεγίστου της θερμοχωρητικότητας σε θερμοκρασίες σταθερές και κοντά στην κρίσιμη τιμή T_c διότι παρατηρούνται δυο κορυφές ανά πλεγματικό μέγεθος για μαγνητικά πεδία κοντά στο μηδέν, μια για θετικά και μια για αρνητικά (βλέπε διάγραμμα 8.8). Από αυτές εξετάζουμε φυσικά εκείνη που εμφανίζεται για $H < 0$. Αξιοπερίεργη είναι η απουσία αντίστοιχης κορυφής για την ισόθερμη μαγνητική επιδεκτικότητα, αφού αυτή παρουσιάζει μόνο ένα μέγιστο για $H \geq 0$. Η δεύτερη μπορεί να οφείλεται είτε στις κρίσιμες διακυμάνσεις του σημείου $(0, T_c)$ είτε να αποτελεί προέκταση της φασικής γραμμής του Baxter-Wu πέρα από αυτό το σημείο, ενδεχόμενο που έχει ελάχιστα συζητηθεί [53] και σίγουρα χρήζει περαιτέρω μελέτης.



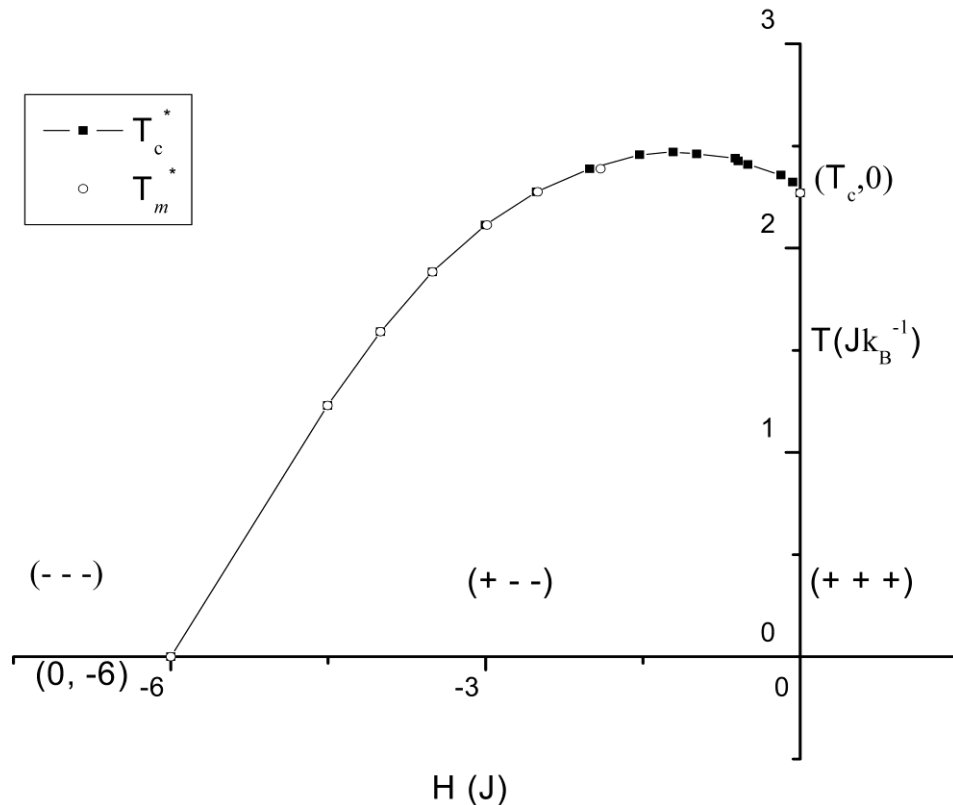
Διάγραμμα 8.8: Γραφική παράσταση της συνάρτησης $c = f(H)$ για $\frac{k_B T_c}{J} = 2,324$, όπως προέκυψε με εφαρμογή του αλγορίθμου Wang-Landau Entropic Sampling για πλέγμα Baxter Wu 45×48 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Οι γραμμές των στατιστικών σφαλμάτων έχουν παραλειφθεί για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.

Με τη βοήθεια των παραπάνω αποτελεσμάτων, σε συνδυασμό και με όσα αναφέρθηκαν στα προηγούμενα κεφάλαια, είναι δυνατή η κατασκευή ενός φασικού διαγράμματος για το πρότυπο Baxter-Wu, το οποίο απεικονίζεται στα διαγράμματα 8.9 και 8.10. Από τις τιμές των κρίσιμων εκθετών που ήδη υπολογίστηκαν είναι ξεκάθαρο ότι παρουσία αρνητικού εξωτερικού μαγνητικού πεδίου το μοντέλο αυτό παρουσιάζει αλλαγή φάσης ανώτερης τάξης κατά μήκος της φασικής γραμμής $H_c = H_c(T)$ η οποία ξεκινά από το σημείο $(-6J, 0)$ και καταλήγει στο γνωστό $(0, T_c)$, όπου T_c είναι η κρίσιμη θερμοκρασία απουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Αφού το παραπάνω κρίσιμο σημείο είναι στην πραγματικότητα τετραπλό σημείο τετραπλής φασικής γραμμής (quadruple line), κατά μήκος της οποίας συνυπάρχουν τέσσερις διαφορετικές φάσεις. Θα μπορούσε επίσης να ονομαστεί και τετρακρίσιμο σημείο (tetracritical point). Από την άλλη μεριά, η φασική γραμμή $H_c = H_c(T) < 0$ διαχωρίζει την περιοχή όπου συνυπάρχουν τρεις διαφορετικές σιδηριμαγνητικές καταστάσεις από εκείνη στην οποία κυριαρχεί η σιδηρομαγνητική φάση (— — —), οπότε θα μπορούσε να κληθεί τρικρίσιμη φασική γραμμή (tricritical line). Τα στοιχεία αυτά μας κάνουν να υποθέσουμε ότι τα σημεία της θα πρέπει να ανήκουν σε άλλη Κλάση Παγκοσμιότητας σε σχέση με το τετρακρίσιμο σημείο, αποτέλεσμα το οποίο επαληθεύεται από τα αποτελέσματα που παρατίθενται στους πίνακες 8.1- 8.4 Σύμφωνα με αυτά, οι αντίστοιχοι κρίσιμοι εκθέτες συνιστούν μια νέα Κλάση

Παγκοσμιότητας [112], με πιθανές τιμές $\nu \approx 1,00 \pm 0,02$, $\beta \approx 0,75 \pm 0,05$, $\gamma \approx 0,40 \pm 0,05$, $\alpha \approx 0,50 \pm 0,01$.



Διάγραμμα 8.9: Φασικό διάγραμμα του προτύπου Baxter-Wu όπως προέκυψε με μετρήσεις της θερμοχωρητικότητας και της ισόθερμης μαγνητικής επιδεκτικότητας κρατώντας σταθερό το μαγνητικό πεδίο και μεταβάλλοντας τη θερμοκρασία. Οι γραμμές των στατιστικών σφαλμάτων και στις δυο περιπτώσεις είναι αρκετά μικρές ώστε να καλύπτονται από τα σύμβολα των σημείων.



Διάγραμμα 8.10: Φασικό διάγραμμα του προτύπου Baxter-Wu όπως προέκυψε με μετρήσεις της θερμοχωρητικότητας και της ισόθερμης μαγνητικής επιδεκτικότητας κρατώντας σταθερή τη θερμοκρασία και μεταβάλλοντας το μαγνητικό πεδίο. Οι γραμμές των στατιστικών σφαλμάτων και στις δυο περιπτώσεις είναι αρκετά μικρές ώστε να καλύπτονται από τα σύμβολα των σημείων.

Εξαιρέση στον παραπάνω κανόνα αποτελούν τα σημεία με εξωτερικό μαγνητικό πεδίο αρνητικό αλλά κοντά στο μηδέν, όπου οι κρίσιμοι εκθέτες και ειδικά ο β και ο γ δείχνουν να μεταβάλλονται γρήγορα για να πάρουν τις τιμές που αντιστοιχούν στο κρίσιμο σημείο $(0, T_c)$. Στην πραγματικότητα τα αποτελέσματά μας υποστηρίζουν την παρουσία ενός χάσματος στις τιμές των κρίσιμων εκθετών κοντά στο $H = 0$, η ύπαρξη του οποίου αναφέρεται και στη σχετική βιβλιογραφία ([53], [113]). Με βάση τα προαναφερθέντα, ισχυριζόμαστε [6] ότι το κρίσιμο σημείο $(0, T_c)$ συμπεριφέρεται σαν απωστικό κρίσιμο σημείο (irrelevant critical point) ενώ θα πρέπει να υπάρχει και ένα άλλο κρίσιμο σημείο, ίσως το $(-6J, 0)$, το οποίο θα συμπεριφέρεται σαν ελκτικό (relevant). Εξίσου πιθανή είναι και η παρουσία ενός τρίτου πολυκρίσιμου σημείου (multicritical point) κατά μήκος αυτής της φασικής γραμμής, όπως είναι γνωστό ότι συμβαίνει τόσο στο μοντέλο των Blume-Capel όσο και στο spin-1 πρότυπο Baxter-Wu παρουσία κρυσταλλικού πεδίου ([114], [115]). Φυσικά, τα παραπάνω συνιστούν ζητήματα προς επιστημονική διερεύνηση, πλην όμως η παρουσία ενός ακόμα κρίσιμου σημείου θα μπορούσε σίγουρα να θεωρηθεί εναλλακτική λύση σε σχέση με την ύπαρξη συνεχούς γραμμής από το σημείο $(0, T_c)$ μέχρι το σημείο $(-6J, 0)$. Επιπλέον, οι κρίσιμοι εκθέτες που βρέθηκαν δε φαίνεται να υπακούουν

ούτε στη σχέση υπερκλιμάκωσης ([3], [6], [11]) ούτε ακόμα και σε γνωστές ανισότητες κρίσιμων εκθετών όπως εκείνη του Rushbrooke ή του Josephson [3]. Ωστόσο, η σχετικά περιορισμένη ακρίβεια των αποτελεσμάτων μας στα κρίσιμα σημεία [112] δε μας επιτρέπει να ισχυριστούμε κάτι τέτοιο με σιγουριά.

8.2 Οι κρίσιμοι ενεργειακοί σωρευτές παρουσία αρνητικού εξωτερικού μαγνητικού πεδίου

Στο προηγούμενο εδάφιο ασχοληθήκαμε με την αλλαγή φάσης του προτύπου Baxter-Wu παρουσία αρνητικού εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Επιδιώξαμε καταρχήν τον προσδιορισμό του είδους της πραγματοποιούμενης αλλαγής φάσης και τον όσο το δυνατόν ακριβέστερο υπολογισμό των σχετικών κρίσιμων εκθετών βασισμένοι σε υπολογισμούς της θερμοχωρητικότητας αλλά και της ισόθερμης μαγνητικής επιδεικνυκότητας. Ωστόσο, κατά τη μελέτη των αλλαγών φάσης απουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου είχαμε εξετάσει και τους στατιστικούς σωρευτές 4^{ns} τάξης για την ενέργεια και τη μαγνήτιση ([22], [23], [24]), δείχνοντας ότι υπακούουν σε κάποιες διορθωμένες σχέσεις κλιμάκωσης, τουλάχιστο για περιοδικές συνοριακές συνθήκες, και παρέχουν έναν επιπλέον τρόπο προσδιορισμού κρίσιμων εκθετών, με την προϋπόθεση φυσικά ότι έχουμε καταφέρει να έχουμε ακριβή αποτελέσματα προσομοιώσεων για αυτούς στην περιοχή των αλλαγών φάσης.

Στο προηγούμενο κεφάλαιο είχαμε εξετάσει το σωρευτή Binder για την ενέργεια, ο οποίος, όπως είχαμε δει στην §7.7, δίνεται από τη σχέση [24]

$$V_{L0} = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle_L}{3 \langle E^2 \rangle_L^2} \quad (8.14).$$

Στην κρίσιμη περιοχή αυτός παρουσιάζει ελάχιστο, το οποίο υπακούει στην ακόλουθη σχέση κλιμάκωσης

$$V_{L0}^{\min} = \frac{2}{3} - L^{-d+\frac{\alpha}{\nu}} \tilde{V}(tL^{\frac{1}{\nu}}) \quad (8.15),$$

όπου t είναι η ανηγμένη θερμοκρασία που είδαμε στο κεφάλαιο 2, με την τιμή T_{0L} στη θέση της απόλυτης θερμοκρασίας T . Επίσης, προτείναμε εναλλακτικά την υιοθέτηση ενός διαφορετικού ανηγμένου σωρευτή 4^{ns} -τάξης τύπου Binder [23] για την ενέργεια, του

$$V_L = - \frac{\langle E^4 \rangle_L^{\text{con}}}{3 \langle E^2 \rangle_L^2} \quad (8.16),$$

όπου

$$\langle E^4 \rangle_L^{\text{con}} = \langle E^4 \rangle_L - 3\langle E^2 \rangle_L^2 - 4\langle E \rangle_L \langle E^3 \rangle_L + 12\langle E^2 \rangle_L \langle E \rangle_L^2 - 6\langle E \rangle_L^4 \quad (8.17).$$

Χρησιμοποιώντας μια σχέση κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους για τη θερμοχωρητικότητα στο κρίσιμο σημείο και την εξίσωση ορισμού (8.16) καταλήξαμε μετά από αριστερές πράξεις στην προσεγγιστική σχέση

$$V_L \approx \frac{T^2 \tilde{C}}{E_{\text{av}}^4} L^{-2d+\frac{2\alpha}{\nu}} \quad (8.18),$$

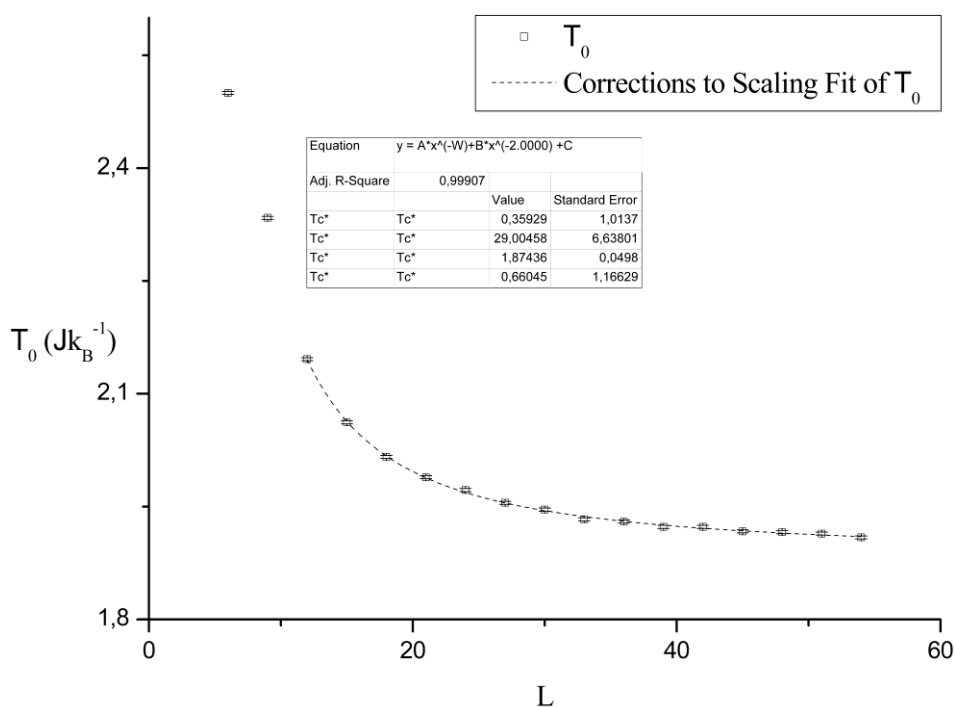
Στο εδάφιο αυτό ελέγχουμε τις προαναφερθείσες σχέσεις για $H < 0$ με τη βοήθεια προσομοιώσεων Monte Carlo. Χρησιμοποιούμε για το σκοπό αυτόν τα αποτελέσματα που προέκυψαν με τον αλγόριθμο εντροπικής δειγματοληψίας σε ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu και περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Βέβαια η ακρίβεια αυτών είναι περιορισμένη σε σχέση με τα αντίστοιχα από τον αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων αλλά έχουν το πλεονέκτημα να επεκτείνονται εύκολα σε οποιεσδήποτε τιμές της θερμοκρασίας και του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Η όλη διαδικασία παρουσιάζεται επιγραμματικά, εστιάζοντας κυρίως στα αποτελέσματα, αφού οι βασικές αρχές της έχουν παρουσιαστεί στην §8.1.

Είναι γνωστό [46] ότι ο σωρευτής παρουσιάζει ολικό ελάχιστο για θερμοκρασίες και εξωτερικό μαγνητικό πεδίο σχετικά κοντά στις κρίσιμες τιμές. Στο διάγραμμα 8.11 παριστάνονται γραφικά οι θερμοκρασίες T_{0L} αυτού του ελαχίστου σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για μια ενδεικτική τιμή του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, την $H = -3,5$. Από τη σχέση (8.15) είναι προφανές ότι η T_{0L} πρέπει να προσεγγίζει την κρίσιμη θερμοκρασία T_c με νόμο δύναμης $L^{-\frac{1}{\nu}}$, δηλαδή ότι η θερμοκρασία T_{0L} συμπεριφέρεται καθώς αυξάνει το L όπως ακριβώς και η ψευδοκρίσιμη θερμοκρασία για την οποία παρατηρείται η μέγιστη τιμή της θερμοχωρητικότητας. Αυτό εξετάζεται με την προσαρμογή (fitting) της θερμοκρασίας του ελαχίστου T_{0L} για διάφορες τιμές του πλεγματικού μεγέθους L στη συνάρτηση [46]

$$y = a L^w + b L^{-1+w} + c \quad (8.19),$$

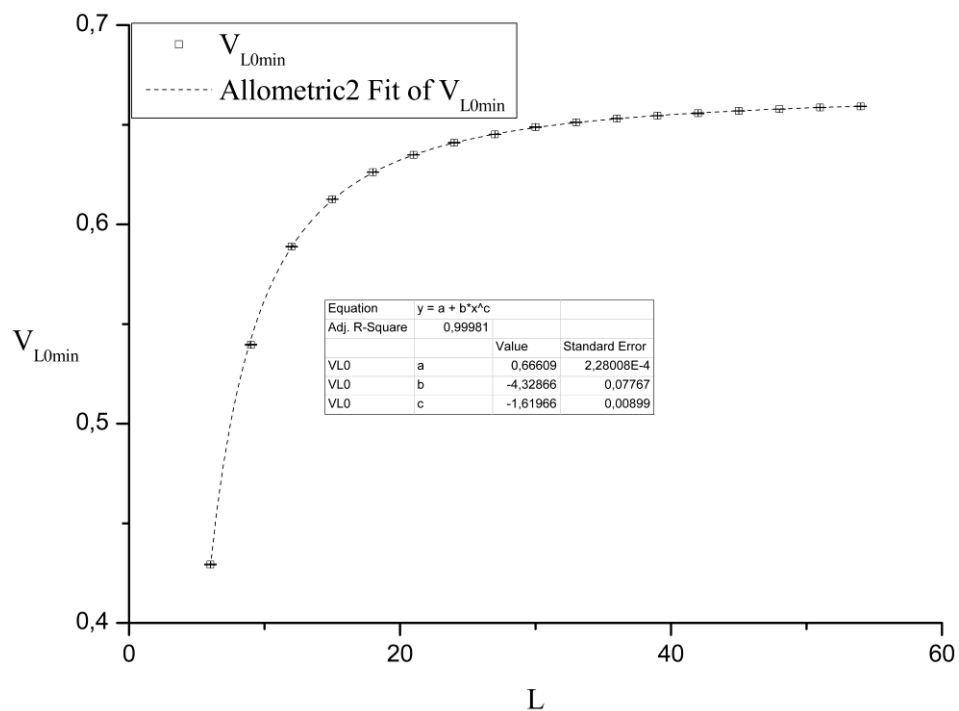
όπου ο εκθέτης w πρέπει να είναι $-\frac{1}{\nu}$. Επιλέξαμε την παραπάνω διορθωμένη συνάρτηση κλιμάκωσης αντί της απλούστερης (8.12) γιατί αυτή οδηγεί σε συστηματική διαφοροποίηση από τα αποτελέσματα της §8.1 ενώ ούτε ο αριθμός των σημείων ούτε η ακρίβεια του χρησιμοποιούμενου αλγορίθμου επιτρέπουν την επανάληψη της γνωστής διαδικασίας προεκβολής. Μάλιστα, κατά την εφαρμογή της (8.19) κρατήσαμε σταθερό τον εκθέτη του δεύτερου όρου (όρος διορθώσεων κλιμάκωσης) στο -2 . Στο διάγραμμα 8.12, όπως βλέπουμε, παριστάνονται γραφικά οι θέσεις των ελαχίστων του σωρευτή Binder για την

ενέργεια σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για την παραπάνω ενδεικτική τιμή του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, δηλαδή την $H = -3,5$. Εδώ η απευθείας προσαρμογή της εξίσωσης (8.12) δίνει αποτελέσματα για το λόγο των κρισίμων εκθετών $\frac{\alpha}{\nu}$ συμβατά με εκείνα της προηγούμενης ενότητας, αν και τα αντίστοιχα στατιστικά σφάλματα είναι πλέον μεγαλύτερα.



Διάγραμμα 8.11: Γραφική παράσταση της θερμοκρασίας του ελαχίστου $T_0 = f(L)$ του σωρευτή του Binder V_{L0} στο μοντέλο Baxter-Wu υπό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο $H = -3,5$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγορίθμου εντροπικής δειγματοληψίας (χρησιμοποιούμε όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu διαστάσεων από 3×6 έως 54×57 και περιοδικές συνοριακές συνθήκες).

Οι σχετικές διαδικασίες επαναλαμβάνονται για όλα τα κρίσιμα σημεία που αναγράφονται στον πίνακα 8.2 και επαληθεύονται στους πίνακες 8.3- 8.5. Τα συγκεντρωτικά αποτελέσματα φαίνονται στον πίνακα 8.6. Από αυτά είναι προφανές ότι τόσο οι τιμές των κρισίμων θερμοκρασιών όσο και των αντίστοιχων λόγων των κρισίμων εκθετών συμφωνούν, στα πλαίσια του στατιστικού σφάλματος, με τα κρίσιμα σημεία και τους αντίστοιχους κρίσιμους εκθέτες όπως προέκυψαν με τους υπολογισμούς θερμοχωρητικότητας και ισόθερμης μαγνητικής επιδεκτικότητας στην §8.1.



Διάγραμμα 8.12: Γραφική παράσταση του ελαχίστου του σωρευτή Binder V_{L0} σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 54×57 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες υπό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο $H = -3,5$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγορίθμου εντροπικής δειγματοληψίας.

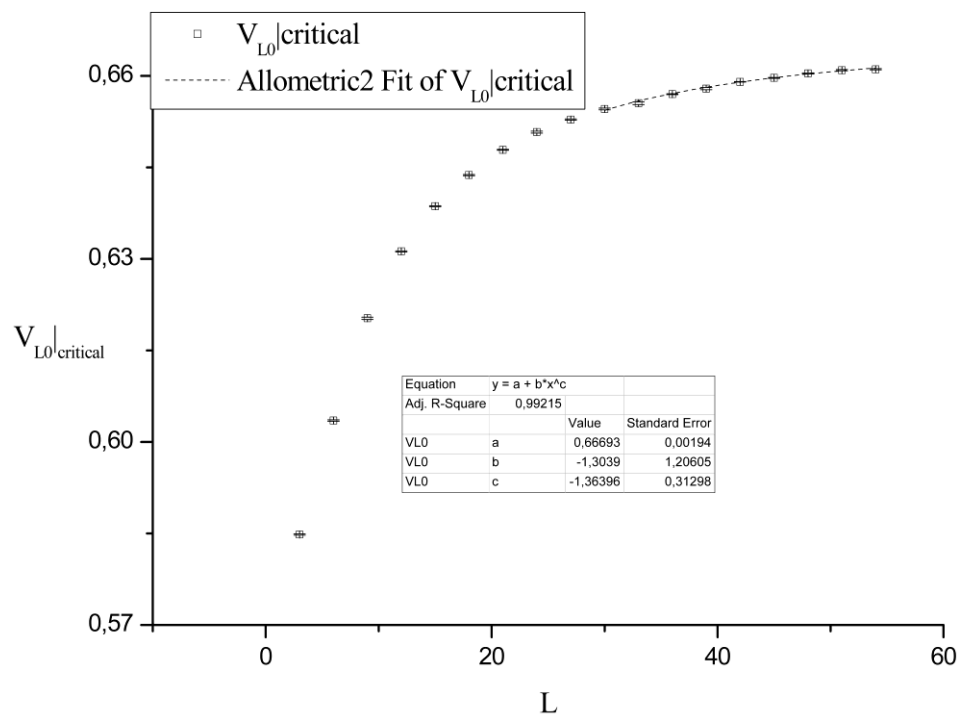
Πίνακας 8.6: Πίνακας τιμών των ελαχίστων του σωρευτή Binder V_{L0} για την ενέργεια και των αντίστοιχων κρίσιμων θερμοκρασιών για διάφορες τιμές του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου $H \leq 0$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγορίθμου εντροπικής δειγματοληψίας. Στον πίνακα απεικονίζονται επίσης και οι αντίστοιχοι κρίσιμοι εκθέτες, όπως προέκυψαν από τους σχετικούς υπολογισμούς.

H	T _c	δT _c	V _{0(min)}	δV _{0(min)}	1/v	δ(1/v)	α/v	δ(α/v)
+0,0	2,271	0,001	0,668	0,001	1,7	0,4	0,960	0,020
-0,1	2,33	0,01	0,667	0,001	0,8	0,7	0,640	0,060
-0,2	2,361	0,007	0,6676	0,0007	0,9	0,7	0,660	0,030
-0,4	2,405	0,008	0,6665	0,0002	0,8	0,3	0,572	0,005
-0,5	2,431	0,003	0,6662	0,0002	1,1	0,2	0,543	0,006
-0,6	2,44	0,01	0,6664	0,0001	1,0	0,6	0,529	0,007
-0,8	2,461	0,006	0,6667	0,0001	0,9	0,3	0,539	0,006
-1,0	2,475	0,005	0,6661	0,0001	1,0	0,3	0,485	0,005
-1,5	2,45	0,01	0,6665	0,0001	0,8	0,5	0,496	0,006
-2,0	2,391	0,007	0,6667	0,0001	1,1	0,4	0,490	0,010
-2,5	2,27	0,02	0,6667	0,0001	0,8	0,7	0,480	0,010
-3,0	2,10	0,03	0,667	0,0010	1,0	0,8	0,600	0,100
-3,5	1,878	0,009	0,6661	0,0001	1,2	0,6	0,380	0,009
-4,0	1,597	0,009	0,6670	0,0010	1,2	0,3	0,600	0,100
-4,5	1,24	0,02	0,6670	0,0010	1,9	0,9	0,600	0,200
-5,0	0,836	0,001	0,6650	0,0007	5,0	4,0	0,250	0,050

Με σκοπό ένα δεύτερο έλεγχο των αποτελεσμάτων μας, επαναλαμβάνουμε τη διαδικασία που ακολουθήσαμε στην §7.5 για την κρίσιμη θερμοχωρητικότητα και προσδιορίζουμε τις τιμές του σωρευτή V_{L0} στα κρίσιμα σημεία της ενότητας §8.1. Τα σχετικά αποτελέσματα φαίνονται στον πίνακα 8.7.

Εκείνα που αφορούν τον εκθέτη $\frac{\alpha}{\nu}$ είναι σε καλή συμφωνία τόσο με εκείνα του πίνακα 8.5 όσο και με όσα προέκυψαν στην §8.1. Παράλληλα, η οριακή τιμή του σωρευτή Binder για την ενέργεια, όπως φαίνεται τόσο στον πίνακα 8.5 όσο και στον 8.6, τείνει στα πλαίσια του στατιστικού σφάλματος στο $\frac{2}{3}$. Αυτά

επιβεβαιώνουν τη μαθηματική έκφραση (8.15) του σωρευτή του Binder για την ενέργεια στο κρίσιμο σημείο ενώ, σε συνδυασμό και με εκείνα του πίνακα 8.5, δείχνουν ότι το παρατηρούμενο ολικό του ελάχιστο οφείλεται στο πεπερασμένο μέγεθος του πλέγματος και προσοδευτικά εξαφανίζεται καθώς το προσομοιωμένο σύστημα μεγαλώνει. Κάτι τέτοιο όμως καθιστά δυσδιάκριτη την αλλαγή φάσης ανώτερης τάξης από την πλήρη απουσία μιας αλλαγής φάσης με βάση το συγκεκριμένο σωρευτή.

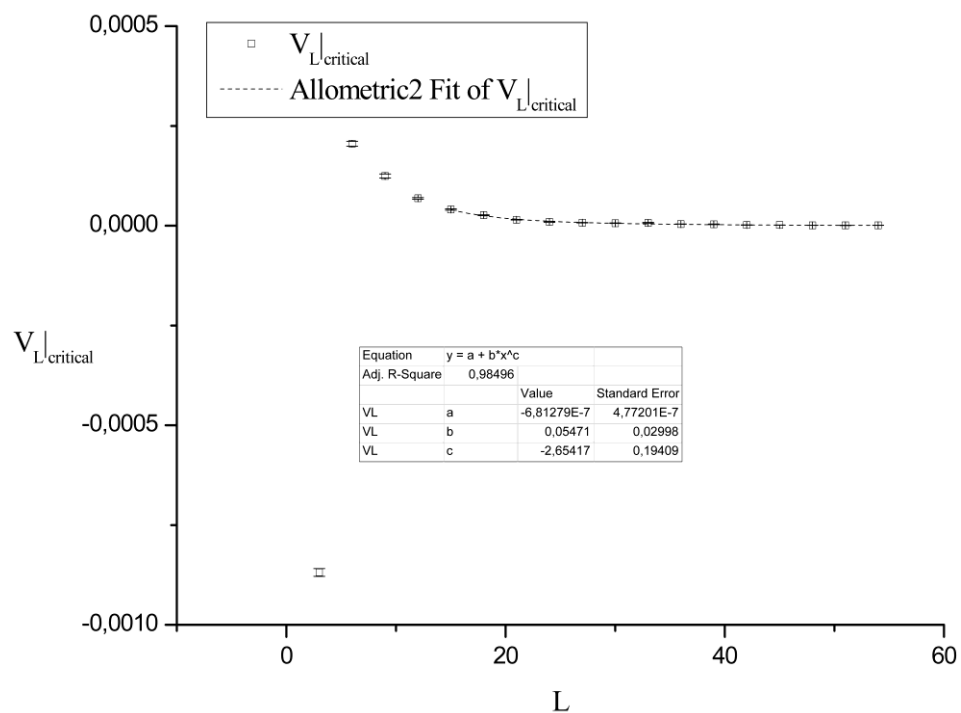


Διάγραμμα 8.13: Γραφική παράσταση του σωρευτή Binder V_{L0} σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 54×57 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες στο κρίσιμο σημείο με θερμοκρασία $\frac{k_B T_c}{J} = 1,883$ και εξωτερικό μαγνητικό πεδίο $H = -3,5$. Όλες οι προσομοιώσεις έχουν πραγματοποιηθεί με τον αλγόριθμο εντροπικής δειγματοληψίας.

Στη συνέχεια ερχόμαστε να εξετάσουμε τη συμπεριφορά του προτεινόμενου σωρευτή για την ενεργεια V_L που δίνεται από τις σχέσεις (8.16) και (8.17). Από την (8.18) συνάγεται ότι αυτός τείνει οριακά στη μηδενική τιμή στο κρίσιμο σημείο, ενώ ο αντίστοιχος εκθέτης είναι ίσος με $-2d + \frac{2a}{v}$, όπου, όπως είδαμε

πριν, ο λόγος $\frac{a}{v}$ παίρνει την τιμή 1 [29] για μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό

πεδίο και περίπου 0,5 για αρνητικό [112]. Ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα αναφέρεται στο διάγραμμα 8.14 και αφορά το μαγνητικό πεδίο $H = -3,5$. Στον πίνακα 8.7 φαίνεται και η συμπεριφορά του σωρευτή αυτού στα κρίσιμα σημεία του προτύπου Baxter-Wu για μηδενικό ή αρνητικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο, με βάση τα αποτελέσματα του αλγορίθμου εντροπικής δειγματοληψίας. Παρατηρούμε ότι οι οριακές τιμές του δε διαφοροποιούνται καθώς αλλάζει η Κλάση Παγκοσμιότητας, αφού είναι πρακτικά ίσες με το μηδέν τόσο στο κρίσιμο σημείο για μηδενικό πεδίο όσο και στα κρίσιμα σημεία για αρνητικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο.



Διάγραμμα 8.14: Γραφική παράσταση του προτεινόμενου σωρευτή ενέργειας V_L σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 54×57 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες στο κρίσιμο σημείο με θερμοκρασία $\frac{k_B T_c}{J} = 1,883$ και εξωτερικό μαγνητικό πεδίο $H = -3,5$. Όλες οι προσομοιώσεις έχουν πραγματοποιηθεί με τον αλγόριθμο εντροπικής δειγματοληψίας.

Πίνακας 8.7: Πίνακας κρίσιμων τιμών των σωρευτών ενέργειας V_{L0} , V_L για διάφορες τιμές του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου $H \leq 0$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγορίθμου εντροπικής δειγματοληψίας. Στον πίνακα απεικονίζονται επίσης και οι αντίστοιχοι εκθέτες (w ο εκθέτης του V_c), όπως προέκυψαν από τους σχετικούς υπολογισμούς.

H_c	T_c	$10^6 V_c$	$10^7 \delta V_c$	V_{0c}	δV_{0c}	w	δw	α/v	$\delta(\alpha/v)$
+0,0	2,270	8	6	0,67	0,3	1,3	0,3	1,0	0,8
-0,1	2,324	-4	10	0,667	0,004	2,7	0,3	0,7	0,4
-0,2	2,358	-4	1	0,667	0,002	2,6	0,1	0,6	0,3
-0,4	2,410	-1,9	5	0,667	0,002	2,7	0,1	0,7	0,2
-0,5	2,426	-1,9	3	0,668	0,002	3,1	0,2	0,7	0,3
-0,6	2,440	-1,9	2	0,671	0,003	2,9	0,1	1,1	0,2
-0,8	2,461	-2,0	4	0,670	0,001	2,5	0,1	1,04	0,08
-1,0	2,471	-1,9	3	0,668	0,002	2,4	0,1	0,7	0,2
-1,5	2,457	-1,3	4	0,665	0,002	2,4	0,1	0,5	0,2
-2,0	2,389	-1,0	3	0,668	0,002	2,6	0,1	0,8	0,3
-2,5	2,275	-1,4	3	0,669	0,003	2,5	0,1	0,9	0,4
-3,0	2,111	-1,4	5	0,667	0,002	2,31	0,09	0,6	0,4
-3,5	1,883	-1,4	4	0,667	0,002	2,37	0,09	0,6	0,3
-4,0	1,591	-1,3	4	0,668	0,003	2,34	0,08	0,8	0,3

Ένα επιπλέον σημείο που καλούμαστε να μελετήσουμε είναι η φυσική σημασία, αν υπάρχει, και η συμπεριφορά των τοπικών ακροτάτων του νέου σωρευτή V_L . Από διαγράμματα του προηγούμενου κεφαλαίου θυμόμαστε ότι αυτός παρουσιάζει στην κρίσιμη περιοχή τρία ακρότατα, ένα ολικό μέγιστο και δυο τοπικά ελάχιστα. Τα αποτελέσματα της μελέτης τους στα πλαίσια της Θεωρίας Κλιμάκωσης Πεπερασμένου Μεγέθους συγκεντρώνονται στους πίνακες 8.8, 8.9 και 8.10. Είναι προφανές ότι όλα αυτά τα ακρότατα τείνουν στο κρίσιμο σημείο στην αντίστοιχη σταθερή τιμή του σωρευτή V_L (τη μηδενική τιμή, όπως ήδη συζητήσαμε) και μάλιστα με νόμο δύναμης $L^{-2d+\frac{2\alpha}{v}}$. Ακόμα, οι θερμοκρασίες στις οποίες παρατηρούνται αυτά τείνουν στην κρίσιμη θερμοκρασία T_c για το αντίστοιχο εξωτερικό μαγνητικό πεδίο με νόμο δύναμης $L^{-\frac{1}{v}}$. Με απλά λόγια, οι κορυφές και τα βυθίσματα των διαγραμμάτων $V_L = f(T)$ εξαφανίζονται στο άπειρο πλέγμα, ταυτιζόμενα με τη χαρακτηριστική τιμή του

V_L , η οποία είναι ίση με το μηδέν. Αυτό φαίνεται καλύτερα στο διάγραμμα 8.15, το οποίο αναφέρεται σε εξωτερικό μαγνητικό πεδίο $H = -3,5$.

Πίνακας 8.8: Πίνακας θερμοκρασιών και τιμών αριστερού τοπικού ελαχίστου του προτεινόμενου σωρευτή ενέργειας V_L για διάφορες τιμές του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου $H \leq 0$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγορίθμου εντροπικής δειγματοληψίας. Στον πίνακα απεικονίζονται επίσης και οι αντίστοιχοι εκθέτες, όπως προέκυψαν από τους σχετικούς υπολογισμούς.

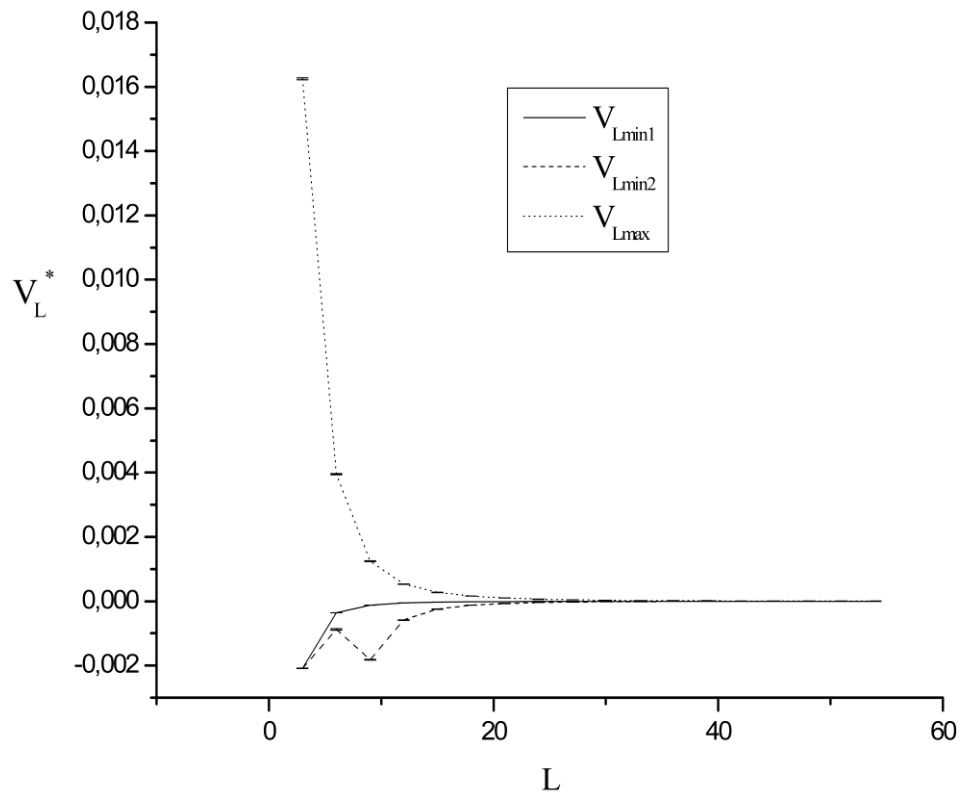
H	$T_{\min 1}$	$\delta T_{\min 1}$	$V_{(\min 1)}$	$\delta V_{(\min 1)}$	exponT	dexponT	Expon $V_{L(\min 1)}$	dexpon $V_{L(\min 1)}$
+0,0	2,276	0,007	$4 \cdot 10^{-5}$	$2 \cdot 10^{-5}$	1,7	0,5	1,9	0,3
-0,1	2,327	0,002	$3,7 \cdot 10^{-6}$	$7 \cdot 10^{-7}$	1,08	0,09	2,14	0,04
-0,2	2,360	0,005	$2,9 \cdot 10^{-6}$	$6 \cdot 10^{-7}$	1,1	0,1	2,22	0,04
-0,4	2,412	0,004	$2,5 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-7}$	1,1	0,1	2,26	0,02
-0,5	2,45	0,02	$1,2 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^{-7}$	0,6	0,4	2,43	0,03
-0,6	2,441	0,008	$1,7 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^{-7}$	1,0	0,2	2,35	0,02
-0,8	2,467	0,004	$1,7 \cdot 10^{-6}$	$2 \cdot 10^{-7}$	0,98	0,09	2,41	0,02
-1,0	2,49	0,03	$2,2 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-7}$	0,7	0,4	2,23	0,03
-1,5	2,462	0,005	$1,5 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^{-7}$	1,0	0,1	2,34	0,02
-2,0	2,397	0,005	$1,5 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^{-7}$	1,0	0,1	2,34	0,02
-2,5	2,286	0,008	$1,0 \cdot 10^{-6}$	$2 \cdot 10^{-7}$	0,9	0,1	2,48	0,01
-3,0	2,122	0,009	$1,0 \cdot 10^{-6}$	$1 \cdot 10^{-7}$	0,8	0,2	2,63	0,01
-3,5	1,897	0,009	$1,0 \cdot 10^{-6}$	$1 \cdot 10^{-7}$	0,8	0,2	2,70	0,04
-4,0	1,580	0,009	$1,0 \cdot 10^{-6}$	$1 \cdot 10^{-7}$	1,2	0,2	2,44	0,05
-4,5	1,225	0,009	$1,1 \cdot 10^{-6}$	$4 \cdot 10^{-7}$	1,0	0,2	2,62	0,03
-5,0	0,84	0,02	$1,6 \cdot 10^{-6}$	$4 \cdot 10^{-7}$	0,7	0,3	2,56	0,07

Πίνακας 8.9: Πίνακας θερμοκρασιών και τιμών δεξιού τοπικού ελαχίστου του προτεινόμενου σωρευτή ενέργειας V_L για διάφορες τιμές του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου $H \leq 0$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγορίθμου εντροπικής δειγματοληψίας. Στον πίνακα απεικονίζονται επίσης και οι αντίστοιχοι εκθέτες, όπως προέκυψαν από τους σχετικούς υπολογισμούς.

H	$T_{\min 2}$	$\delta T_{\min 2}$	$V_{L(\min 2)}$	$\delta V_{L(\min 2)}$	exponT	δexponT	expon $V_{L(\min 2)}$	δexpon $V_{L(\min 2)}$
+0,0	2,276	0,007	$6 \cdot 10^{-5}$	$3 \cdot 10^{-5}$	1,7	0,5	1,9	0,3
-0,1	2,340	0,004	10^{-6}	10^{-6}	1,54	0,09	3,23	0,05
-0,2	2,379	0,005	$6 \cdot 10^{-7}$	$7 \cdot 10^{-7}$	1,51	0,08	3,31	0,03
-0,4	2,413	0,002	$1,8 \cdot 10^{-6}$	$7 \cdot 10^{-7}$	1,28	0,04	3,30	0,02
-0,5	2,40	0,02	$2 \cdot 10^{-6}$	$1 \cdot 10^{-6}$	1,08	0,09	3,28	0,03
-0,6	2,450	0,001	$3 \cdot 10^{-6}$	$2 \cdot 10^{-6}$	1,31	0,03	3,23	0,04
-0,8	2,46	0,01	$4 \cdot 10^{-6}$	$2 \cdot 10^{-6}$	1,3	0,1	3,07	0,07
-1,0	2,482	0,006	$-3 \cdot 10^{-7}$	10^{-7}	1,3	0,1	3,574	0,009
-1,5	2,462	0,004	$-2,3 \cdot 10^{-7}$	$9 \cdot 10^{-8}$	1,25	0,05	3,63	0,01
-2,0	2,40	0,02	$-3 \cdot 10^{-7}$	10^{-7}	1,4	0,4	3,67	0,01
-2,5	2,278	0,006	$-3 \cdot 10^{-7}$	10^{-7}	1,23	0,06	3,72	0,02
-3,0	2,114	0,003	$-4 \cdot 10^{-7}$	$2 \cdot 10^{-7}$	1,29	0,03	3,73	0,03
-3,5	1,887	0,008	$-4 \cdot 10^{-7}$	$2 \cdot 10^{-7}$	1,28	0,08	3,75	0,05
-4,0	1,593	0,006	$-5 \cdot 10^{-7}$	$3 \cdot 10^{-7}$	1,31	0,06	3,80	0,05
-4,5	1,23	0,01	$-1,0 \cdot 10^{-6}$	$2 \cdot 10^{-7}$	1,3	0,2	3,93	0,05
-5,0	0,81	0,03	$-2,0 \cdot 10^{-6}$	$6 \cdot 10^{-7}$	1,2	0,3	4,17	0,05

Πίνακας 8.10: Πίνακας θερμοκρασιών και τιμών μεγίστου του προτεινόμενου σωρευτή ενέργειας V_L για διάφορες τιμές του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου $H \leq 0$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγορίθμου εντροπικής δειγματοληψίας. Στον πίνακα απεικονίζονται επίσης και οι αντίστοιχοι εκθέτες, όπως προέκυψαν από τους σχετικούς υπολογισμούς.

H	$T_{\max}$	$\delta T_{\max}$	$V_{L(\max)}$	$\delta V_{L(\max)}$	exponT	δexponT	expon $V_{L(\max)}$	δexpon $V_{L(\max)}$
+0,0	2,2685	0,0008	$8 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-5}$	1,52	0,06	1,7	0,2
-0,1	2,330	0,002	$-4 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^{-6}$	1,50	0,09	2,32	0,04
-0,2	2,363	0,001	$-2 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^{-6}$	1,36	0,06	2,84	0,09
-0,4	2,411	0,002	$-4 \cdot 10^{-6}$	$2 \cdot 10^{-6}$	1,28	0,07	2,78	0,03
-0,5	2,434	0,002	$-6 \cdot 10^{-6}$	$1 \cdot 10^{-6}$	1,40	0,08	2,73	0,03
-0,6	2,444	0,004	$-5 \cdot 10^{-6}$	$1 \cdot 10^{-6}$	1,34	0,08	2,76	0,02
-0,8	2,45	0,02	$-3,8 \cdot 10^{-6}$	$8 \cdot 10^{-7}$	1,0	0,03	2,81	0,02
-1,0	2,478	0,002	$-4,4 \cdot 10^{-6}$	$8 \cdot 10^{-7}$	1,4	0,1	2,73	0,02
-1,5	2,459	0,002	$-3,5 \cdot 10^{-6}$	$6 \cdot 10^{-7}$	1,25	0,08	2,79	0,02
-2,0	2,400	0,01	$-3,1 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-7}$	1,5	0,9	2,84	0,01
-2,5	2,280	0,002	$-2,9 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-7}$	1,30	0,06	3,02	0,03
-3,0	2,112	0,003	$-2,5 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-7}$	1,32	0,07	2,90	0,02
-3,5	1,887	0,003	$-2,5 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-7}$	1,36	0,08	2,90	0,02
-4,0	1,593	0,002	$-1,7 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-7}$	1,35	0,06	2,97	0,02
-4,5	1,21	0,01	$-9 \cdot 10^{-6}$	$4 \cdot 10^{-6}$	1,02	0,08	2,9	0,1
-5,0	0,82	0,02	$-8 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^{-6}$	1,1	0,4	3,00	0,03



Διάγραμμα 8.15: Γραφική παράσταση των τοπικών ακροτάτων V_L^* του προτεινόμενου σωρευτή V_L σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 54×57 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες υπό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο $H = -3,5$. Όλες οι προσομοιώσεις έχουν πραγματοποιηθεί με τον αλγόριθμο εντροπικής δειγματοληψίας.

Από τη μελέτη των σωρευτών που προηγήθηκε δεν προκύπτουν νέα σημαντικά συμπεράσματα αναφορικά με τους ενεργειακούς στατιστικούς σωρευτές V_L και V_{L0} , απλώς επιβεβαιώνονται όσα είχαν συζητηθεί στο κεφάλαιο 7 καθώς και οι τιμές των κρίσιμων εκθετών της αλλαγής φάσης για $H < 0$. Τα μεγαλύτερα σφάλματα που παρατηρούνται κατά τον προσδιορισμό των τελευταίων θα πρέπει να ερμηνευτούν όχι μόνο ως συνέπεια της χρησιμοποιούμενης αριθμητικής μεθόδου (αλγόριθμος εντροπικής δειγματοληψίας) αλλά και των σχετικά μικρού μεγέθους πλεγμάτων που προσομοιώθηκαν. Οπωσδήποτε απαιτείται επιβεβαίωση των αποτελεσμάτων μας με έναν αλγόριθμο μεγαλύτερης ακρίβειας, όπως εκείνον των πλειάδων τριγώνων.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 9: ΣΥΝΟΨΗ ΤΩΝ ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΩΝ.

Αντικείμενο της παρούσας διδακτορικής διατριβής είναι η μελέτη των αλλαγών φάσης ενός μαγνητικού προτύπου με αποκλειστικά τριπλές αλληλεπιδράσεις μεταξύ των spin-μαγνητικών ροπών, το οποίο είναι γνωστό ως μοντέλο Baxter-Wu. Φτάνοντας στο τέλος της εργασίας μας, κρίθηκε σκόπιμο να συνοψιστούν τα κυριότερα συμπεράσματα που προέκυψαν κατά τη διάρκειά της. Παράλληλα, αναφέρονται ορισμένα ζητήματα στα οποία δεν μπορέσαμε να δώσουμε ικανοποιητική απάντηση και συνεπώς πρέπει να αποτελέσουν αντικείμενο περαιτέρω επιστημονικών ερευνών. Τα κυριότερα συμπεράσματα που προέκυψαν είναι τα ακόλουθα:

1. Για τις ανάγκες της εργασίας μας αναπτύξαμε ένα νέο αλγόριθμο πλειάδων (cluster). Αντίθετα από όσους τέτοιους αλγόριθμους έχουν χρησιμοποιηθεί μέχρι τώρα, δημιουργεί πλειάδες τριγώνων και όχι μεμονωμένων σημείων [104]. Ο αλγόριθμος αυτός κατά την προσομοίωση των κρίσιμων σημείων μειώνει το δυναμικό κρίσιμο εκθέτη z ($z_m = 1,272 \pm 0,003$ και $z_E = 1,267 \pm 0,002$), συνεπώς περιορίζει το φαινόμενο της κρίσιμης επιβράδυνσης σημαντικά σε σχέση με εκείνον Metropolis ($z_m = 2,30 \pm 0,11$, $z_E = 2,09 \pm 0,07$) ενώ φαίνεται πως είναι λίγο καλύτερος από τον αντίστοιχο αλγόριθμο πλειάδων σημείων των Novotny και Evertz ($z_m = 1,435 \pm 0,005$, $z_E = 1,481 \pm 0,007$).
2. Ο δυναμικός κρίσιμος εκθέτης αυξάνει ($z_m = 1,8 \pm 0,1$ και $z_E = 1,7 \pm 0,2$) αν κάθε φορά αναστρέφεται το σύνολο της σχηματιζόμενης πλειάδας και όχι μόνο τα $\frac{2}{3}$ της, όπως έχει επικρατήσει [87], δείχνοντας την αναποτελεσματικότητα μιας τέτοιας επιλογής. Από την άλλη, φαίνεται ότι, σε αντίθεση με το διδιάστατο μοντέλο Ising, στο πρότυπο Baxter-Wu η χρήση πολλαπλών πλειάδων (αλγόριθμοι τύπου Swendsen-Wang) είναι αποτελεσματικότερη [48], ενώ προσφέρεται για την περίπτωση παράλληλων υπολογιστικών συστημάτων. Ωστόσο, η σημασία του νέου αλγορίθμου θα τεκμηριωθεί περαιτέρω όταν χρησιμοποιηθεί και για τη μελέτη κρίσιμων αλλαγών φάσης παρουσία μαγνητικού πεδίου καθώς και μεταβάσεων φάσης πιο σύνθετων προτύπων με τριπλές αλληλεπιδράσεις όπως το Dilute Baxter-Wu μοντέλο.
3. Σε κάθε περίπτωση η μείωση του δυναμικού κρίσιμου εκθέτη με τη χρήση αλγορίθμων πλειάδων στο πρότυπο Baxter-Wu δε φαίνεται εξίσου αποτελεσματική με τον αλγόριθμο Wolff στο μοντέλο Ising, όπου έχει βρεθεί ότι στις δυο διαστάσεις $z \approx 0,25$ ([88], [103]). Το γεγονός αυτό πιθανώς σχετίζεται με τη θέση του κατωφλίου διαφυγής (percolation threshold- [106]). Συνεκτιμώντας και τους περιορισμούς που θέτει η ανισότητα των Li και Sokal [107], τα αποτελέσματά μας για

το δυναμικό κρίσιμο εκθέτη z κρίνονται μάλλον ικανοποιητικά, συνυπολογίζοντας και τα αντίστοιχα βέλτιστα αποτελέσματα στο πρότυπο Ising για αλγορίθμους πλειάδων ([88], [103]).

4. Στο καλά γνωστό κρίσιμο σημείο με $H = 0$, ένα πρώτο συμπέρασμα είναι ότι τα αποτελέσματα των αριθμητικών μας προσομοιώσεων επιβεβαιώνουν τις υπάρχουσες θεωρητικές προβλέψεις της Θεωρίας Κλιμάκωσης Πεπερασμένου Μεγέθους για τα μαγνητικά μεγέθη, τη θερμοχωρητικότητα και την εσωτερική ενέργεια ([17], [18], [29]). Μάλιστα, για τους κρίσιμους εκθέτες της κατανομής μαγνήτισης, της ισόθερμης μαγνητικής επιδεκτικότητας καθώς και για τους μαγνητικούς στατιστικούς σωρευτές το σφάλμα των αποτελεσμάτων μας περιορίζεται στο τρίτο δεκαδικό ψηφίο. Τα βελτιωμένα αυτά αποτελέσματα σε σχέση με παλαιότερες δημοσιεύσεις οφείλονται στη χρήση του νέου αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων [108]. Τονίζουμε το γεγονός ότι με τη χρήση αλγορίθμων ανεξάρτητων αναστροφών spin-μαγνητικών ροπών όπως ο Metropolis στο κρίσιμο σημείο θα προέκυπταν αποτελέσματα μικρότερης ακρίβειας για τη μαγνητική επιδεκτικότητα (το σφάλμα εμφανίζεται τότε στο δεύτερο δεκαδικό ψηφίο), ενώ για ορισμένα μεγέθη όπως οι σωρευτές Binder θα ήταν πρακτικά αδύνατο να προκύψει κάποιο ακριβές συμπέρασμα. Επιπλέον, ο νέος αλγόριθμος δίνει σωστές εκτιμήσεις και για την κρίσιμη θερμοκρασία παρότι οι δημιουργούμενες πλειάδες είναι αριετά μεγάλες και πάνω από αυτή ([106]).
5. Ένα ιδιαίτερα ενδιαφέρον συμπέρασμα που ως τώρα διέφευγε της προσοχής των ερευνητών είναι πως η πυκνότητα πιθανότητας της μαγνήτισης στο κρίσιμο σημείο εξαρτάται ισχυρά από τις συνοριακές συνθήκες. Έτσι, στην περίπτωση υποπλεγμάτων- τμημάτων μεγαλύτερου πλέγματος υπάρχει περιοχή πλεγματοικών μεγεθών όπου επαληθεύεται η γνωστή σχέση κλιμάκωσης [22]

$$P_{L_0}(m) = L^x \tilde{P}(mL^y) \quad (9.1),$$

όπου $\tilde{P}(\psi)$ είναι μια ανακλιμακωμένη συνάρτηση, η μαθηματική έκφραση της οποίας δίνεται στη [44], ενώ αν η υπόθεση υπερκλιμάκωσης είναι έγκυρη, οι εκθέτες x και y είναι ίσοι με το λόγο $\frac{\beta}{\nu}$ ([22], [109], [110], [111]). Μάλιστα, οι περιοχές αυτή επεκτείνεται όσο μεγαλώνει το μέγεθος του συνολικού πλέγματος. Αντίθετα, για ανεξάρτητα πλέγματα και περιοδικές συνοριακές συνθήκες η (9.1) εξακολουθεί να ισχύει αλλά τώρα ο εκθέτης x γίνεται μηδέν [108]. Εικάζουμε ότι αυτό το συμπέρασμα θα μπορούσε να επεκταθεί και για άλλα πρότυπα πέρα από το Baxter-Wu.

6. Ένα άλλο ενδιαφέρον συμπέρασμα είναι η εξίσου ισχυρή εξάρτηση των σωρευτών Binder για τη μαγνήτιση από τις συνοριακές συνθήκες στο κρίσιμο σημείο, πράγμα άλλωστε αναμενόμενο αφού και η κρίσιμη πυκνότητα πιθανότητας μαγνήτισης, με την οποία συνδέονται άμεσα, παρουσιάζει τέτοια εξάρτηση. Οι υπάρχουσες θεωρητικές προβλέψεις για αυτούς, δηλαδή η εξίσωση των Salas και Sokal [67] και η πιο σύνθετη της ερευνητικής ομάδας των Deng και Blöte ([70], [71], [72]), οι οποίες στηρίζονται στις σχέσεις Κλιμάκωσης Πεπερασμένου Μεγέθους, επαληθεύονται μόνο για ανεξάρτητα πλέγματα και περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Από την άλλη, οι σωρευτές σε συνάρτηση με το μέγεθος του πλέγματος, για όλα τα υποπλέγματα τύπου Binder με μεγέθη μεγαλύτερα ή ίσα του 12, ακολουθούν τη λεγόμενη «λογιστική καμπύλη», η οποία δίνεται από τη σχέση

$$y = A_2 + \frac{A_1 - A_2}{1 + \left(\frac{L}{L_0}\right)^w} \quad (9.2),$$

όπου A_1 , A_2 , L_0 και w είναι σταθερές. Σε κάθε περίπτωση πάντως οι τιμές των σωρευτών Binder της μαγνήτισης στο κρίσιμο σημείο μηδενικού εξωτερικού μαγνητικού πεδίου συγκλίνουν καθώς το πλεγματοί μέγεθος μεγαλώνει σε μια σταθερή τιμή, όπως προβλέπεται στη φαινομενολογική θεωρία του Kurt Binder ([22], [23]). Η τιμή αυτή προκύπτει για το πρότυπό μας $0,066 \pm 0,002$, δηλαδή κατά προσέγγιση $\frac{1}{15}$. Αυτήν παίρνουν κατά προσέγγιση και τα 3×6 υποπλέγματα Binder, εφόσον τουλάχιστον το εξωτερικό πλέγμα με τις περιοδικές συνοριακές συνθήκες είναι αρκετά μεγάλο.

7. Στην κρίσιμη περιοχή, το ελάχιστο του λόγου Binder Q_L στο θερμοδυναμικό όριο συμπίπτει με τη σταθερή τιμή του για μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Η μικρή απόκλιση μάλιστα μεταξύ των τιμών του παρούσα και απουσία μαγνητικού πεδίου οφείλεται μάλλον σε ένα σταθερό όρο διορθώσεων που εισάγει το τελευταίο στο λόγο Binder Q_L . Στην περίπτωση του μοντέλου Ising ([70], [71], [72]) αυτό το ελάχιστο συμπίπτει για κάθε μέγεθος πλέγματος με την κρίσιμη τιμή του λόγου Binder Q_L . Αυτή η απόκλιση στη συμπεριφορά των δυο μοντέλων συνδέεται με τις διαφορετικές συμμετρίες τους.
8. Τα αποτελέσματα της παρούσας εργασίας, τα οποία έχουμε επιβεβαιώσει πέραν του αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων, τόσο με τον αλγόριθμο Metropolis όσο και με εκείνον της εντροπικής δειγματοληψίας (Entropic Sampling) των Wang και Landau, δίνουν για το λόγο Binder την οριακή τιμή

$$Q^* = 0,357 \pm 0,002 \quad (9.3),$$

που είναι λιγότερο από το 50% εκείνης που υπολόγισαν το 2008 οι Zhang και Deng [75] με τη βοήθεια προσομοιώσεων Monte Carlo για ένα πλέγμα- αέριο της ίδιας Κλάσης Παγκοσμιότητας. Αυτό σημαίνει, αν φυσικά κάποια πλευρά δεν έχει κάνει κάποιο σοβαρό λάθος, ότι οι σωρευτές Binder και άλλα μεγέθη που σχετίζονται με αυτούς, όπως η ανακλιμακωμένη κρίσιμη κατανομή μαγνήτισης, δεν είναι κοινοί σε όλα τα συστήματα με τους ίδιους κρίσιμους εκθέτες, όπως συχνά σήμερα πιστεύεται.

9. Οι σωρευτές Binder U_L και U_{L0} καθώς και ο λόγος Binder Q_L , όταν $H = 0$ παίρνουν στο πρότυπο Baxter-Wu άλλη τιμή για $T < T_c$ (αλλαγή φάσης 1^{st} τάξης), $T = T_c$ (αλλαγή φάσης ανώτερης τάξης) και $T > T_c$ (πααραμαγνητική συμπεριφορά, καμιά αλλαγή φάσης). Λαμβάνοντας υπόψη τόσο αυτά όσο και άλλα παρόμοια αποτελέσματα τόσο της παρούσας εργασίας όσο και άλλων ([22], [23]) συμπεραίνουμε ότι οι σωρευτές αυτοί μπορούν να αποτελέσουν ένα αρκετά ασφαλές κριτήριο για τον εντοπισμό των αλλαγών φάσης ποικίλων θεωρητικών προτύπων, με ιδιότητες λιγότερο ή περισσότερο γνωστές, και την ταξινόμησή τους σε 1^{st} και ανώτερης τάξης. Το πρόβλημα είναι πως η εργαστηριακή τους μέτρηση δεν είναι διόλου εύκολη [74] και συνήθως προκύπτουν με θεωρητικούς υπολογισμούς ή αριθμητικές μεθόδους, όπως οι προσομοιώσεις Monte Carlo.
10. Ως γενική παρατήρηση, ο λόγος του Binder Q_L και ο αντίστοιχος σωρευτής U_{L0} φαίνεται να παρέχουν λιγότερες πληροφορίες για τη μορφή της κατανομής $P_L(m)$ παρουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου σε σχέση με τον U_L , προκύπτουν όμως απλούστερα από προσομοιώσεις Monte Carlo, αφού απαιτούν λιγότερες αριθμητικές πράξεις, πράγμα το οποίο αποβαίνει χρήσιμο κατά τη μελέτη της κρίσιμης συμπεριφοράς.
11. Η πυκνότητα πιθανότητας ενέργειας ανά δεσμό στο κρίσιμο σημείο δεν είναι κανονική αλλά υπακούει σε μια σχέση κλιμάκωσης [41], της γενικής μορφής

$$P_L(E) = L^x \tilde{P}[(E - E_0)L^y] \quad (9.4),$$

όπου η ανακλιμακωμένη συνάρτηση $\tilde{P}(\psi)$ ενδέχεται να είναι παγκόσμια στα πλαίσια μιας Κλάσης Οικουμενικότητας, ωστόσο η ακριβής συναρτησιακή της σχέση παραμένει άγνωστη. Ο σταθερός όρος E_0 είναι η λεγόμενη «κεντρική τιμή» της ενέργειας, με άλλα λόγια η τιμή της ενέργειας ανά δεσμό η οποία βρίσκεται στο κέντρο της κατανομής της ενέργειας. Αυτή ισούται με τη μέση ενέργεια, η οποία

στο πρότυπο Baxter-Wu παίρνει την τιμή $-\frac{\sqrt{2}}{2}$, ενώ οι εκθέτες κλιμάκωσης y και x παίρνουν την τιμή $\frac{d}{2} - \frac{\alpha}{2v} = \frac{1}{2}$ αντίστοιχα, όπου α και v οι γνωστοί κρίσιμοι εκθέτες. Η προτεινόμενη εξίσωση (9.4) φαίνεται να έχει γενικότερη ισχύ αλλά χρειάζεται σημαντική τροποποίηση αν θέλουμε να περιγράψουμε πλέγματα με μέγεθος $L \leq 15$.

12. Ξεινώνοντας από την (9.2) και τις γνωστές σχέσεις κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους για την ελεύθερη ενέργεια και τη θερμοχωρητικότητα, παράγεται με αυστηρότερο τρόπο η σχέση κλιμάκωσης της διαφοράς της ελάχιστης τιμής $V_{L0}^{\min}$ του σωρευτή της ενέργειας [24] από τη σταθερή τιμή V_0^* [46], δηλαδή η

$$V_0^* - V_{L0}^{\min} = L^{-d+\frac{\alpha}{v}} \tilde{V}(tL^{\frac{1}{v}}) \quad (9.5),$$

όπου t είναι η γνωστή ανηγμένη θερμοκρασία, με την τιμή T_{0L} στη θέση της απόλυτης θερμοκρασίας T . Επιπλέον, εισάγονται διορθώσεις της μορφής $O(L^{-d})$ και $O\left(L^{-2d+\frac{2\alpha}{v}}\right)$, ενώ παράλληλα προκύπτει ότι η

οριακή τιμή V_0^* είναι ίση με $\frac{2}{3}$, όπως αν η (9.2) έπαιρνε τη μορφή κανονικής κατανομής (κατανομής Gauss), πράγμα που προφανώς δε συμβαίνει στο κρίσιμο σημείο. Τα παραπάνω αποτελέσματα επαληθεύονται με ακριβείς Monte Carlo προσομοιώσεις

13. Στα πλαίσια της παρούσας διατριβής εισάγουμε ένα διαφορετικό ανηγμένο σωρευτή 4^{th} τάξης τύπου Binder [23] για την ενέργεια, το

$$V_L = -\frac{\langle E^4 \rangle_L^{\text{con}}}{3\langle E^2 \rangle_L^2} \quad (9.6),$$

όπου

$$\langle E^4 \rangle_L^{\text{con}} = \langle E^4 \rangle_L - 3\langle E^2 \rangle_L^2 - 4\langle E \rangle_L \langle E^3 \rangle_L + 12\langle E^2 \rangle_L \langle E \rangle_L^2 - 6\langle E \rangle_L^4 \quad (9.7),$$

ενώ ο συμβολισμός “con” σημαίνει “conventional”, δηλαδή «συμβατικός». Ο ανηγμένος σωρευτής για την ενέργεια που προτείνουμε δεν εμφανίζει καλύτερη συμπεριφορά σε ότι αφορά τη διάκριση των

αλλαγών φάσης σε σχέση με εκείνον που αρχικά προτάθηκε από τους Challa, Landau και Binder [24], αφού οι τιμές του είναι μηδενικές είτε στα κρίσιμα σημεία είτε όταν δεν παρατηρείται αλλαγή φάσης.

14. Στο κρίσιμο σημείο η σχέση κλιμάκωσης για τον προτεινόμενο σωρευτή της ενέργειας προκύπτει ίση με

$$V_L = O(L^{-d}) + O\left(L^{-d+\frac{\alpha}{\nu}}\right) \quad (9.8).$$

Αυτή περιέχει τους κρίσιμους εκθέτες της Κλάσης Παγκοσμιοτητας στην οποία ανήκει το εξεταζόμενο σύστημα. Φυσικά, ανακύπτει ένα εύλογο ερώτημα σχετικά με τη συμπεριφορά του V_L στις αλλαγές φάσης 1^{ου} είδους, ωστόσο η απάντηση σε αυτό απαιτεί λεπτομερέστερες αριθμητικές προσομοιώσεις σε περιοχή όπου παρατηρείται τέτοια φασική μετατροπή.

15. Πολύ ικανοποιητικά αποτελέσματα [112] προκύπτουν κατά την εφαρμογή του αλγορίθμου Wang-Landau αν αντί για όλες τις ενέργειες περιοριστούμε στον υπόχωρο $-2N \leq E \leq -\frac{2N}{3}$, όπου N ο αριθμός των spin-μαγνητικών ροπών του συστήματος. Όμως ο υπόχωρος αυτός πρέπει να διευρυνθεί όταν $H \geq 0$.
16. Παρουσία αρνητικού εξωτερικού μαγνητικού πεδίου το μοντέλο Baxter-Wu εμφανίζει κρίσιμη αλλαγή φάσης κατά μήκος της φασικής γραμμής $H_c = H_c(T)$ η οποία ξεκινά από το σημείο $(-6J, 0)$ και καταλήγει στο γνωστό κρίσιμο σημείο $(0, T_c)$ [112].
17. Τα κρίσιμα σημεία κατά μήκος της φασικής γραμμής $H_c = H_c(T)$ φαίνεται να ανήκουν σε μια νέα Κλάση Παγκοσμιοτητας με κρίσιμους εκθέτες $\nu \approx 1,00 \pm 0,02$, $\beta \approx 0,75 \pm 0,05$, $\gamma \approx 0,40 \pm 0,05$, $\alpha \approx 0,50 \pm 0,01$ [112]. Αυτές οι τιμές φαίνεται πως δεν επαληθεύουν τη σχέση υπερκλιμάκωσης ούτε ορισμένες άλλες γνωστές ανισοτικές σχέσεις μεταξύ των κρίσιμων εκθετών, όπως εκείνη του Rushbrooke ή του Josephson [3]. Σε κάθε περίπτωση, η επαλήθευση αυτού του αποτελέσματος απαιτεί επανάληψη των προσομοιώσεών μας με μια ακριβέστερη μέθοδο, όπως οι αλγόριθμοι πλειάδων και η μέθοδος της Monte Carlo Επανακανονικοποίησης (Monte Carlo Renormalization).
18. Τα αποτελέσματά μας [112] υποστηρίζουν την παρουσία χάσματος-ασυνέχειας (gap) στις τιμές των κρίσιμων εκθετών για αρνητικές τιμές του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου κοντά στην τιμή $H = 0$ ([53], [113]).

19. Το κρίσιμο σημείο $(0, T_c)$ φαίνεται [6] πως είναι ένα απωστικό κρίσιμο σημείο (irrelevant critical point) ενώ το άλλο χαρακτηριστικό σημείο του φασικού διαγράμματος $(-6J, 0)$ θα πρέπει λογικά να συμπεριφέρεται σαν ελκτικό κρίσιμο σημείο (relevant critical point). Εξίσου πιθανή είναι και η παρουσία ενός άλλου πολυκρίσιμου σημείου (multicritical point) κατά μήκος της φασικής γραμμής, όπως γνωρίζουμε [114] ότι συμβαίνει στο μοντέλο Blume-Capel ή στο spin-1 πρότυπο Baxter-Wu παρουσία κρυσταλλικού πεδίου. Ο έλεγχος της τελευταίας υπόθεσης όμως απαιτεί την ανάπτυξη κατάλληλου Μετασχηματισμού Επανακανονικοποίησης (Renormalization Transformation).
20. Η φαινομενολογική θεωρία που ανέπτυξαν οι Binder και Landau για τις κατανομές μαγνήτισης περιγράφει σε γενικές γραμμές ικανοποιητικά τις αλλαγές φάσης στο πρότυπο Baxter-Wu, προβλέποντας τη συμπεριφορά μεγεθών όπως η συνολική μαγνητική ροπή ανά δομικό λίθο, η ισόθερμη μαγνητική επιδεικτικότητα ανά δομικό λίθο και οι σωρευτές Binder U_L και U_{L0} . Αυτό σε συνδυασμό και με παρεμφερή αποτελέσματα για άλλα πρότυπα ([22], [23], [24], [67], [70], [71], [72]), αποτελούν ισχυρές ενδείξεις της γενικής ισχύος των αρχών της.

Κλείνοντας την παρούσα εργασία, θα θέλαμε να τονίσουμε πως παρά την προσπάθεια που καταβλήθηκε, το θέμα των αλλαγών φάσης του απλού προτύπου Baxter-Wu απέχει πολύ από το να θεωρηθεί εξαντλημένο. Ενδεικτικά αναφέρουμε ορισμένα θέματα που κατά την άποψή μας χρειάζονται περαιτέρω μελέτη.

1. Ο ακριβέστερος αριθμητικός υπολογισμός των κρίσιμων εκθετών για αρνητικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο με τη χρήση κατάλληλων αλγορίθμων πλειάδων αλλά και μεθόδων Monte Carlo Επανακανονικοποίησης (Monte Carlo Renormalization).
2. Η εύρεση μιας αναλυτικής συναρτησιακής έκφρασης για την ανακλιμακωμένη κατανομή της μαγνήτισης παρουσία αρνητικού εξωτερικού μαγνητικού πεδίου και αναλυτικών συναρτησιακών εκφράσεων για την ανακλιμακωμένη κατανομή της ενέργειας τόσο για μηδενικό όσο και για αρνητικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Επίσης η εύρεση αναλυτικής συναρτησιακής έκφρασης για τη σχέση $H_c = H_c(T)$.
3. Περαιτέρω διερεύνηση της συμπεριφοράς του προτεινόμενου σωρευτή Binder για αλλαγές φάσης 1^{st} και ανώτερης τάξης τόσο στο πρότυπο Baxter-Wu όσο και σε άλλα μοντέλα.
4. Διερεύνηση τυχόν ύπαρξης παραμέτρου τάξης για την περιγραφή όλων των αλλαγών φάσης του μοντέλου Baxter-Wu με πιο προφανή φυσική

σημασία σε σχέση με τις ήδη υπάρχουσες ([35], [36], [37], [38], [39], [40], [54], [55], [56]).

5. Διερεύνηση τυχόν εξάρτησης της κρίσιμης κατανομής ενέργειας και των αντίστοιχων σωρευτών από τις συνοριακές συνθήκες.
6. Διερεύνηση τυχόν ύπαρξης αλλαγής φάσης μεταξύ της $(+ + +)$ και της $(- - -)$ περιοχής σε υψηλές θερμοκρασίες και χαρακτηρισμός της.
7. Ανάπτυξη κατάλληλου Μετασχηματισμού Επανακανονικοποίησης (Renormalization Transformation) για την περιγραφή του προτύπου Baxter-Wu παρουσία μαγνητικού πεδίου.
8. Διερεύνηση της αλλαγής φάσης κοντά στο χαρακτηριστικό σημείο του φασικού διαγράμματος $(-6J, 0)$ και έλεγχος τυχόν παρουσίας άλλου πολυκρίσιμου σημείου κατά μήκος της φασικής γραμμής. Γενικότερα, χρειάζεται συστηματική μελέτη του προτύπου σε πολύ χαμηλές θερμοκρασίες.
9. Περαιτέρω αξιολόγηση του νέου αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων όταν εφαρμόζεται είτε με τη μέθοδο πολλαπλών πλειάδων, είτε παρουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου είτε σε πιο σύνθετα συστήματα, όπως το Dilute Baxter-Wu πρότυπο.

Θεωρούμε ότι τα παραπάνω σημεία θα αποτελέσουν αντικείμενα συστηματικής επιστημονικής έρευνας τα επόμενα χρόνια, σε συνδυασμό φυσικά με την προσπάθεια επαλήθευσης ορισμένων γενικότερων συμπερασμάτων της παρούσας εργασίας σε διάφορα άλλα μοντέλα, απλούστερα ή πιο σύνθετα, αλλά και σε πραγματικά πειραματικά συστήματα. Σε κάθε περίπτωση, το παρόν πόνημα, σε συνδυασμό με τις επιστημονικές εργασίες που το συνοδεύουν, είτε είναι ήδη δημοσιευμένες είτε πρόκειται να δημοσιευτούν, αποτελεί μια μικρή προσφορά στην ανάπτυξη της υπολογιστικής στατιστικής φυσικής και της μελέτης των αλλαγών φάσης, η οποία ανοίγει νέους δρόμους στην κατανόηση και στην προσομοίωση των φυσικών συστημάτων.

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑΤΑ

Α.Το Υπολογιστικό Κέντρο του Πανεπιστημίου Αθηνών

Το Υπολογιστικό Κέντρο αποτελεί τη μονάδα του Εθνικού και Καποδιστριακού Πανεπιστημίου Αθηνών που είναι εξοπλισμένη με ισχυρά συστήματα υπολογιστών για τη κάλυψη των μεγάλων υπολογιστικών αναγκών του προσωπικού του Ιδρύματος. Εκτός των κεντρικών υπολογιστών, το Υπολογιστικό Κέντρο διαθέτει το κατάλληλο υλικό και λογισμικό για τις ιδιαίτερες και ποικίλες υπολογιστικές απαιτήσεις των χρηστών.

Το Υπολογιστικό Κέντρο παρέχει τεχνική υποστήριξη στους χρήστες του και σε πολλές περιπτώσεις υποστηρίζει και τα συστήματα των εργαστηρίων Τμημάτων. Στεγάζεται στο κτήριο Πληροφορικής στη Πανεπιστημιούπολη και λειτουργεί διαρκώς (24 ώρες - 7 ημέρες), δεδομένου ότι στους υπολογιστές του εκτελούνται προγράμματα διάρκειας αριστών ημερών ή εβδομάδων. Η συνεχής λειτουργία του (ακόμη και σε περιπτώσεις διακοπών της ΔΕΗ ή προγραμματισμένων συντηρήσεων) εξασφαλίζεται με κεντρικό σύστημα αδιάλειπτης παροχής ρεύματος (UPS) μεγάλης ισχύος, ηλεκτροπαραγωγό ζεύγος (H/Z) καθώς και με τη συνεχή παρουσία ειδικευμένου προσωπικού.

Είναι υπεύθυνο για την εν γένει καλή λειτουργία των κεντρικών υπολογιστικών συστημάτων και τη κάλυψη των μεγάλων υπολογιστικών αναγκών των μελών του Πανεπιστημίου. Πιο αναλυτικά είναι αρμόδιο για:

- Τη διαχείριση και καλή λειτουργία των υπολογιστών (κεντρικών συστημάτων και μικρότερων μηχανών)
- Τη διαρκή συντήρηση των μηχανημάτων (υπολογιστών και λοιπού υποστηρικτικού εξοπλισμού)
- Την εγκατάσταση, διαχείριση και διανομή των απαραίτητων προϊόντων λογισμικού
- Τη τεχνική υποστήριξη των χρηστών στην αξιοποίηση των μηχανών και των προϊόντων του Υ/Κ
- Την εκπαίδευση των χρηστών στα νέα προϊόντα υλικού και λογισμικού.

Διοικητικά υπάγεται στη Διεύθυνση Μηχανοργάνωσης σαν Τμήμα Κεντρικού Ηλεκτρονικού Υπολογιστή. Το Υπολογιστικό Κέντρο παρέχει πρόσβαση σε μηχανές με λειτουργικό σύστημα UNIX στους ερευνητές και χρήστες του Πανεπιστημίου. Οι χρήστες μπορούν να χρησιμοποιούν τα εγκατεστημένα λογισμικά του Υπολογιστικού Κέντρου, να αναπτύσσουν δικά τους προγράμματα, να εκτυπώνουν στους εκτυπωτές του Υπολογιστικού Κέντρου κα Απομακρυσμένη πρόσβαση στα υπολογιστικά συστήματα γίνεται μόνο μέσω προγραμμάτων τύπου SSH (putty, ssh, κ.ά.).

Για υπολογισμούς υψηλών επιδόσεων HPC (High Performance Computing) υπάρχουν:

1. Ο παράλληλος υπολογιστής Uranus:

Ο Uranus είναι μοντέλο HP-Superdome. Περιέχει 64 επεξεργαστές 64 bit HP PA-RISC 8600 (στα 552 MHz), με κοινή μνήμη (shared memory) 40 GB. Το λειτουργικό σύστημα είναι HP-UX 11i v2. Ένα εξωτερικό σύστημα δίσκων με την αρχιτεκτονική RAID 5 και με μέγιστη χωρητικότητα 1,6 TB παρέχει αποθηκευτική δυνατότητα στους χρήστες. Η πρόσβαση των χρηστών στον Uranus γίνεται μέσω της μηχανής erato.cc.uoa.gr (195.134.68.68) μέσω secure shell (SSH). Είσοδος στον Uranus δεν επιτρέπεται. Η erato (HP-UX 11i v1, 2 CPUs PA-RISC 8600) διαθέτει τους ίδιους μεταφραστές και βιβλιοθήκες με τον Uranus. Οι χρήστες προετοιμάζουν τη μετάφραση των προγραμμάτων στην erato από όπου υποβάλλουν τις εργασίες τους για εκτέλεση στον Uranus μέσω του Torque-PBS συστήματος ουρών. Ομοίως και για τη χρήση των παραπάνω επιστημονικών λογισμικών υποβάλλεται η εκτέλεσή τους στον Uranus.

2. To xt cluster:

Το xt cluster αποτελείται από 6 τετραπύρηνους (AMD - Phenom 3,00 GHz) υπολογιστές. Έχουν μνήμη 4 GB RAM και το λειτουργικό τους σύστημα είναι Linux Centos 5. Οι χρήστες κάνουν login στο μηχάνημα xt20.cc.uoa.gr (195.134.68.20) και εκεί χρησιμοποιούν τα εργαλεία που υπάρχουν για την παραγωγή του εκτελέσιμου προγράμματος. Στη συνέχεια, χρησιμοποιώντας το σύστημα ουρών Torque-PBS, υποβάλλουν εργασίες σε έναν ή περισσότερους κόμβους κάθε φορά. Σε κάθε έναν από τους κόμβους (xt21, xt22, xt23, xt24, xt25) μπορούν να εκμεταλλευτούν την παραλληλία των 4 cores που υπάρχουν.

3. To cluster Ithaca:

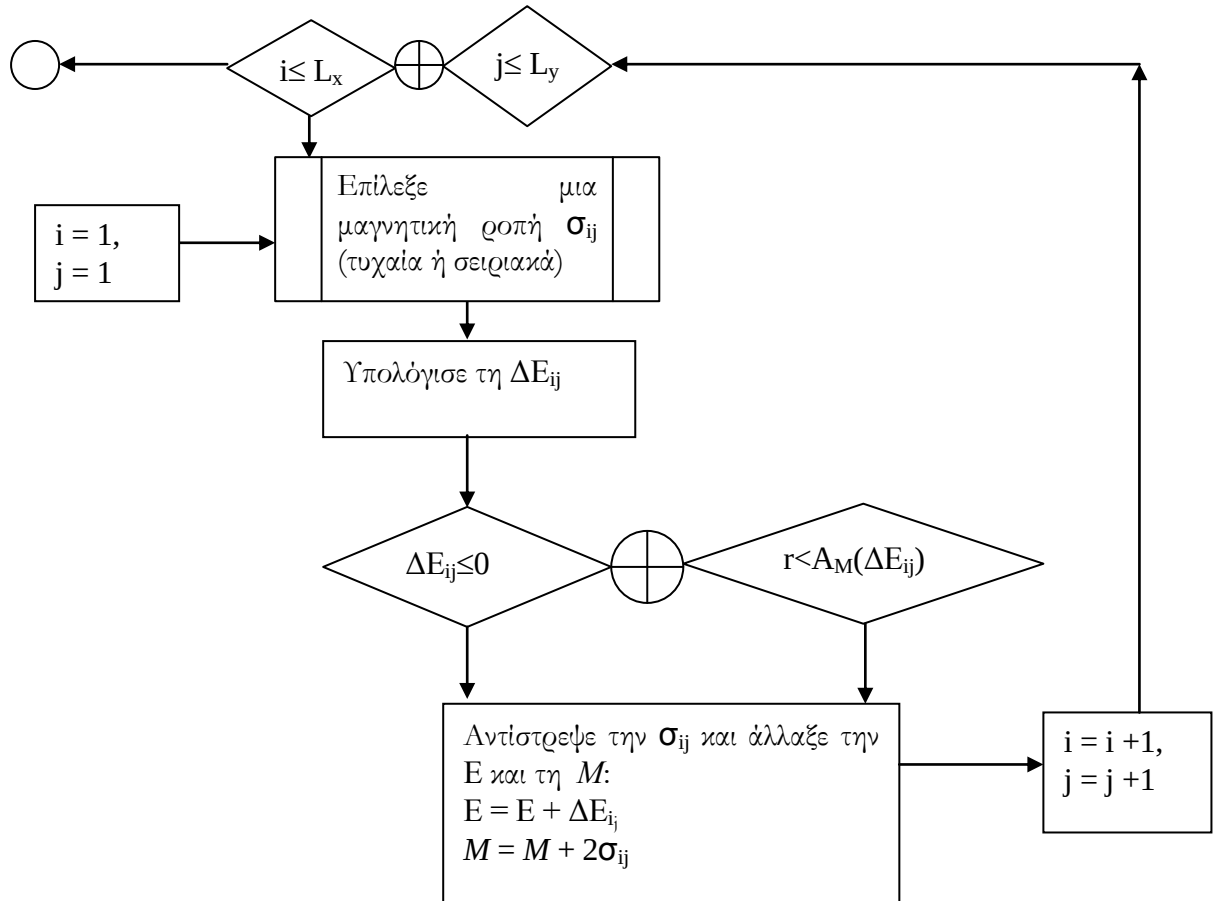
Το cluster Ithaca αποτελείται από 31 συρταρωτούς υπολογιστές τύπου rack με επεξεργαστές Intel Xeon 2,40 GHz τεχνολογίας υπερνηματισμού (Hyper threading- HT) και έναν κεντρικό Server (Ithaca- 2 επεξεργαστές Intel Xeon 2,40 GHz HT, 5 GB RAM). Καθένας τους φέρει 5 GB μνήμης RAM και το λειτουργικό τους σύστημα είναι Linux Red Hat 4. Αγοράστηκε από την εταιρεία IBM και στήθηκε υπό την επίβλεψη του καθηγητή του τμήματος Φυσικής του Ε.Κ.Π.Α. κυρίου Ευστράτιου Μανουσάκη. Το σύστημα ανήκει στο οικείο τμήμα, όμως το Υπολογιστικό Κέντρο του Πανεπιστημίου Αθηνών βοηθά τα τελευταία χρόνια στη διαχείριση του και στην εύρυθμη λειτουργία του. Στο μέλλον θα μπορούσε να αποτελέσει τη βάση ενός αποκεντρωμένου Υπολογιστικού Κέντρου για τις ανάγκες του τμήματος Φυσικής. Οι χρήστες κάνουν login στο μηχάνημα Ithaca (195.134.94.90) και εκεί χρησιμοποιούν τα εργαλεία που υπάρχουν για την παραγωγή του εκτελέσιμου προγράμματος. Στη συνέχεια, χρησιμοποιώντας το σύστημα ουρών Torque-PBS, υποβάλλουν εργασίες σε έναν ή περισσότερους κόμβους κάθε φορά. Σε κάθε έναν από τους

κόμβους (node01, node02, ..., node31) μπορούν να εκμεταλλευτούν την
παράλληλία των 2 cores που υπάρχουν.

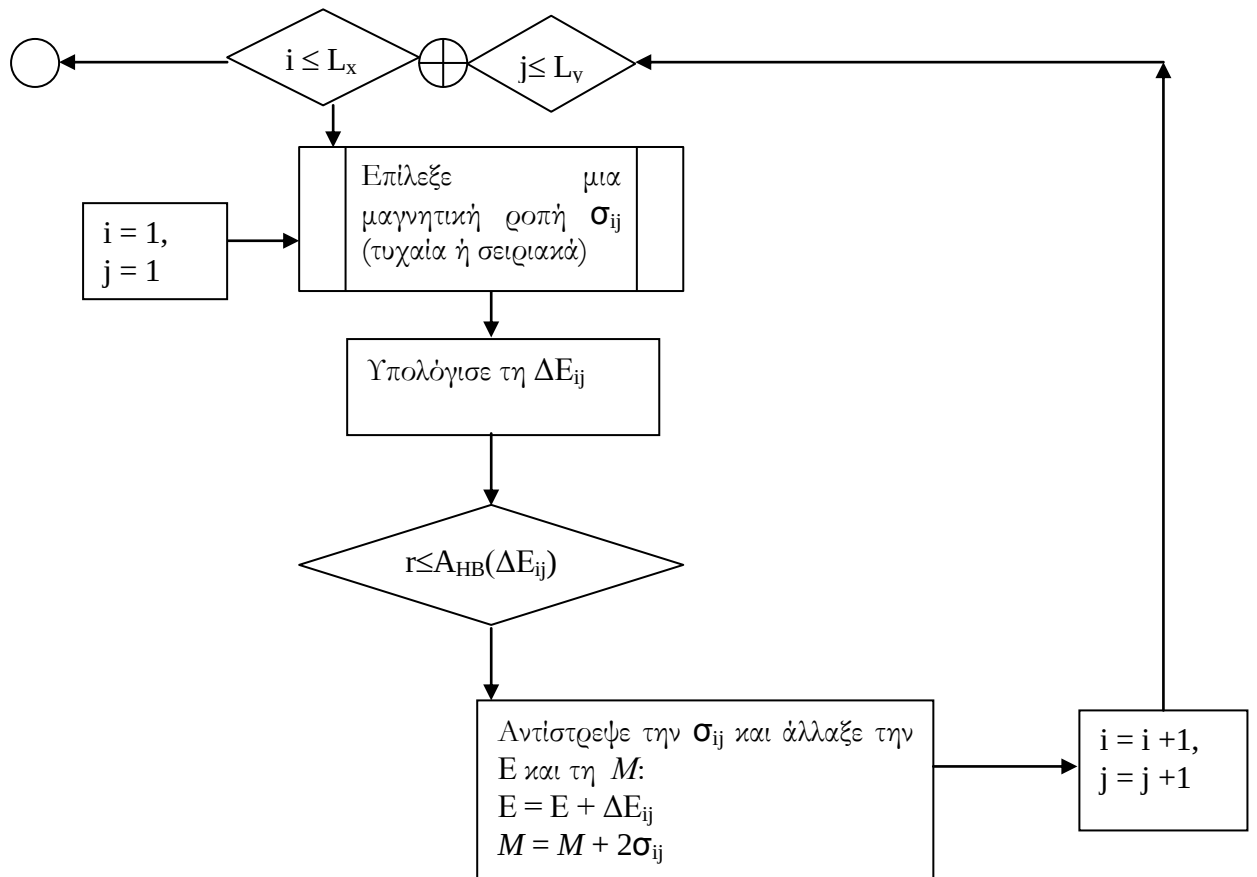


Εικόνα Α.1: Το cluster Υπολογιστικό Σύστημα Ithaca του τμήματος Φυσικής του Πανεπιστημίου Αθηνών.

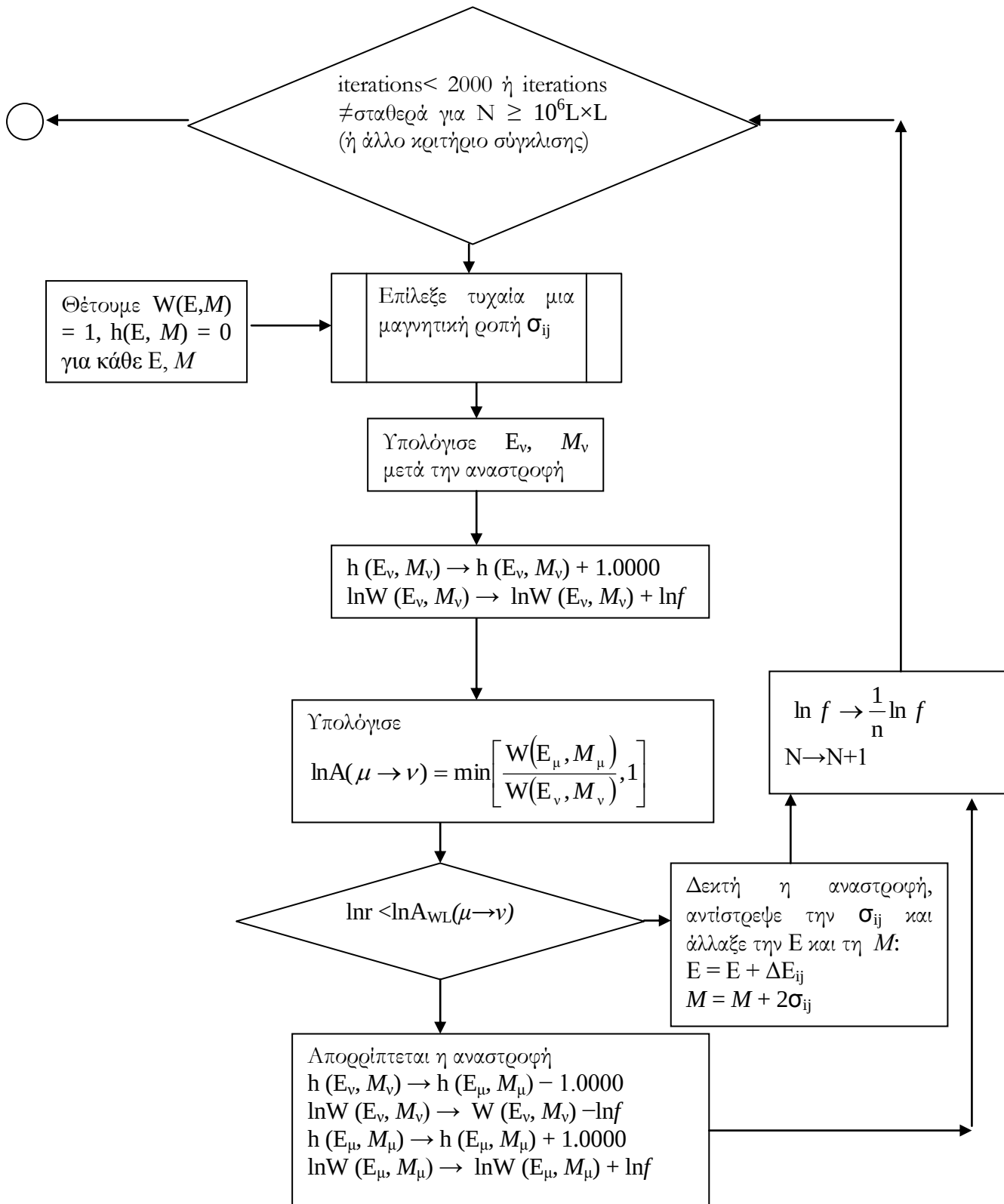
Β.Διαγράμματα ροής αλγορίθμων



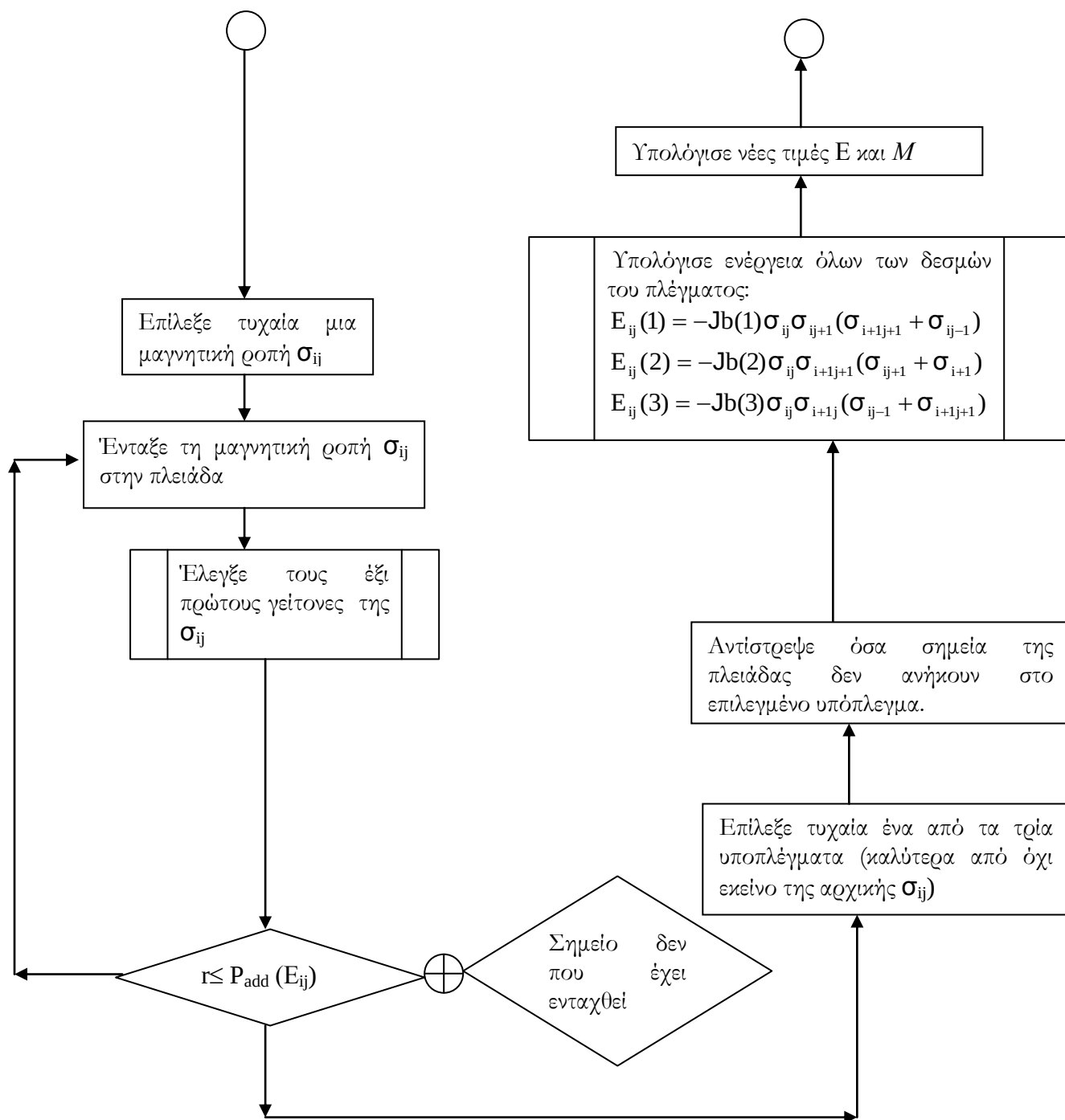
Διάγραμμα Β.1: Διάγραμμα ροής διαδικασίας- υποπρογράμματος προγραμμάτων προσομοίωσης στην οποία υλοποιείται ο αλγόριθμος Metropolis.



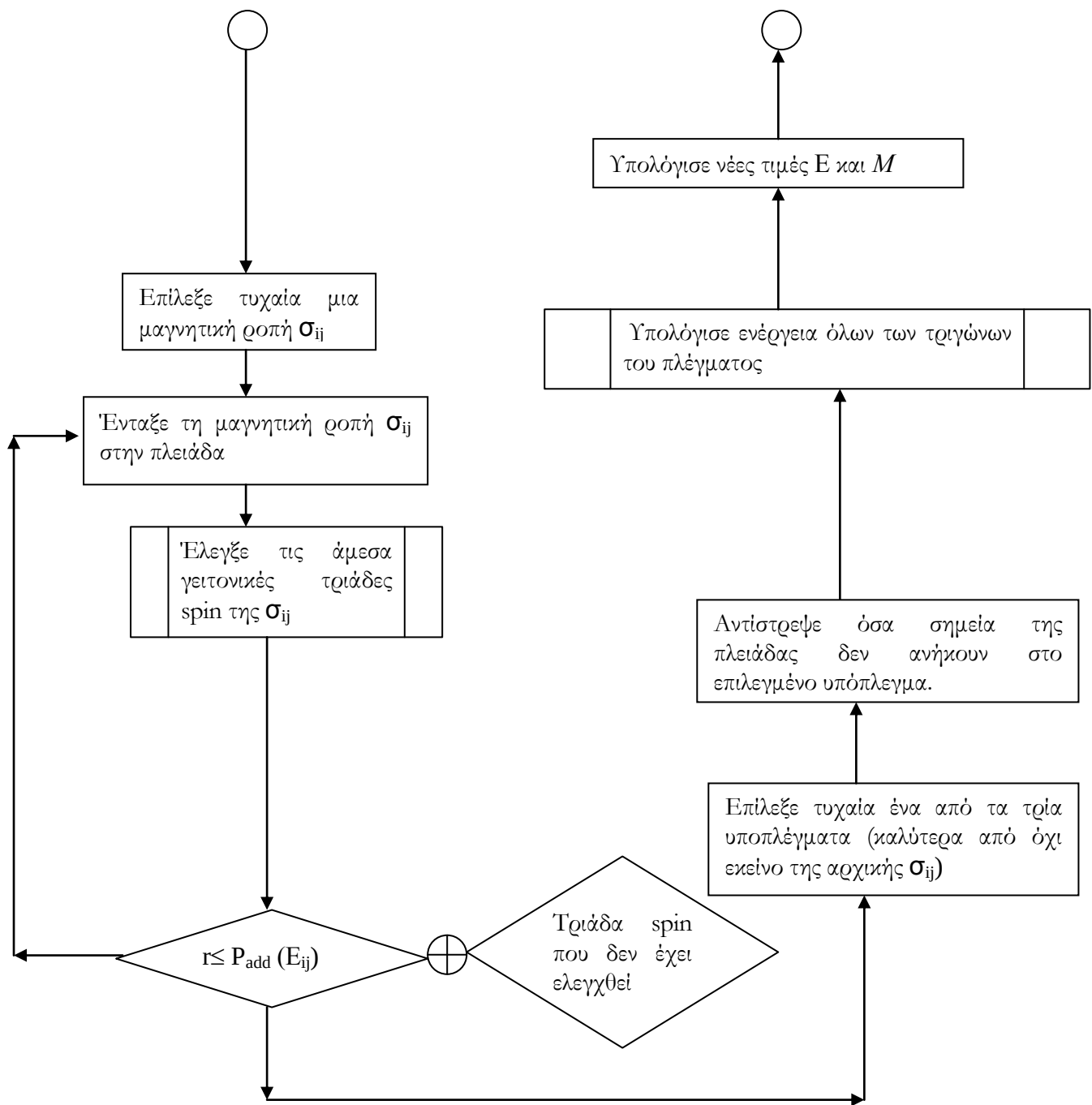
Διάγραμμα B.2: Διάγραμμα ροής διαδικασίας-υποπρογράμματος προγραμμάτων προσομοίωσης στην οποία υλοποιείται ο αλγόριθμος Heat-Bath.



Διάγραμμα B.3: διάγραμμα ροής διαδικασίας-υποπρογράμματος προγραμμάτων προσομοίωσης στην οποία υλοποιείται ο αλγόριθμος Wang- Landau (Entropic Sampling).



Διάγραμμα B.4: διάγραμμα ροής διαδικασίας-υποπρογράμματος προγραμμάτων προσομοίωσης στο οποίο υλοποιείται ο αλγόριθμος πλειάδων (cluster) των Novotny και Evertz



Διάγραμμα B.5: διάγραμμα ροής διαδικασίας-υποπρογράμματος προγραμμάτων προσομοίωσης στο οποίο υλοποιείται ο αλγόριθμος πλειάδων τριγώνων (triangle cluster algorithm).

C.Κώδικες γεννητριών τυχαίων αριθμών

```
!*****  
! PORTABLE RANDOM NUMBER GENERATORS  
!*****
```

```
FUNCTION RAN01(IDUM)  
!RANDOM NUMBER GENERATOR  
!(BETTER THAN THE INTRINSIC ONE- GIVE A NEGATIVE SEED)  
INTEGER*4 IDUM,IA,IM,IQ,IR,NTAB,NDIV  
REAL*4 RAN01,AM,EPS,RNMX  
PARAMETER(IA=16807,IM=2147483647,AM=1.000/REAL(IM),&  
&IQ=127773,IR=2836,NTAB=32,NDIV=1+(IM-1)/NTAB,&  
&EPS=1.2E-7,RNMX=1.000-EPS)  
INTEGER*4 J,K,IV(NTAB),IY  
SAVE IV,IY  
DATA IV/NTAB*0/,IY/0/  
IF(IDUM.LE.0.OR.IY.EQ.0)THEN  
IDUM=MAX(-IDUM,1)  
DO J=NTAB+8,1,-1  
K=IDUM/IQ  
IDUM=IA*(IDUM-K*IQ)-IR*K  
IF(IDUM.LT.0) IDUM=IDUM+IM  
IF(J.LE.NTAB) IV(J)=IDUM  
ENDDO  
IY=IV(1)  
ENDIF  
K=IDUM/IQ  
IDUM=IA*(IDUM-K*IQ)-IR*K  
IF(IDUM.LT.0) IDUM=IDUM+IM  
J=1+IY/NDIV  
IY=IV(J)  
IV(J)=IDUM  
RAN01=MIN(AM*IY,RNMX)  
RETURN  
ENDFUNCTION
```

```
!*****
```

```
FUNCTION RAN02(IDUM)  
!AN EVEN BETTER BUT SLOWER RANDOM NUMBER  
!GENERATOR, SIMILAR TO RAN01 BUT WITH SHUFFLING  
!(BETTER THAN THE INTRINSIC ONE- GIVE A NEGATIVE SEED)
```

```

INTEGER*4
IDUM,IM1,IM2,IMM1,IA1,IA2,IQ1,IQ2,IR1,IR2,NTAB,NDIV
REAL*4 RAN02,AM,EPS,RNMX
PARAMETER (IM1=2147483563,IM2=2147483399,AM=1.000/IM1,&
&IMM1=IM1-1,IA1=40014,IA2=40692,IQ1=53668,IQ2=52774,&
&IR1=12211,IR2=3791,NTAB=32,NDIV=1+IMM1/NTAB,&
&EPS=1.2E-7,RNMX=1.000-EPS)
INTEGER*4 IDUM2,J,K,IV(NTAB),IY
SAVE IV,IY,IDUM2
DATA IDUM2/123456789/,IV/NTAB*0/,IY/0/
IF(IDUM.LE.0)THEN
IDUM=MAX(-IDUM,1)
IDUM2=IDUM
DO J=NTAB+8,1,-1
K=IDUM/IQ1
IDUM=IA1*(IDUM-K*IQ1)-IR1*K
IF(IDUM.LT.0) IDUM=IDUM+IM1
IF(J.LE.NTAB) IV(J)=IDUM
ENDDO
IY=IV(1)
ENDIF
K=IDUM/IQ1
IDUM=IA1*(IDUM-K*IQ1)-IR1*K
IF(IDUM.LT.0) IDUM=IDUM+IM1
K=IDUM2/IQ2
IDUM2=IA2*(IDUM2-K*IQ2)-IR2*K
IF(IDUM2.LT.0) IDUM2=IDUM2+IM2
J=1+IY/NDIV
IY=IV(J)-IDUM2
IV(J)=IDUM
IF(IY.LT.1)IY=IY+IMM1
RAN02=MIN(AM*IY,RNMX)
RETURN
ENDFUNCTION

```

!*****

```

FUNCTION RAN03(IDUM)
!KNUTHS RANDOM NUMBER GENERATOR (BETTER THAN THE
!INTRINSIC ONE- GIVE A NEGATIVE SEED)
INTEGER*4 IDUM
INTEGER*4 MBIG,MSEED,MZ
!REAL*4 MBIG,MSEED,MZ
REAL*4 RAN03,FAC
PARAMETER(MBIG=1000000000,MSEED=161803398,&
&MZ=0,FAC=1.0000/MBIG)

```

```

!PARAMETER(MBIG=4000000.000,MSEED=1618033.000,&
&MZ=0.0000,FAC=1.0000/MBIG)
INTEGER*4 I,IFF,II,INEXT,INEXTP,K
INTEGER*4 MJ,MK,MA(55)
!REAL*4 MJ,MK,MA(55)
SAVE IFF,INEXT,INEXTP,MA
DATA IFF/0/
IF(IDUM.LT.0.OR.IFF.EQ.0)THEN
  IFF=1
  MJ=ABS(MSEED-ABS(IDUM))
  MJ=MOD(MJ,MBIG)
  MA(55)=MJ
  MK=1
  DO I=1,54
    II=MOD(21*I,55)
    MA(II)=MK
    MK=MJ-MK
    IF(MK.LT.MZ)MK=MK+MBIG
    MJ=MA(II)
  ENDDO
  DO K=1,4
    DO I=1,55
      MA(I)=MA(I)-MA(1+MOD(I+30,55))
      IF(MA(I).LT.MZ)MA(I)=MA(I)+MBIG
    ENDDO
  ENDDO
  INEXT=0
  INEXTP=31
  IDUM=1
  ENDIF
  IF(INEXT.EQ.56)INEXT=1
  INEXTP=INEXTP+1
  IF(INEXTP.EQ.56)INEXTP=1
  MJ=MA(INEXT)-MA(INEXTP)
  IF(MJ.LT.MZ)MJ=MJ+MBIG
  MA(INEXT)=MJ
  RAN03=MJ*FAC
  RETURN
ENDFUNCTION

```

```

!*****

```

```

FUNCTION RAN0(IDUM)
!MARSAGLIA SHIFT RANDOM NUMBER GENERATOR (MAYBE
!THE BEST LINEAR CONGRUENTIAL GENERATOR- GIVE A
!NEGATIVE SEED)

```

```

IMPLICIT NONE
INTEGER,PARAMETER::K4B=SELECTED_INT_KIND(9)
INTEGER(K4B),INTENT(INOUT)::IDUM
REAL::RAN0
INTEGER(K4B),PARAMETER::IA=16807,IM=2147483647,IQ=127773,
&IR=2836
REAL,SAVE::AM
INTEGER(K4B),SAVE::IX=-1,IY=-1,K
IF(IDUM<=0.OR.IY<0)THEN
AM=NEAREST(1.0,-1.0)/IM
IY=IOR(IEOR(888889999,ABS(IDUM)),1)
IX=IEOR(777755555,ABS(IDUM))
IDUM=ABS(IDUM)+1
ENDIF
IX=IEOR(IX,ISHFT(IX,13))
IX=IEOR(IX,ISHFT(IX,-17))
IX=IEOR(IX,ISHFT(IX,5))
K=IY/IQ
IY=IA*(IY-K*IQ)-IR*K
IF(IY<0)IY=IY+IM
RAN0=AM*IOR(IAND(IM,IEOR(IX,IY)),1)
RETURN
ENDFUNCTION RAN0

```

!*****

```

SUBROUTINE RAN2P_S(HARVEST)
!A RANDOM NUMBER GENERATOR FOR USE IN PARALLEL
!PROGRAMS.COMBINES A LAGGED FIBONACCI GENERATOR
!WITH A MARSAGLIA SHIFT SEQUENCE AND A LINEAR
!CONGRUENTIAL GENERATOR.BETTER THAN THE INTRINSIC
!ONE.
USE NRTYPE
USE RAN_STATE,ONLY: K4B,AMM,LENRAN,&
&RAN_INIT,IRAN0,JRAN0,KRAN0,MRAN0,NRAN0,RANS
IMPLICIT NONE
REAL(SP),INTENT(OUT):: HARVEST
IF(LENRAN<1)CALL RAN_INIT(1)
RANS=IRAN0-KRAN0
IF(RANS<0)RANS=RANS+2147483579_K4B
IRAN0=JRAN0
JRAN0=KRAN0
KRAN0=RANS
!MARSAGLIA SHIFT SEQUENCE
NRAN0=IEOR(NRAN0,ISHFT(NRAN0,13))
NRAN0=IEOR(NRAN0,ISHFT(NRAN0,-17))

```

```

NRAN0=IEOR(NRAN0,ISHFT(NRAN0,5))
RANS=IAND(MRAN0,65535)
MRAN0=ISHFT(3533*ISHFT(MRAN0-16),&
&+RANS,16)+3533*RANS+820265819_K4B
!COMBINE THE GENERATORS
RANS=IEOR(NRAN0,KRAN0)+MRAN0
!MAKES THE RESULT POSITIVE
HARVEST=AMM*MERGE(RANS,NOT(RANS),RANS<0)
ENDSUBROUTINE RAN2P_S

```

```

!*****

```

```

SUBROUTINE RAN2P_V(HARVEST)
!A RANDOM NUMBER GENERATOR FOR USE IN PARALLEL
!PROGRAMS.COMBINES A LAGGED FIBONACCI GENERATOR
!WITH A MARSAGLIA SHIFT SEQUENCE AND A LINEAR
!CONGRUENTIAL GENERATOR.BETTER THAN THE INTRINSIC
!ONE.
USE NRTYPE
USE RAN_STATE,ONLY: K4B,AMM,LENRAN,&
&RAN_INIT,IRAN,JRAN,KRAN,MRAN,NRAN,RANV
IMPLICIT NONE
REAL(SP),DIMENSION(:),INTENT(OUT):: HARVEST
INTEGER(K4B)::N
N=SIZE(HARVEST)
IF(LENRAN<N+1)CALL RAN_INIT(N+1)
RANV(1:N)=IRAN(1:N)-KRAN(1:N)
WHERE(RANV(1:N)<0)RANV(1:N)=RANV(1:N)+2147483579_K4B
IRAN(1:N)=JRAN(1:N)
JRAN(1:N)=KRAN(1:N)
KRAN(1:N)=RANV(1:N)
!MARSAQGLIA SHIFT SEQUENCE
NRAN(1:N)=IEOR(NRAN(1:N),ISHFT(NRAN(1:N),13))
NRAN(1:N)=IEOR(NRAN(1:N),ISHFT(NRAN(1:N),-17))
NRAN(1:N)=IEOR(NRAN(1:N),ISHFT(NRAN(1:N),5))
RANV(1:N)=IAND(MRAN(1:N),65535)
MRAN(1:N)=ISHFT(3533*ISHFT(MRAN(1:N),-
16)+RANV(1:N),16)+3533*RANV(1:N)+820265819_K4B
!COMBINE THE GENERATORS
RANV(1:N)=IEOR(NRAN(1:N),KRAN(1:N))+MRAN(1:N)
!MAKES THE RESULT POSITIVE
HARVEST=AMM*&
&MERGE(RANV(1:N),NOT(RANV(1:N)),RANV(1:N)<0)
ENDSUBROUTINE RAN2P_V

```

```

!*****

```

D.Κώδικας αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων

```
!*****
!WOLFF ALGORITHM FOR BAXTER-WU MODEL(ERGODIC)
!*****

SUBROUTINE
TRIANGLECLUSTERBLOCK(LATTICE1,BINDERBLOCK1,PADD,
NBX,NBY,LMP,L1,L2,N0,ASRL,M,E)
!CREATES THE TRIANGLE-CLUSTER
USE D2BWWNBLVARDECLARATION
USE D2BWWNBLINTERFACES
IMPLICIT NONE
!DECLARE STRUCTURES
TYPE(LATTICE),INTENT(INOUT),DIMENSION(:,:),POINTER:: ,&
&LATTICE1
TYPE(BINDERBLOCK),INTENT(INOUT),DIMENSION(:),&
&POINTER, , OPTIONAL:: BINDERBLOCK1
!DECLARE ARRAYS
INTEGER(2),INTENT(IN),DIMENSION(:),&
&POINTER,OPTIONAL::NBX
INTEGER(2),INTENT(IN),DIMENSION(:),&
&POINTER,OPTIONAL::NBY
!DECLARE VARIABLES
INTEGER(2),INTENT(IN),OPTIONAL::LMP
INTEGER(2),INTENT(IN):: L1,L2,N0
INTEGER(2),INTENT(INOUT):: M
REAL(4),INTENT(INOUT):: E
REAL(8),INTENT(IN):: ASRL,PADD
CALL MAKECLUSTER(LATTICE1,L1,L2,N0,ASRL,PADD)
CALL CHANGESPINBLOCK&
& (LATTICE1,BINDERBLOCK1,NBX,NBY,LMP,L1,L2,M,E)
ENDSUBROUTINE TRIANGLECLUSTERBLOCK

!*****

SUBROUTINE MAKECLUSTER(LATTICE1,L1,L2,N0,ASRL,PADD)
!CREATES THE TRIANGLE-CLUSTER
USE D2BWWNBLVARDECLARATION
USE D2BWWNBLINTERFACES
IMPLICIT NONE
!DECLARE VARIABLES
INTEGER(2),INTENT(IN):: L1,L2,N0
INTEGER(2) I,J,IP,ICOUNT1,ICOUNT2,IPHASE, &
&ICURRENT,JCURRENT,NPX,NPY,NMX,NMY
```

```

REAL(4) RDM
REAL(8),INTENT(IN):: ASRL,PADD
!DECLARE STRUCTURES
TYPE(LATTICE),INTENT(INOUT),DIMENSION(:,:),&
&POINTER:: LATTICE1
!DECLARE ARRAYS
INTEGER(2),DIMENSION(:,:),POINTER::CBQUEUE
!ALLOCATE ARRAYS
ALLOCATE(CBQUEUE(1:3,L1*L2))
!INITIAL VALUES FOR VARIABLES
NSIZE=0
IREV=0
M3=0
MM2=0
NN2=0
MM20=0
NN20=0
RNSIZE=0.0000
RM3=0.0000
!INITIAL VALUES FOR ARRAYS
LATTICE1.IFLUG=0
LATTICE1.ICHECK(1)=0
LATTICE1.ICHECK(2)=0

!CHOOSE THE SEED SPIN FOR THE CLUSTER,PUT IT ON THE
CLUSTER TO FLIP IT LATER
!RANDOM
CALL RAN2P(RDM)
I=1+L1*RDM
CALL RAN2P(RDM)
J=1+L2*RDM
LATTICE1(I,J).IFLUG=1
IFLUGS0(1)=LATTICE1(I,J).IFLUGS
!KEEP SPIN VALUE TO USE IT LATER
NOLDSPIN=LATTICE1(I,J).LAT
CBQUEUE(1,1)=I
CBQUEUE(2,1)=J
CBQUEUE(3,1)=1
NSIZE=1
ICOUNT1=0
ICOUNT2=1
IPHASE=2

!CHOOSE THE SUBLATTICE WHICH WILL NOT BE FLIPPED
!(1ST WAY)
CALL RAN2P(RDM)

```



```

IF(RDM>RCONST2)THEN
IFLUGS0(2)=3
ELSEIF(RDM>RCONST1)THEN
IFLUGS0(2)=2
ELSE
IFLUGS0(2)=1
ENDIF

```

```

!CHOOSE THE SUBLATTICE WHICH WILL NOT BE FLIPPED
!(2ND WAY)
!IF(IFLUGS0(1)==1)THEN
!IF(RDM>0.5000)THEN
!IFLUGS0(2)=3
!ELSE
!IFLUGS0(2)=2
!ENDIF
!ELSEIF(IFLUGS0(1)==2)THEN
!IF(RDM>0.5000)THEN
!IFLUGS0(2)=3
!ELSE
!IFLUGS0(2)=1
!ENDIF
!ELSE
!IF(RDM>0.5000)THEN
!IFLUGS0(2)=2
!ELSE
!IFLUGS0(2)=1
!ENDIF
!ENDIF

```

```

DO
!CREATES THE CLUSTER USING FIFO BUFFER (CIRCULAR
!BUFFERING)
IF(ICOUNT1==ICOUNT2) EXIT
!A WAY TO CONTROL THE CLUSTER
!PULL A SITE OFF THE QUEUE
ICOUNT1=NP1(ICOUNT1,N0)
ICURRENT=CBQUEUE(1,ICOUNT1)
JCURRENT=CBQUEUE(2,ICOUNT1)
IF(CBQUEUE(3,ICOUNT1)==IPHASE)THEN
IPHASE=IPHASE+1
!WHERE(LATTICE1.ICHECK(1)==2)LATTICE1.ICHECK(1)=0
!WHERE(LATTICE1.ICHECK(2)==2)LATTICE1.ICHECK(2)=0
ENDIF
!IPHASE=IPHASE+1
!TEST LINES

```

```

!PRINT*,ICOUNT1,ICOUNT2,ICURRENT,JCURRENT,"!!"
!CHECKS THE NEIGHBOURS
NPX=NP1(ICURRENT,L1)
NPY=NP1(JCURRENT,L2)
NMX=NM1(ICURRENT,L1)
NMY=NM1(JCURRENT,L2)

!FIRST NEIGHBOUR
IP=1
CALL SWEEPWOLFF(LATTICE1,CBQUEUE,L1,L2,IP,ICOUNT2, &
&IPHASE,N0,ICURRENT,JCURRENT,NMX, &
&NMY,NMX,JCURRENT,PADD)

!SECOND NEIGHBOUR
IP=2
CALL SWEEPWOLFF(LATTICE1,CBQUEUE,L1,L2,IP,ICOUNT2, &
&IPHASE,N0,ICURRENT,JCURRENT, &
&NMX,JCURRENT,ICURRENT,NPY,PADD)

!THIRD NEIGHBOUR
IP=3
CALL SWEEPWOLFF(LATTICE1,CBQUEUE,L1,L2,IP,ICOUNT2, &
&IPHASE,N0,ICURRENT,JCURRENT, &
&ICURRENT,NPY,NPX,NPY,PADD)

!FOURTH NEIGHBOUR
IP=4
CALL SWEEPWOLFF(LATTICE1,CBQUEUE,L1,L2,IP,ICOUNT2, &
&IPHASE,N0,ICURRENT,JCURRENT,NPX,NPY,NPX,JCURRENT&
PADD)

!FIFTH NEIGHBOUR
IP=5
CALL SWEEPWOLFF(LATTICE1,CBQUEUE,L1,L2,IP,ICOUNT2, &
&IPHASE,N0,ICURRENT,JCURRENT,NPX, &
&JCURRENT,ICURRENT,NMY,PADD)

!SIXTH NEIGHBOUR
IP=6
CALL SWEEPWOLFF(LATTICE1,CBQUEUE,L1,L2,IP,ICOUNT2, &
&IPHASE,N0,ICURRENT,JCURRENT, &
&ICURRENT,NMY,NMX,NMY,PADD)

ENDDO

```

```

RM3=REAL(M3)!TRIANGLES WITH THE INITIAL SIGN AND
!THREE LATTICE SITES IN THE CLUSTER
RNSIZE=REAL(NSIZE)!LATTICE SITES IN THE CLUSTER
RM3=0.5000*RM3/ASRL
RNSIZE=RNSIZE/ASRL

```

```

!DEALLOCATE ARRAYS
DEALLOCATE(CBQUEUE)

```

```

ENDSUBROUTINE MAKECLUSTER

```

```

!*****

```

```

SUBROUTINE
SWEEPWOLFF(LATTICE1,CBQUEUE,L1,L2,IP,ICOUNT2,IPHASE,
N0,I0,J0,I1,J1,I2,J2,PADD)
!ADDITION PROBABILITY (WOLFF ALGORITHM)
USE D2BWWNBLVARDECLARATION
USE D2BWWNBLINTERFACES
IMPLICIT NONE
!DECLARE VARIABLES
INTEGER(2),INTENT(INOUT):: ICOUNT2
INTEGER(2),INTENT(IN):: L1,L2,IPHASE,N0,IP,I0,J0,I1,J1,I2,J2
REAL(4):: RDM
REAL(8),INTENT(IN):: PADD
!DECLARE STRUCTURES
TYPE(LATTICE),INTENT(INOUT),DIMENSION(:,:),&
&POINTER:: LATTICE1
!DECLARE ARRAYS
INTEGER(2),INTENT(INOUT),DIMENSION(:,:),&
&POINTER::CBQUEUE
INTEGER(2),DIMENSION(:),POINTER::IBOND
!ALLOCTE ARRAYS
ALLOCATE(IBOND(1:3))
!CHECKS THE INITIAL POINT
IBOND=BONDCHOICE(I0,J0,I1,J1,I2,J2,L1,L2)
!TEST LINES
!IF(LATTICE1(IBOND(1),IBOND(2)).NDEL(IBOND(3))/- &
&LATTICE1(I0,J0).LAT*LATTICE1(I1,J1).LAT*&
&LATTICE1(I2,J2).LAT)THEN
!PRINT*,LATTICE1(IBOND(1),IBOND(2)).NDEL(IBOND(3)),
LATTICE1(I0,J0).LAT*LATTICE1(I1,J1).LAT*&
&LATTICE1(I2,J2).LAT
!PAUSE
!ENDIF
IF(NHCONST/=0)THEN

```

```

MM20=MM2
NN20=NN2
IF((LATTICE1(I0,J0).IFLUG==0).AND. &
& (LATTICE1(I0,J0).IFLUGS/=IFLUGS0(2)))THEN
IF(LATTICE1(I0,J0).LAT==1)THEN
MM2=MM2+1
ELSEIF(LATTICE1(I0,J0).LAT== -1)THEN
NN2=NN2+1
ELSE
PRINT*, 'LATTICE VALUE ERROR!'
ENDIF
ENDIF
IF((LATTICE1(I1,J1).IFLUG==0).AND.(LATTICE1(I1,J1). &
& IFLUGS/=IFLUGS0(2)))THEN
IF(LATTICE1(I1,J1).LAT==1)THEN
MM2=MM2+1
ELSEIF(LATTICE1(I1,J1).LAT== -1)THEN
NN2=NN2+1
ELSE
PRINT*, 'LATTICE VALUE ERROR!'
ENDIF
ENDIF
IF((LATTICE1(I2,J2).IFLUG==0).AND. &
& (LATTICE1(I2,J2).IFLUGS/=IFLUGS0(2)))THEN
IF(LATTICE1(I2,J2).LAT==1)THEN
MM2=MM2+1
ELSEIF(LATTICE1(I2,J2).LAT== -1)THEN
NN2=NN2+1
ELSE
PRINT*, 'LATTICE VALUE ERROR!'
ENDIF
ENDIF
ENDIF

IF((LATTICE1(IBOND(1),IBOND(2)).NDEL(IBOND(3))== -1). &
& AND. (LATTICE1(IBOND(1),IBOND(2)). &
& ICHECK(IBOND(3))==0))THEN
!.AND.(NHCONST==0.OR.ISIGNH*(MM2-NN2)<=0)
CALL RAN2P(RDM)
IF(RDM<PADD)THEN
IF(LATTICE1(I0,J0).IFLUG==0)THEN
LATTICE1(I0,J0).IFLUG=1
ICOUNT2=NP1(ICOUNT2,N0)
CBQUEUE(1,ICOUNT2)=I0
CBQUEUE(2,ICOUNT2)=J0
CBQUEUE(3,ICOUNT2)=IPHASE

```

```

NSIZE=NSIZE+1
ENDIF
IF(LATTICE1(I1,J1).IFLUG==0)THEN
LATTICE1(I1,J1).IFLUG=1
ICOUNT2=NP1(ICOUNT2,N0)
CBQUEUE(1,ICOUNT2)=I1
CBQUEUE(2,ICOUNT2)=J1
CBQUEUE(3,ICOUNT2)=IPHASE
NSIZE=NSIZE+1
ENDIF
IF(LATTICE1(I2,J2).IFLUG==0)THEN
LATTICE1(I2,J2).IFLUG=1
ICOUNT2=NP1(ICOUNT2,N0)
CBQUEUE(1,ICOUNT2)=I2
CBQUEUE(2,ICOUNT2)=J2
CBQUEUE(3,ICOUNT2)=IPHASE
NSIZE=NSIZE+1
ENDIF
LATTICE1(IBOND(1),IBOND(2)).ICHECK(IBOND(3))=1
M3=M3+1
!TEST LINES
!PRINT*,I0,J0,I1,J1,I2,J2,IP,IPHASE
!PAUSE
ELSE
LATTICE1(IBOND(1),IBOND(2)).ICHECK(IBOND(3))=2
IF(NHCONST/=0)THEN
MM2=MM20
NN2=NN20
ENDIF
!TEST LINES
!PRINT*,I0,J0,I1,J1,I2,J2,IP,IPHASE,"!*"
!PAUSE
ENDIF
ELSEIF(NHCONST/=0)THEN
MM2=MM20
NN2=NN20
ELSE
ENDIF

!DEALLOCATE ARRAYS
DEALLOCATE(IBOND)
CONTAINS

```

```

!*****

```

```

FUNCTION BONDCHOICE(I0,J0,I01,J01,I02,J02,L1,L2)

```

```

!FINDS THE APPROPRIATE BOND
IMPLICIT NONE
INTEGER(2),INTENT(IN):: I0,J0,I01,J01,I02,J02,L1,L2
INTEGER(2)::I,J
INTEGER(2),DIMENSION(1:3),TARGET:: BONDCHOICE
IF(I0==NM1(I01,L1))THEN
  BONDCHOICE(1)=I0
  BONDCHOICE(2)=J0
  I=I01
  J=J01
ELSEIF(I0==NP1(I01,L1))THEN
  BONDCHOICE(1)=I01
  BONDCHOICE(2)=J01
  I=I0
  J=J0
ELSEIF(J0==NM1(J01,L2))THEN
  BONDCHOICE(1)=I0
  BONDCHOICE(2)=J0
  I=I01
  J=J01
ELSEIF(J0==NP1(J01,L2))THEN
  BONDCHOICE(1)=I01
  BONDCHOICE(2)=J01
  I=I0
  J=J0
ELSE
  PRINT*,"CASE NOT FOUND!!!"
ENDIF

IF(BONDCHOICE(1)==NM1(I02,L1))THEN
ELSEIF(BONDCHOICE(1)==NP1(I02,L1))THEN
  BONDCHOICE(1)=I02
  BONDCHOICE(2)=J02
  I=I0
  J=J0
ELSEIF(BONDCHOICE(2)==NM1(J02,L2))THEN
ELSEIF(BONDCHOICE(2)==NP1(J02,L2))THEN
  BONDCHOICE(1)=I02
  BONDCHOICE(2)=J02
  I=I0
  J=J0
ELSE
  PRINT*,"CASE NOT FOUND!!!"
ENDIF

IF(MOD(IP,2)==0)THEN

```

```

BONDCHOICE(3)=2
ELSE
BONDCHOICE(3)=1
ENDIF
!IF(J==BONDCHOICE(2))THEN
!BONDCHOICE(3)=2
!ELSE
!BONDCHOICE(3)=1
!ENDIF
ENDFUNCTION BONDCHOICE

```

```

!*****

```

```

ENDSUBROUTINE SWEEPWOLFF

```

```

!*****

```

```

SUBROUTINE CHANGESPINBLOCK(LATTICE1, &
&BINDERBLOCK1,NBX,NBY,LMP,L1,L2,M,E)
!CHANGES SPIN
USE D2BWWNBLVARDECLARATION
USE D2BWWNBLINTERFACES
IMPLICIT NONE
!DECLARE STRUCTURES
TYPE(LATTICE),INTENT(INOUT), &
&DIMENSION(:,:),POINTER:: LATTICE1
TYPE(BINDERBLOCK),INTENT(INOUT), &
&DIMENSION(:),POINTER,OPTIONAL:: BINDERBLOCK1
!DECLARE ARRAYS
INTEGER(2),INTENT(IN),DIMENSION(:),&
&POINTER,OPTIONAL::NBX
INTEGER(2),INTENT(IN),DIMENSION(:),&
&POINTER,OPTIONAL::NBY
!DECLARE VARIABLES
INTEGER(2),INTENT(IN),OPTIONAL::LMP
INTEGER(2),INTENT(IN)::L1,L2
INTEGER(2),INTENT(INOUT):: M
INTEGER(2):: ILB,I,IB,J,JB,ISIGN
REAL(4),INTENT(INOUT):: E
REAL(4):: RDM,LNA,LNRDM

```

```

IF(NHCONST/=0)THEN
!CORRECT THE VALUES OF THE PARAMETERS MM2,NN2
IF((NSIZE==1).OR.(IFLUGS0(1)/=IFLUGS0(2)))THEN
IF(NOLDSPIN==1)THEN
MM2=MM2+1

```

```

ELSEIF(NOLDSPIN== -1) THEN
NN2=NN2+1
ELSE
PRINT*, 'LATTICE VALUE ERROR!'
ENDIF
ENDIF

!ACCEPTANCE RATIO
LNA=1.0000
LNRDM=0.0000
ISIGN=ISIGNH*(MM2-NN2)
IF(ISIGN>0) THEN
LNA=-2.000*H*REAL(ISIGN*ISIGNH)/TAU
CALL RAN2P(RDM)
LNRDM=LOG(RDM)
!A=DEXP(LNA)
ELSE
!LNA=0.00000
!A=1.000
ENDIF
ENDIF

!IF(LNA>LNDCONST) THEN
!A=DEXP(LNA)
!ELSE
!A=0.0000
!ENDIF
!PRINT*, R2, LNA

IF((NHCONST==0).OR.(ISIGN<=0).OR.(LNRDM<LNA)) THEN
IREV=IREV+1

!REVERSE CLUSTER
DO I=1,L1
DO J=1,L2
IF(LATTICE1(I,J).IFLUG==1.AND. &
& (LATTICE1(I,J).IFLUGS/=IFLUGS0(2).OR.NSIZE==1)) THEN
LATTICE1(I,J).LAT=-LATTICE1(I,J).LAT
ENDIF
ENDDO
ENDDO
!CALCULATE M
M=M+2*SUM(LATTICE1(:, :).LAT, LATTICE1(:, :).IFLUG==1.&
& AND.(LATTICE1(:, :).IFLUGS/=IFLUGS0(2).OR.NSIZE==1))
!CALCULATE NDEL
FORALL(I=1:L1, J=1:L2)

```



```

LATTICE1(I,J).NDEL(2)=-
LATTICE1(I,J).LAT*LATTICE1(NP1(I,L1),NP1(J,L2)). &
&LAT*LATTICE1(NP1(I,L1),J).LAT
LATTICE1(I,J).NDEL(1)=-LATTICE1(I,J).LAT*LATTICE1&
&(NP1(I,L1),NP1(J,L2)).LAT*LATTICE1(I,NP1(J,L2)).LAT
ENDFORALL
!CALCULATE E
E=LATTICE1(1,1).V*&
&REAL(SUM(LATTICE1.NDEL(1))+SUM(LATTICE1.NDEL(2)))
!CALCULATE THE ENERGY OF EACH BINDER SUBLATTICE
IF(PRESENT(BINDERBLOCK1).AND.PRESENT(NBX).&
&AND.PRESENT(NBY).AND.PRESENT(LMP))THEN
!CALCULATION OF MAGNETIZATION AND ENERGY FOR EACH
!BINDER BLOCK
DO ILB=1,LMP
FORALL(IB=1:NBX(ILB),JB=1:NBY(ILB))
BINDERBLOCK1(ILB).EB(IB,JB)= &
&LATTICE1(1,1).V*SUM(REAL(LATTICE1.NDEL(1)+ &
&LATTICE1.NDEL(2)),(LATTICE1.IBINDERBLOCKX(ILB)==IB). &
&AND.(LATTICE1.IBINDERBLOCKY(ILB)==JB))&
&BINDERBLOCK1(ILB).MB(IB,JB)=BINDERBLOCK1(ILB). &
&MB(IB,JB)+2*SUM(LATTICE1.LAT,(LATTICE1.IFLUG==1. &
&AND.(LATTICE1.IFLUGS/=IFLUGS0(2).OR.NSIZE==1)).AND. &
&(LATTICE1.IBINDERBLOCKX(ILB)==IB) &
&AND.(LATTICE1.IBINDERBLOCKY(ILB)==JB))
!BINDERBLOCK1(ILB,IB,JB).MB=LATTICE1(1,1). &
&V*SUM(LATTICE1.LAT,(LATTICE1.IBINDERBLOCKX(ILB)== &
&IB).AND.(LATTICE1.IBINDERBLOCKY(ILB)==JB))
ENDFORALL
IF(ILB/=LMP)THEN
DO IB=1,NBX(ILB)
DO JB=1,NBY(ILB)
DO I=1,L1
DO J=1,L2
IF((LATTICE1(NP1(I,L1),J).IBINDERBLOCKX(ILB)==IB).AND. &
&(LATTICE1(NP1(I,L1),J).IBINDERBLOCKY(ILB)==JB).OR.&
&(LATTICE1(I,NP1(J,L2)).IBINDERBLOCKX(ILB)==IB).AND. &
&(LATTICE1(I,NP1(J,L2)).IBINDERBLOCKY(ILB)==JB).OR.&
&(LATTICE1(NP1(I,L1),NP1(J,L2)).IBINDERBLOCKX(ILB)==IB). &
&AND.(LATTICE1(NP1(I,L1),NP1(J,L2)).&
&IBINDERBLOCKY(ILB)==JB))THEN&
&BINDERBLOCK1(ILB).EB(IB,JB)= &
&BINDERBLOCK1(ILB).EB(IB,JB)+LATTICE1(1,1).V*&
&REAL(LATTICE1(I,J).NDEL(1)+LATTICE1(I,J).NDEL(2))
ENDIF
ENDDO

```

```

ENDDO
ENDDO
ENDDO
ENDIF
ENDDO
!IF(BINDERBLOCK1(LMP,1,1).EB/=E)THEN
!PRINT*,E,BINDERBLOCK1(LMP,1,1).EB
!PAUSE
!ENDIF
ENDIF
IF(NHCONST/=0)THEN
E=E-H*REAL(M)
IF(PRESENT(BINDERBLOCK1))THEN
DO ILB=1,LMP
BINDERBLOCK1(ILB).EB=&
&BINDERBLOCK1(ILB).EB-H*REAL(BINDERBLOCK1(ILB).MB)
ENDDO
ENDIF
ENDIF

ENDIF
RETURN
ENDSUBROUTINE CHANGESPINBLOCK

!*****

```

E.Κώδικας αλγορίθμου πλειάδων των Novotny και Evertz

```
!*****
!WOLFF ALGORITHM FOR BAXTER-WU MODEL(ERGODIC-
NOVOTNY APPICATION)
!*****

SUBROUTINE
BONDCLUSTERBLOCK(LATTICE1,PADD,LBLX,LBLY,&
&MB,LMP,L1,L2,N0,ASRL,M,E)
!CREATES THE TRIANGLE-CLUSTER
USE D2BWWNBLVARDECLARATION
USE D2BWWNBLINTERFACES
IMPLICIT NONE
!DECLARE STRUCTURES
TYPE(LATTICE),INTENT(INOUT),DIMENSION(:,:),&
&POINTER:: LATTICE1
!DECLARE ARRAYS
INTEGER(2),INTENT(IN),DIMENSION(:),POINTER,&
&OPTIONAL::LBLX
INTEGER(2),INTENT(IN),DIMENSION(:),POINTER,&
&OPTIONAL::LBLY
INTEGER(2),INTENT(INOUT),DIMENSION(:,,:),POINTER,&
&OPTIONAL::MB
REAL(4),INTENT(IN),DIMENSION(:),POINTER::PADD
!DECLARE VARIABLES
INTEGER(2),INTENT(IN),OPTIONAL::LMP
INTEGER(2),INTENT(IN):: L1,L2,N0
INTEGER(2),INTENT(INOUT):: M
REAL(4),INTENT(INOUT):: E
REAL(8),INTENT(IN):: ASRL
!INTEGER(2):: I,J,I1

!INITIAL VALUES FOR VARIABLES
!NN2=0 !NUMBER OF NEGATIVE PAIRS IN THE CLUSTER THAT
!BECOME POSITIVE AFTER CLUSTER FLIP
!MM2=0 !NUMBER OF POSITIVE PAIRS IN THE CLUSTER THAT
!BECOME NEGATIVE AFTER CLUSTER FLIP
!NN02=0 !NUMBER OF ZERO PAIRS IN THE CLUSTER THAT
!BECOME NEGATIVE AFTER CLUSTER FLIP
!MM02=0 !NUMBER OF ZERO PAIRS IN THE CLUSTER THAT
!BECOME POSITIVE AFTER CLUSTER FLIP
!NN20=0 !NUMBER OF NEGATIVE PAIRS IN THE CLUSTER
!THAT BECOME ZERO AFTER CLUSTER FLIP
```

```

!MM20=0 !NUMBER OF POSITIVE PAIRS IN THE CLUSTER THAT
!BECOME ZERO AFTER CLUSTER FLIP
NSIZE=0
RNSIZE=0.0000
!INITIAL VALUES FOR ARRAYS
LATTICE1.IFLUG=0
LATTICE1.ICHECK(1)=0
LATTICE1.ICHECK(2)=0
LATTICE1.ICHECK(3)=0

CALL MAKECLUSTER(LATTICE1,L1,L2,N0,ASRL,PADD)
!CHECKS THE FIRST-CLASS AND SECOND CLASS NEIGHBOURS
!DO I=1,L1
!DO J=1,L2
!I1=2
!CALL
AFTERCHECKPOINT(LATTICE1,I1,I,J,NP1(I,L1),NP1(J,L2),&
&NP1(I,L1),J,I,NP1(J,L2))!
!I1=3
!CALL
AFTERCHECKPOINT(LATTICE1,I1,I,J,NP1(I,L1),J,I,NM1(J,L2),&
&NP1(I,L1),NP1(J,L2))
!I1=1
!CALL
AFTERCHECKPOINT(LATTICE1,I1,I,J,I,NP1(J,L2),NP1(I,L1),&
&NP1(J,L2),NM1(I,L1),J)
!ENDDO
!ENDDO
CALL
CHANGESPINBLOCK(LATTICE1,LBLX,LBLY,MB,LMP,L1,L2,M,E)
ENDSUBROUTINE

```

```

!*****

```

```

SUBROUTINE MAKECLUSTER(LATTICE1,L1,L2,N0,ASRL,PADD)
!CREATES THE TRIANGLE-CLUSTER
USE D2BWWNBLVARDECLARATION
USE D2BWWNBLINTERFACES
IMPLICIT NONE
!DECLARE VARIABLES
INTEGER(2),INTENT(IN):: L1,L2,N0
INTEGER(2)
I,J,IP,NSP,ICURRENT,JCURRENT,NPX,NPY,NMX,NMY
REAL(4) RDM
REAL(8),INTENT(IN):: ASRL
!DECLARE STRUCTURES

```

```

TYPE(LATTICE),INTENT(INOUT),DIMENSION(:,:),&
&POINTER:: LATTICE1
!DECLARE ARRAYS
INTEGER(2),DIMENSION(:,:),POINTER::STACK
REAL(4),INTENT(IN),DIMENSION(:),POINTER::PADD

!ALLOCATE ARRAYS
ALLOCATE(STACK(1:2,N0))

!CHOOSE THE SEED SPIN FOR THE CLUSTER,PUT IT ON THE
!CLUSTER TO FLIP IT LATER
!RANDOM
CALL RAN2P(RDM)
I=1+L1*RDM
CALL RAN2P(RDM)
J=1+L2*RDM
LATTICE1(I,J).IFLUG=1
!NOLDSPIN=LATTICE1(I,J).LAT
IFLUGS0(1)=LATTICE1(I,J).IFLUGS
STACK(1,1)=I
STACK(2,1)=J
NSIZE=1
NSP=2

CALL RAN2P(RDM)

!CHOOSE THE SUBLATTICE WHICH WILL NOT BE FLIPPED(2ND
WAY)
IF(IFLUGS0(1)==1)THEN
IF(RDM>0.5000)THEN
IFLUGS0(2)=3
ELSE
IFLUGS0(2)=2
ENDIF
ELSEIF(IFLUGS0(1)==2)THEN
IF(RDM>0.5000)THEN
IFLUGS0(2)=3
ELSE
IFLUGS0(2)=1
ENDIF
ELSE
IF(RDM>0.5000)THEN
IFLUGS0(2)=2
ELSE
IFLUGS0(2)=1
ENDIF

```

ENDIF

LATTICE1.NDEL(1)=0
LATTICE1.NDEL(2)=0
LATTICE1.NDEL(3)=0

FORALL(I=1:L1,J=1:L2,(LATTICE1(I,J).IFLUGS/=IFLUGS0(2)). &
&AND.(LATTICE1(I,NP1(J,L2)).IFLUGS/=IFLUGS0(2)))
LATTICE1(I,J).NDEL(1)=-
LATTICE1(I,J).LAT*LATTICE1(I,NP1(J,L2)).LAT*&
&(LATTICE1(NP1(I,L1),NP1(J,L2)).LAT+&
&LATTICE1(NM1(I,L1),J).LAT)
ENDFORALL

FORALL(I=1:L1,J=1:L2,(LATTICE1(I,J).IFLUGS/=IFLUGS0(2)). &
&AND.(LATTICE1(NP1(I,L1),NP1(J,L2)).IFLUGS/=IFLUGS0(2)))
LATTICE1(I,J).NDEL(2)=- &
&LATTICE1(I,J).LAT*LATTICE1(NP1(I,L1),NP1(J,L2)).LAT*&
&(LATTICE1(I,NP1(J,L2)).LAT+LATTICE1(NP1(I,L1),J).LAT)
ENDFORALL

FORALL(I=1:L1,J=1:L2,(LATTICE1(I,J).IFLUGS/=IFLUGS0(2)). &
&AND.(LATTICE1(NP1(I,L1),J).IFLUGS/=IFLUGS0(2)))
LATTICE1(I,J).NDEL(3)=- &
&LATTICE1(I,J).LAT*LATTICE1(NP1(I,L1),J).LAT*&
&(LATTICE1(NP1(I,L1),NP1(J,L2)).LAT+&
&LATTICE1(I,NM1(J,L2)).LAT)
ENDFORALL

!PRINT*, IFLUGS0
!DO I=1,L1
!PRINT*,LATTICE1(I,1:L2).IFLUGS
!ENDDO
!PAUSE

!PRINT*, IFLUGS0
!DO I=1,L1
!PRINT*,LATTICE1(I,1:L2).LAT
!ENDDO
!PAUSE

DO
!CREATES THE CLUSTER USING LIFO BUFFER
IF(NSP<=1) EXIT !A WAY TO CONTROL THE CLUSTER
!PULL A SITE OFF THE STACK

```

NSP=NSP-1
ICURRENT=STACK(1,NSP)
JCURRENT=STACK(2,NSP)
!CHECKS THE NEIGHBOURING POINTS
NPX=NP1(ICURRENT,L1)
NPY=NP1(JCURRENT,L2)
NMX=NM1(ICURRENT,L1)
NMY=NM1(JCURRENT,L2)

!CHECKS THE NEIGHBOURS

!FIRST NEIGHBOUR
IP=1
CALL SWEEPWOLFFBLOTE(LATTICE1,PADD,STACK,L1,&
&L2,NSP, ICURRENT,JCURRENT,ICURRENT,NPY)

!SECOND NEIGHBOUR
IP=2
CALL SWEEPWOLFFBLOTE(LATTICE1,PADD,STACK,L1,L2, &
&NSP,ICURRENT,JCURRENT,NPX,NPY)

!THIRD NEIGHBOUR
IP=3
CALL SWEEPWOLFFBLOTE(LATTICE1,PADD,STACK,L1,L2, &
&NSP,ICURRENT,JCURRENT,NPX,JCURRENT)

!FOURTH NEIGHBOUR
IP=4
CALL SWEEPWOLFFBLOTE(LATTICE1,PADD,STACK,L1,L2, &
&NSP,ICURRENT,JCURRENT,ICURRENT,NMY)

!FIFTH NEIGHBOUR
IP=5
CALL SWEEPWOLFFBLOTE(LATTICE1,PADD,STACK,L1,L2, &
&NSP,ICURRENT,JCURRENT,NMX,NMY)

!SIXTH NEIGHBOUR
IP=6
CALL SWEEPWOLFFBLOTE(LATTICE1,PADD,STACK,L1,L2, &
&NSP,ICURRENT,JCURRENT,NMX,JCURRENT)
ENDDO

RNSIZE=REAL(NSIZE)!LATTICE SITES IN THE CLUSTER
RNSIZE=RNSIZE/ASRL

!DEALLOCATE ARRAYS

```

DEALLOCATE(STACK)

ENDSUBROUTINE

!*****

```
SUBROUTINE SWEEPWOLFFBLOTE&
& (LATTICE1,PADD,STACK,L1,L2,NSP,I0,J0,I1,J1)
!ACCEPTANCE RATIO (WOLFF ALGORITHM- BLOTE-
!HERRINGA APPLICATION)
USE D2BWWNBLVARDECLARATION
USE D2BWWNBLINTERFACES
IMPLICIT NONE
!DECLARE VARIABLES
INTEGER(2),INTENT(INOUT):: NSP
INTEGER(2),INTENT(IN):: L1,L2,I0,J0,I1,J1
INTEGER(2):: INDE
REAL(4):: RDM
!DECLARE STRUCTURES
TYPE(LATTICE),INTENT(INOUT), &
&DIMENSION(:,:),POINTER:: LATTICE1
!DECLARE ARRAYS
INTEGER(2),INTENT(INOUT),DIMENSION(:,:),POINTER::STACK
INTEGER(2),DIMENSION(:,:),POINTER::IBOND
REAL(4),INTENT(IN),DIMENSION(:,:),POINTER::PADD

!ALLOCTE THE ARRAYS
ALLOCATE(IBOND(1:3))
!CHECKS THE INITIAL POINT
IBOND=BONDCHOICE(I0,J0,I1,J1,L1,L2)
IF((LATTICE1(I1,J1).IFLUGS/=IFLUGS0(2)).AND. &
&(LATTICE1(I1,J1).IFLUG/=1).AND.(LATTICE1(IBOND(1), &
&IBOND(2)).ICHECK(IBOND(3))/=1))THEN
INDE=2+(LATTICE1(IBOND(1),IBOND(2)).NDEL(IBOND(3))/2)
!INDEXES FOR BETTER COMPUTER MEMORY USAGE
CALL RAN2P(RDM)
!PRINT*,I01,J01,R2,NDE,PADD
!PAUSE
!UPDATES THE NEIGHBOURING BONDS
IF(RDM<PADD(INDE))THEN
STACK(1,NSP)=I1
STACK(2,NSP)=J1
NSP=NSP+1
NSIZE=NSIZE+1
LATTICE1(I1,J1).IFLUG=1
LATTICE1(IBOND(1),IBOND(2)).ICHECK(IBOND(3))=1
```


ENDIF

ENDIF

!DEALLOCATE ARRAYS

DEALLOCATE(IBOND)

CONTAINS

!*****

FUNCTION BONDCHOICE(I0,J0,I1,J1,L1,L2)

!FINDS THE APPROPRIATE BOND

IMPLICIT NONE

INTEGER(2),INTENT(IN):: I0,J0,I1,J1,L1,L2

INTEGER(2)::I,J

INTEGER(2),DIMENSION(1:3),TARGET:: BONDCHOICE

IF(I0==NM1(I1,L1))THEN

BONDCHOICE(1)=I0

BONDCHOICE(2)=J0

I=I1

J=J1

ELSEIF(I0==NP1(I1,L1))THEN

BONDCHOICE(1)=I1

BONDCHOICE(2)=J1

I=I0

J=J0

ELSEIF(J0==NM1(J1,L2))THEN

BONDCHOICE(1)=I0

BONDCHOICE(2)=J0

I=I1

J=J1

ELSEIF(J0==NP1(J1,L2))THEN

BONDCHOICE(1)=I1

BONDCHOICE(2)=J1

I=I0

J=J0

ELSE

PRINT*,"CASE NOT FOUND!!!"

ENDIF

IF(I==BONDCHOICE(1))THEN

BONDCHOICE(3)=1

ELSEIF(J==BONDCHOICE(2))THEN

BONDCHOICE(3)=3

ELSE

BONDCHOICE(3)=2

ENDIF

ENDFUNCTION

!*****

ENDSUBROUTINE

!*****

SUBROUTINE

AFTERCHECKPOINT(LATTICE1,IHELP,I,J,I1,J1,I2,J2,I3,J3)

!CALCULATES DIFFERENT CATEGORIES OF BONDS

USE D2BWWNBLVARDECLARATION

USE D2BWWNBLINTERFACES

IMPLICIT NONE

!DECLARE VARIABLES

INTEGER(2) NDE1,IHELP,ISFLUG0,ISFLUG1,I,J,I1,J1,I2,J2,I3,J3

!DECLARE STRUCTURES

TYPE(LATTICE),DIMENSION(:,,:),POINTER:: LATTICE1

!LATTICE1(I,J).NDEL(IHELP)=- &

&LATTICE1(I,J).LAT*LATTICE1(I1,J1).LAT*&

& (LATTICE1(I2,J2).LAT+LATTICE1(I3,J3).LAT)

!CHECKS THE BONDS

ISFLUG0=LATTICE1(I,J).IFLUG+LATTICE1(I1,J1).IFLUG

IF((LATTICE1(I,J).ICHECK(IHELP)==1).AND.(ISFLUG0==2))THEN

ISFLUG1=LATTICE1(I2,J2).IFLUG+LATTICE1(I3,J3).IFLUG

IF((ISFLUG1==2).AND.(LATTICE1(I,J).NDEL(IHELP)==-2))THEN

MM2=MM2+1

ELSEIF((ISFLUG1==2).AND. &

& (LATTICE1(I,J).NDEL(IHELP)==2)) THEN

NN2=NN2+1

ELSEIF((ISFLUG1==1).AND. &

& (LATTICE1(I,J).NDEL(IHELP)==-2))THEN

MM20=MM20+1

ELSEIF((ISFLUG1==1).AND. &

& (LATTICE1(I,J).NDEL(IHELP)==2))THEN

NN20=NN20+1

ELSEIF((ISFLUG1==1).AND. &

& (LATTICE1(I,J).NDEL(IHELP)==0))THEN

IF(LATTICE1(I3,J3).IFLUG==1)THEN

NDE1=-LATTICE1(I,J).LAT*LATTICE1(I1,J1).LAT*&

& (LATTICE1(I2,J2).LAT-LATTICE1(I3,J3).LAT)

ELSEIF(LATTICE1(I2,J2).IFLUG==1)THEN

NDE1=-LATTICE1(I,J).LAT*&

&LATTICE1(I1,J1).LAT*(-LATTICE1(I2,J2).LAT+&

&LATTICE1(I3,J3).LAT)

```

ELSE
ENDIF
IF(NDE1==2)THEN
MM02=MM02+1
ELSEIF(NDE1==2)THEN
NN02=NN02+1
ELSE
ENDIF
ELSE
ENDIF
ENDIF
ENDSUBROUTINE

```

```

!*****

```

```

SUBROUTINE
CHANGESPINBLOCK(LATTICE1,LBLX,LBLY,MB,LMP,L1,L2,M,E)
!CHANGES SPIN
USE D2BWWNBLVARDECLARATION
USE D2BWWNBLINTERFACES
IMPLICIT NONE
!DECLARE STRUCTURES
TYPE(LATTICE),INTENT(INOUT), &
&DIMENSION(:,,:),POINTER:: LATTICE1
!DECLARE ARRAYS
INTEGER(2),INTENT(IN),DIMENSION(:),&
&POINTER,OPTIONAL::LBLX
INTEGER(2),INTENT(IN),DIMENSION(:),&
&POINTER,OPTIONAL::LBLY
INTEGER(2),INTENT(INOUT), &
&DIMENSION(:,,:),POINTER,OPTIONAL::MB
!DECLARE VARIABLES
INTEGER(2),INTENT(IN),OPTIONAL::LMP
INTEGER(2),INTENT(IN)::L1,L2
INTEGER(2),INTENT(INOUT):: M
INTEGER(2):: I,J,ILB
REAL(4),INTENT(INOUT):: E

DO I=1,L1
DO J=1,L2
IF(LATTICE1(I,J).IFLUG==1)THEN
!.AND.(LATTICE1(I,J).IFLUGS/=IFLUGS0(2).OR.NSIZE==1)
LATTICE1(I,J).LAT=-LATTICE1(I,J).LAT
IF(PRESENT(MB).AND.PRESENT(LBLX).AND. &
&PRESENT(LBLY).AND.PRESENT(LMP))THEN
FORALL(ILB=1:LMP)

```

```

MB(ILB,((I-1)/LBLX(ILB)+1),((J-1)/LBLX(ILB)+1))=&
&MB(ILB,((I-1)/LBLX(ILB)+1),((J-&
&1)/LBLX(ILB)+1))+2*LATTICE1(I,J).LAT
ENDFORALL
ENDIF
ENDIF
ENDDO
ENDDO

```

```

!CALCULATE M
M=M+2*SUM(LATTICE1(:,:).LAT,LATTICE1(:,:).IFLUG==1)

```

```

!CALCULATE NDEL
FORALL(I=1:L1,J=1:L2,(LATTICE1(I,J).IFLUGS/=IFLUGS0(2)). &
&AND.(LATTICE1(I,NP1(J,L2)).IFLUGS/=IFLUGS0(2)))
LATTICE1(I,J).NDEL(1)=-
LATTICE1(I,J).LAT*LATTICE1(I,NP1(J,L2)).LAT*&
&(LATTICE1(NP1(I,L1),NP1(J,L2)).LAT+&
&LATTICE1(NM1(I,L1),J).LAT)
ENDFORALL

```

```

FORALL(I=1:L1,J=1:L2,(LATTICE1(I,J).IFLUGS/=IFLUGS0(2)). &
&AND.(LATTICE1(NP1(I,L1),NP1(J,L2)).IFLUGS/=IFLUGS0(2)))
LATTICE1(I,J).NDEL(2)=- &
&LATTICE1(I,J).LAT*LATTICE1(NP1(I,L1),NP1(J,L2)).LAT*&
&(LATTICE1(I,NP1(J,L2)).LAT+LATTICE1(NP1(I,L1),J).LAT)
ENDFORALL

```

```

FORALL(I=1:L1,J=1:L2,(LATTICE1(I,J).IFLUGS/=IFLUGS0(2)). &
&AND.(LATTICE1(NP1(I,L1),J).IFLUGS/=IFLUGS0(2)))
LATTICE1(I,J).NDEL(3)=- &
&LATTICE1(I,J).LAT*LATTICE1(NP1(I,L1),J).LAT*&
&(LATTICE1(NP1(I,L1),NP1(J,L2)).LAT+&
&LATTICE1(I,NM1(J,L2)).LAT)
ENDFORALL

```

```

!CALCULATE E
E=V*REAL(SUM(LATTICE1(:,:).&
&NDEL(1),LATTICE1(:,:).NDEL(1)/=0)+ &
&SUM(LATTICE1(:,:).NDEL(2),LATTICE1(:,:).&
&NDEL(2)/=0)+SUM(LATTICE1(:,:).NDEL(3), &
&LATTICE1(:,:).NDEL(3)/=0))
!M=M-2*NOLDSPIN*NSIZE
RETURN
ENDSUBROUTINE

```

```

!*****

```

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Τρικαλινός, Χ., *Μοριακή Φυσική και Θερμοδυναμική*, έκδοση του Πανεπιστημίου Αθηνών (1996)
- [2] Segre, E., *Ιστορία της Φυσικής* (τόμος Α'), Δίαυλος (1997)
- [3] Stanley, H. E., *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Oxford (1967)
- [4] Griffiths, D. J., *Εισαγωγή στην ηλεκτροδυναμική* (τόμος Ι), Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης (1999)
- [5] Χατζηαγαπίου, Ι. Α., *Στατιστική Φυσική II* (σημειώσεις), έκδοση του Πανεπιστημίου Αθηνών (2000)
- [6] Yeomans, J. M., *Statistical Mechanics of Phase Transitions*, Clarendon Press, Oxford (1992)
- [7] Fisher, M. E., in: M.S. Green (ed.), *Critical Phenomena*, Academic Press, New York, 1971
- [8] Μαχτίνος, Σ., *Στατιστική Φυσική I* (σημειώσεις), έκδοση του Πανεπιστημίου Αθηνών (1990)
- [9] Mandl, F., *Στατιστική Φυσική*, έκδοση Γ. Α. Πνευματικός (2000)
- [10] Reif, F., *Μαθήματα Φυσικής του Πανεπιστημίου του Berkeley* (τόμος 5: Στατιστική Φυσική), Έκδοση των Εργαστηρίων Φυσικής του Ε.Μ.Π. (1978)
- [11] Binney, J. J., Dowrick, N. J., Fisher, A. J., Newman, M. E. J., *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Oxford (1992)
- [12] Μαλάκης, Α., *Σημειώσεις Φυσικής Στερεάς Κατάστασης*, έκδοση του Πανεπιστημίου Αθηνών (1992)
- [13] Λυκουργιώτης, Α. Σ., Κορδούλης, Χ., *Κατάλυση- μαθήματα προπτυχιακού επιπέδου*, Πανεπιστημιακές Σημειώσεις, Πάτρα, έκδοση Πανεπιστημίου Πατρών (2010)
- [14] Λυκουργιώτης, Α. Σ., Κορδούλης, Χ., *Κατάλυση*, στο Καραϊσκάκης, Γ. (Επιμ.), τόμος Α', Πάτρα, έκδοση Ε.Α.Π. (2003)
- [15] Barber, M. N., in: Domb, C., Lebowitz, J.L. (Eds.), *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Academic Press, New York, 1983
- [16] Newman, M. E. J., Barkema, G. T., *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Clarendon Press, Oxford (2001)
- [17] Privman, V. (Ed.), *Finite- Size Scaling and Numerical Simulations of Statistical Systems*, World Scientific, Singapore, 1990
- [18] Barber, M. N., *Finite-size Scaling*, Academic Press (1983)
- [19] Μαλάκης, Α., *Σημειώσεις στις Θεωρίες Κλιμάκωσης και Επανακανονικοποίησης*, έκδοση του Πανεπιστημίου Αθηνών (1997)
- [20] Fisher, M. E., Barber, M. N., Phys. Rev. Lett. 28 (1972) 1516
- [21] Fisher, M. E., Berker, A. N., Phys. Rev. B 26 (1982) 2507
- [22] Binder, K., Z. Phys. B 43 (1981) 119
- [23] Binder, K., Landau, D. P., Phys. Rev. B 30 (1984) 1477
- [24] Challa, M. S., Landau, D. P., Binder, K., Phys. Rev. B 34 (1986) 1841
- [25] Baxter, R. J., Wu, F. Y., Phys. Rev. Lett. 31 (1973) 1294
- [26] Stanley, H. E., Luke, L. L., Phys. Rev. B 10 (1974) 2958
- [27] Baxter, R. J., Sykes, M. F., Watts, M. G., J. Phys. A 8 (1975) 245
- [28] Baxter, R. J., Enting I. G., J. Phys. A 9 (1976) 149

- [29] Baxter, R. J., *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, Academic Press, Tunbridge Wells, U.K. (1989), p. 314
- [30] Wood, D. W., Griffiths, H. P., J. Phys. C 5 (1972) 253
- [31] Domb, C., and Green, M. S., *Phase Transitions and Critical Phenomena* (Volume 3: *The Ising Model*), Academic Press (1972-1976)
- [32] Montroll, E. W., *Lectures on the Ising Model Phase Transitions*, Brandeis University Summer Institute (1968)
- [33] Kasteleyn, P. W., J. Math. Phys. 4 (1963) 287
- [34] Salas, J., Sokal, A. D., J. Stat. Phys. 88, 3 / 4 (1997) 567- 615
- [35] Alcaraz, F. C., Xavier, J. C., J. Phys. A 30 (1997) L203
- [36] Alcaraz, F. C., Xavier, J. C., J. Phys. A 32 (1999) 2041
- [37] Novotny, M. A., Landau, D. P., Swendsen R. H., Phys. Rev. B 26 (1982) 330
- [38] Novotny, M. A., Landau, D. P., Phys. Rev B 24 (1981) 1468
- [39] Novotny, M. A., Landau, D. P., Phys. Rev B 32 (1985) 3112
- [40] Novotny, M. A., Landau, D. P., Phys. Rev B 32 (1985) 5874
- [41] Schreiber, N., Adler, J., J. Phys. A 38 (2005) 7253
- [42] Santos, M., Figueiredo, W., Phys. Rev. E 63 (2001) 042101
- [43] Arashiro, E., Drugovitch de Felicio, J. R., Phys. Rev. E, 67 (2003) 046123-1
- [44] Martinos, S. S., Malakis, A., Hadjiagapiou, I., Physica A, 331 (2004) 182- 188
- [45] Blöte, H. W. J., Heringa, J. R., Luijten, E., Comp. Phys. Com. 147 (2002) 58
- [46] Martinos, S. S., Malakis, A., Hadjiagapiou, I., Physica A, 352 (2005) 447-458
- [47] Martinos, S. S., Malakis, A., Hadjiagapiou, I., Physica A, 355 (2005) 393- 407
- [48] Deng, Y., Guo, W., Heringa, J. R., Blöte, H.W. J. and Nienhuis, B., Nucl. Phys. B 827 (2010) [FS] 406
- [49] Froyen, S., Sudbo, A. A. S., Hemmer, P. C., Physica A 85 (1976) 399
- [50] Dóczy- Réger, J., Hemmer, P.C., Physica A 108 (1981) 531- 545
- [51] Malakis, A., J. Phys. A 14 (1981) 2767
- [52] Malakis, A., J. Stat. Phys. 27 (1982) 1
- [53] Chin, K. K., Landau, D. P., Phys. Rev. B 36 (1987) 275
- [54] Tsai, S.-H., Wang, F., Landau, D. P., Braz. J. Phys. 36 (2006) 635
- [55] Tsai, S.-H., Wang, F., Landau, D. P., Phys. Rev. E 75 (2007) 061108
- [56] Tsai, S.-H., Wang, F., Landau, D. P., Braz. J. Phys. 38 (2008) 635
- [57] Alcaraz, F. C., Jacobs, L., J. Phys. A 15 (1982) L357- L361
- [58] Alcaraz, F. C., Cardy, J. L., Ostlundt, S., J. Phys. A 16 (1983) 159
- [59] Roelofs, L. D., Kortan, A. R., Einstein, T. L., Park, R. L., Phys. Rev. Lett. 46 (1981) 1465- 1468
- [60] Piercy, P., Pfnür, H., Phys. Rev. Lett. 59 (1987) 1124- 1127
- [61] Schwenger, L., Budde, K., Voges, C., Pfnür, H., Phys. Rev. Lett. 73 (1994) 296- 299
- [62] Bruce, A. D., J. Phys. C 14 (1981) 3667
- [63] Tsypin, M. M., Phys. Rev. Lett. 73 (1994) 2015
- [64] Tsypin, M. M., Phys. Rev. B 55(1997) 8911
- [65] Tsypin, M. M., Blöte H. W. J., Phys. Rev. E 62 (2000) 73
- [66] Burkhardt, W. Th., Derrida, B., Phys. Rev. B (1985) 7273
- [67] Salas, J., Sokal, A. D., J. Stat. Phys. 98, 551 (2000), (cond-mat/9904038)
- [68] Di Francesco, P., Saleur, H., Zuber, J.- B., Nucl. Phys. B 290 [FS20] (1987) 527
- [69] Di Francesco, P., Saleur, H., Zuber, J.- B., Europhys. Lett. 5 (1988) 95

- [70] Kamieniarz, G., Blöte, H. J., J. Phys. A 26 (1993) 201
- [71] Deng, Y., Blöte H. W. J., Phys. Rev. E 68 (2003) 036125
- [72] Deng, Y., Blöte, H.W. J., Nienhuis, B., Phys. Rev. E 69 (2004) 026114
- [73] Selke, W., Eur. Phys. J. B 51 (2006) 223- 225
- [74] Nikolo, M. , Am. J. Phys. 63 (1) (1995) 57- 65
- [75] Zhang, W., Deng, Y., Phys. Rev. E 78 (2008) 031103
- [76] Rényi, A., *Probability Theory*, Elsevier (1970)
- [77] Κουνιάς, Σ., Κολυβά- Μαχαίρα, Φ., Μπαγιάτη, Κ., Μπόρα- Σέντα, Ε., *Εισαγωγή στη Στατιστική*, Εκδόσεις Χριστοδουλίδη (1989)
- [78] Binder, K., Landau, D. P. *A Guide to Monte Carlo Simulations In Statistical Physics*, University Press, Cambridge University Press (2000)
- [79] Metropolis, N., Rosenbluth, A. W., Rosenbluth, M. N., Teller, H., Teller, E., J. Chem. Phys. 21 (1953) 1087
- [80] Swendsen, R. H., Wang, J. S., Phys. Rev. Lett. 58 (1987) 86
- [81] Wolff, U., Phys. Rev. Lett. 62 (1989) 361
- [82] Fortuin, C. M., Kasteleyn, P. W., Physica 57 (1972) 4, 536-564,
- [83] Coniglio, A., Klein, W., J. Phys. A 13 (1980) 2775
- [84] Niedermayer, F., Phys. Rev. Lett. 61 (1988) 2026
- [85] Kandel, D., Domany, E., Ron, D., Brandt, A., Loh, E. Jr, Phys. Rev. Lett. 60 (1988) 1591–1594
- [86] Machta, J., Choi, Y. S., Lucke, A., Schweizer, T., Chayes, L. V., Phys. Rev. Lett. 75 (1995), 2792- 2795
- [87] Novotny, M. A., Evertz, H. G. in: D.P. Landau, K.K. Mon, H.-B. Schüttler (Eds.), *Computer Simulation Studies in Condensed-Matter Physics*, Vol. VI, Springer, Berlin (1993) p. 188.
- [88] Coddington, P. D. and Baillie, C. F., Phys. Rev. B 43 (1992) 10617
- [89] Blöte, H. W. J., Luijten, E., Heringa, J. R., J. Phys. A 28 (1995) 6289
- [90] Lee, J., Phys. Rev. Lett. 71(1993) 211- 214
- [91] Wang, F., Landau, D. P., Phys. Rev. E 64 (2001) 056101
- [92] Schulz, B. J., Binder, K., Muller, M., Landau, D. P., Phys. Rev. E **67** (2003) 067102
- [93] Malakis, A., Fytas, N. G., Phys. Rev. E 73 (2006) 016109
- [94] Malakis, A., Martinos, S. S., Hadjiagapiou, I., Fytas, N. G., Kalozoumis, P., Phys. Rev. E. 72 (2004) 066120
- [95] Malakis, A., Peratzakis, A., Fytas, N. G., Phys. Rev. E. 70 (2004) 066128
- [96] Dickman, R., Cunha-Netto, A. G., Phys. Rev. E 84 (2011) 026701
- [97] Καραμπατζός, Γ., Μπεμ, Α., *Εισαγωγή στην Πληροφορική*, Εκδόσεις Συμμετρία (1995)
- [98] Ματαράς, Δ. Σ., Κουτελιέρης, Φ. Α., *Προγραμματισμός Fortran 90/95 για επιστήμονες και μηχανικούς*, Εκδόσεις Τζιόλα (2003)
- [99] Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., Flannery, B. P., *Numerical Recipes (in FORTRAN): the Art of Scientific Computing*, 2nd edition, Cambridge University Press (1992)
- [100] Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., Flannery, B. P., *Numerical Recipes (in FORTRAN 90): the Art of Parallel Scientific Computing*, 2nd edition, Cambridge University Press (1998)
- [101] Ferrenberg, A. M., Landau, D. P., Wong, Y. J., Phys. Rev. Let B 69, 23 (1992) 3382
- [102] Malakis, A., Martinos, S. S., Hadjiagapiou, I. A., *Analysis of strong interference effects of the sequential Heat-Bath algorithm with a random number generator*, unpublished

- [103] Matz, R., Hunter, D. L., Jan, N., J. Stat. Phys. 74 (1994) 903
- [104] Velonakis, I. N., Martinos, S. S., Physica A 390 (2011) 24- 30
- [105] Ossola, J., Sokal, A. D., Phys.Rev. E 70 (2004) 027701
- [106] Stauffer, D., *Introduction to Percolation Theory*, Taylor and Francis (1985)
- [107] Sokal, A. D., Nucl. Phys. B- Proc. Suppl. 20 (1991) 55-67
- [108] Velonakis, I. N., Martinos, S. S., Physica A 390 (2011) 3369- 3384
- [109] Hilfer, R., Int. J. Mod. Phys. B 26 (1993), 4371- 4387
- [110] Hilfer, R., Z. Phys. B 96 (1994) 63- 77
- [111] Hilfer, R., Wilding, N. B., J. Phys. A 28 (1995) L281
- [112] Velonakis, I. N., Martinos, S. S., *Baxter-Wu model in the presence of an external magnetic field*, Physica A, (<http://dx.doi.org/10.1016/j.physa.2013.01.021>)
- [113] Kinzel, W., Schick, M., Phys. Rev. B 23 (1981) 3435
- [114] Costa, M.L.M., Xavier, J.C. Plascak, J.A., Phys. Rev. B 69 (2004) 104103
- [115] Plascak, J. A., Martins, P.H.L., Comp. Phys. Com. 184, 2 (2013) 259-269

ΕΥΡΕΤΗΡΙΟ ΕΙΚΟΝΩΝ

Εικόνα 1.1: Διάγραμμα φάσεων (PVT) ουσίας που ο όγκος της μειώνεται (δεξιά) ή αυξάνει (αριστερά) κατά την τήξη.....	26
Εικόνα 1.2: Το διάγραμμα φάσεων ενός ρευστού (a) και ενός σιδηρομαγνήτη (b).	27
Εικόνα 1.3: Διαγράμματα $V = V(P)$, $P = P(V)$, $G = G(P)$, $F = F(V)$ για αλλαγή φάσης 1 ^{ου} είδους σε ρευστό.	29
Εικόνα 1.4: Διαγράμματα $M = M(H)$, $H = H(M)$, $G = G(H)$, $F = F(M)$ για αλλαγή φάσης 1 ^{ου} είδους σε σιδηρομαγνήτη.	30
Εικόνα 1.5: Φασικά διαγράμματα PT και PVT για το ${}^4_2\text{He}$	32
Εικόνα 1.6: Διάγραμμα θερμοχωρητικότητας C_S για τη λ- μετάβαση.....	32
Εικόνα 1.7: Διαγράμματα $V = V(P)$, $G = G(P)$ για συνεχή αλλαγή φάσης σε ρευστό.	35
Εικόνα 1.8: Διαγράμματα $M = M(H)$, $G = G(H)$ για συνεχή αλλαγή φάσης σε σιδηρομαγνήτη.	36
Εικόνα 3.1: τα τρία βασικά υποπλέγματα στο πρότυπο Baxter-Wu.....	64
Εικόνα 4.1: Ένας αρκετά σύγχρονος Προσωπικός Υπολογιστής (PC) σε λειτουργία.	112
Εικόνα 4.2: Προσωπικοί Υπολογιστές (PCs) σε λειτουργία. Αν και είναι αρκετά ισχυροί, λειτουργούν ανεξάρτητα ο ένας από τον άλλο, χωρίς να έχουν διασυνδεθεί κατάλληλα ώστε να αποτελέσουν παράλληλο υπολογιστικό σύστημα.	112
Εικόνα A.1: Το cluster Υπολογιστικό Σύστημα Ithaca του τμήματος Φυσικής του Πανεπιστημίου Αθηνών.....	292

ΕΥΡΕΤΗΡΙΟ ΔΙΑΓΡΑΜΜΑΤΩΝ

Διάγραμμα 3.1: Οι γραφικές παραστάσεις των συναρτήσεων $U_L = f(H)$, $U_{L0} = f(H)$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα της φαινομενολογικής θεωρίας του Binder για θερμοκρασία $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ και $L = 60$84

Διάγραμμα 5.1: Γραφική παράσταση $\langle E \rangle = f(t)$ (ο χρόνος μετρημένος σε Monte Carlo sweeps), για $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ και $H = 0$, σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης στο μοντέλο Baxter-Wu, ξεκινώντας τη μια φορά από τη σιδηρομαγνητική θεμελιώδη κατάσταση και την άλλη από μια από τις σιδηριμαγνητικές θεμελιώδεις καταστάσεις.123

Διάγραμμα 5.2: Γραφική παράσταση $\frac{\langle A \rangle}{N} = f(t)$ (ο χρόνος μετρημένος σε Monte Carlo sweeps), για $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ και $H = 0$, σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης στο μοντέλο Baxter-Wu, ξεκινώντας τη μια φορά από τη σιδηρομαγνητική θεμελιώδη κατάσταση και την άλλη από μια από τις σιδηριμαγνητικές θεμελιώδεις καταστάσεις.124

Διάγραμμα 5.3: Γραφική παράσταση $P_{L0\pm} = f(m)$ στο μοντέλο Baxter-Wu, για $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ και $H = 0$, σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης, ξεκινώντας τη μια φορά από τη σιδηρομαγνητική θεμελιώδη κατάσταση ($P_{L0+}(m)$) και την άλλη από μια από τις σιδηριμαγνητικές θεμελιώδεις καταστάσεις ($P_{L0-}(m)$)...126

Διάγραμμα 5.4: Γραφική παράσταση $P_{L0} = f(m)$ στο μοντέλο Baxter-Wu, για $\frac{k_B T}{J} = 2,222$, $H = 0$ και $L = 60$, όπως προκύπτει με κατάλληλο συνδυασμό των αποτελεσμάτων του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης.127

Διάγραμμα 5.5: Γραφικές παραστάσεις $P_{L0} = f(m)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $L = 45$, $L = 60$, $L = 72$, $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ και $H = 0$, όπως προκύπτουν με κατάλληλο συνδυασμό των αποτελεσμάτων του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης.128

Διάγραμμα 5.6: Γραφική παράσταση $P_{L0+} = f(m)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $L = 60$, $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ και $H = 0$, όπως προκύπτει από τα αποτελέσματα του

αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης και από τη φαινομενολογική θεωρία του Kurt Binder.	129
Διάγραμμα 5.7: Γραφική παράσταση $P_{L-} = f(m)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $L = 60$, $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ και $H = 0$, όπως προκύπτει με κατάλληλο συνδυασμό των αποτελεσμάτων του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης και τη φαινομενολογική θεωρία του Kurt Binder.	130
Διάγραμμα 5.8: Γραφικές παραστάσεις $\chi_{T,L} = f(H)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $L = 30$, $L = 45$, $L = 72$, $\frac{k_B T}{J} = 2,222$, σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης.	131
Διάγραμμα 5.9:: Διάγραμμα $\log \chi_T = f(\log L)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ και $H = 0$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης.	132
Διάγραμμα 5.10: Γραφικές παραστάσεις $U_L = f(H)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $L = 30$, $L = 45$, $L = 72$, $\frac{k_B T}{J} = 2,222$, σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης.	133
Διάγραμμα 5.11:: Γραφικές παραστάσεις $U_{L0} = f(H)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $L = 30$, $L = 45$, $L = 72$, $\frac{k_B T}{J} = 2,222$, σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης.	134
Διάγραμμα 5.12: Γραφική παράσταση $U_L = f(H)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $L = 60$, $\frac{k_B T}{J} = 2,222$, σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης και τη φαινομενολογική θεωρία του Kurt Binder.	135
Διάγραμμα 5.13: Γραφική παράσταση $U_{L0} = f(H)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $L = 60$, $\frac{k_B T}{J} = 2,222$, σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προέκυψαν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης και τη φαινομενολογική θεωρία του Kurt Binder.	136
Διάγραμμα 5.14: Γραφική παράσταση $U_{L0 H=0} = f(L^{-1})$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης.	138

Διάγραμμα 5.15: Γραφική παράσταση $U_{L0} _{H=0} = f(L)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης (εργαστήκαμε με όλα τα δυνατά υποπλέγματα από 12×15 ως 72×75 σε ένα 90×93 πλέγμα Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες).....	139
Διάγραμμα 5.16: Γραφική παράσταση $U_{L0} _{H=0} = f(L)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης και τη φαινομενολογική θεωρία του Kurt Binder.	140
Διάγραμμα 5.17: Γραφική παράσταση $\chi_{T,L+} _{H=0} = f(L)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης.	142
Διάγραμμα 5.18: Γραφική παράσταση $\chi_{T,L-} _{H=0} = f(L)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης.	143
Διάγραμμα 5.19: Γραφική παράσταση του βάθους του πηγαδιού $\text{Depth} = U_{L0} _{H=+\infty} - U_{L\min} = f(L)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης.	144
Διάγραμμα 5.20: Γραφική παράσταση της απόλυτης τιμής της θέσης του ελαχίστου του $U_{L0} H_0 = f(L)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης.	145
Διάγραμμα 5.21: Λογαριθμικό διάγραμμα των απόλυτων τιμών των σωρευτών Binder (οι τιμές τους ήταν όλες αρνητικές) ως προς το μέγεθος L του πλέγματος στο πρότυπο Baxter-Wu για θερμοκρασία $\frac{k_B T}{J} = 3,000$ και $H = 0$ προσομοιωμένο με τον αλγόριθμο Metropolis θεωρήσαμε όλα τα υποπλέγματα Binder από 12×15 μέχρι 72×75 σε ένα 90×93 πλέγμα Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες).	147
Διάγραμμα 5.22: Γραφική παράσταση $P_{L0} = f(m)$ στο μοντέλο Baxter-Wu, για $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$, $H = 0$ και $L = 60$, όπως προκύπτει από τα αποτελέσματα του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης.	148

Διάγραμμα 5.23: Γραφικές παραστάσεις $P_{L0} = f(m)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $L = 30, L = 54, L = 81, \frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και $H = 0$, όπως προκύπτουν από τα αποτελέσματα του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης. Τα στατιστικά σφάλματα παραλείπονται για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.	149
Διάγραμμα 5.24: Γραφικές παραστάσεις $\chi_{T,L} = f(H)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $L = 30, L = 54, L = 81, \frac{k_B T_c}{J} = 2,269$, σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης. Τα στατιστικά σφάλματα παραλείπονται για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.	150
Διάγραμμα 5.25: Διάγραμμα $\log \chi_T = f(\log L)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και $H = 0$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης.	151
Διάγραμμα 5.26: Γραφικές παραστάσεις $U_L = f(H)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $L = 30, L = 54, L = 81, \frac{k_B T_c}{J} = 2,269$, σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης. Τα στατιστικά σφάλματα παραλείπονται για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.	152
Διάγραμμα 5.27: Γραφικές παραστάσεις $U_{L0} = f(H)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $L = 30, L = 54, L = 81, \frac{k_B T_c}{J} = 2,269$, σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης. Τα στατιστικά σφάλματα παραλείπονται για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.	153
Διάγραμμα 5.28: Γραφικές παραστάσεις $U_{L0 H=0} = f(L)$ και $U_{L H=0} = f(L)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης.	154
Διάγραμμα 5.29: Γραφική παράσταση $U_{L0} = f(L)$ στο πρότυπο Baxter-Wu για θερμοκρασία $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και εξωτερικό μαγνητικό πεδίο $H = 0$, σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σειριακής σάρωσης με 10^9 Monte Carlo Steps και 10^{10} Monte Carlo Steps (για ορισμένα μεγέθη πλέγματος). Εδώ χρησιμοποιήθηκαν ανεξάρτητα πλέγματα με περιοδικές συνοριακές συνθήκες.	155
Διάγραμμα 6.1: Πρώτο-Μέσα-Πρώτο-Εξω προσωρινή μνήμη (First in/First out- FIFO buffer) ή ουρά (queue).	165

Διάγραμμα 6.2: Κυκλική προσωρινή μνήμη (circular buffering).....	166
Διάγραμμα 6.3: Διαγράμματα $\langle E \rangle = f(T)$ για ένα 30×33 πλέγμα Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες για $H = 0$, όπως προέκυψαν με τον αλγόριθμο Metropolis σειριακής σάρωσης και τον αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων.	168
Διάγραμμα 6.4: Διαγράμματα $\langle 2 m \rangle = f(T)$ για ένα 30×33 πλέγμα Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες για $H = 0$, όπως προέκυψαν με τον αλγόριθμο Metropolis σειριακής σάρωσης και τον αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων.	169
Διάγραμμα 6.5: Γραφικές παραστάσεις $P_{L0} = f(m)$ στο μοντέλο Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες για $L = 30$, $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ και $H = 0$, όπως προκύπτουν από τα αποτελέσματα του αλγορίθμου Metropolis σειριακής σάρωσης και του αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων.	170
Διάγραμμα 6.6: Γραφικές παραστάσεις $P_{L0} = f(E)$ με περιοδικές συνοριακές συνθήκες στο μοντέλο Baxter-Wu για $L = 30$, $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ και $H = 0$, όπως προκύπτουν από τα αποτελέσματα του αλγορίθμου Metropolis σειριακής σάρωσης και του αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων.	171
Διάγραμμα 6.7: Γραφικές παραστάσεις $P_{L0} = f(m)$ στο μοντέλο Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες για $L = 30$, $\frac{k_B T}{J} = 3,000$ και $H = 0$, όπως προκύπτουν από τα αποτελέσματα του αλγορίθμου Metropolis σειριακής σάρωσης και του αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων.	172
Διάγραμμα 6.8: Γραφικές παραστάσεις $P_{L0} = f(E)$ στο μοντέλο Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες για $L = 30$, $\frac{k_B T}{J} = 3,000$ και $H = 0$, όπως προκύπτουν από τα αποτελέσματα του αλγορίθμου Metropolis σειριακής σάρωσης και του αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων.	173
Διάγραμμα 6.9: Γραφικές παραστάσεις $P_{L0} = f(m)$ στο μοντέλο Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες για $L = 30$, $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και $H = 0$, όπως προκύπτουν από τα αποτελέσματα του αλγορίθμου Metropolis σειριακής σάρωσης και του αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων.	174
Διάγραμμα 6.10: Γραφικές παραστάσεις $P_{L0} = f(m)$ (δεξιός ή σιδηρομαγνητικός λοβός) στο μοντέλο Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες για $L = 30$, $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και $H = 0$, όπως προκύπτουν από τα αποτελέσματα του αλγορίθμου Metropolis σειριακής σάρωσης και του αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων.	175
Διάγραμμα 6.11: Γραφικές παραστάσεις $P_{L0} = f(m)$ (αριστερός ή σιδηρομαγνητικός λοβός) στο μοντέλο Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές	

συνθήκες για $L = 30$, $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και $H = 0$, όπως προκύπτουν από τα

αποτελέσματα του αλγορίθμου Metropolis σειριακής σάρωσης και του αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων.....176

Διάγραμμα 6.12: Γραφικές παραστάσεις $P_{L0} = f(E)$ στο μοντέλο Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες για $L = 30$, $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και $H = 0$, όπως

προκύπτουν από τα αποτελέσματα του αλγορίθμου Metropolis σειριακής σάρωσης και του αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων.177

Διάγραμμα 6.13: Μέση τιμή του λόγου του μεγέθους της πλειάδας (cluster) προς το μέγεθος του συνολικού πλέγματος συναρτήσει της θερμοκρασίας για $L = 30$ και $L = 60$. Στο παρόν διάγραμμα T_c είναι η κρίσιμη θερμοκρασία και $T(p_c)$ είναι η θερμοκρασία που αντιστοιχεί στο κατώφλι διαφυγής p_c . Βλέπουμε ότι και πάνω από την κρίσιμη θερμοκρασία το μέγεθος των σχηματιζόμενων πλειάδων παραμένει μεγάλο.....179

Διάγραμμα 6.14: Γραφική παράσταση της χρονικά μετατοπισμένης συνάρτησης αυτοσυσχέτισης της μαγνήτισης ως προς το χρόνο για ένα πλέγμα 36×39 στο κρίσιμο σημείο σε ημιλογαριθμικούς άξονες. Η γραμμικότητα του διαγράμματος αυτού φανερώνει την εκθετική εξάρτηση της συνάρτησης αυτοσυσχέτισης με το χρόνο.184

Διάγραμμα 6.15: Χρόνος συσχέτισης για την ενέργεια τ_e σε συνάρτηση με το μέγεθος του πλέγματος L σε λογαριθμικό σύστημα αξόνων για τον αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων και τον αλγόριθμο Metropolis στο κρίσιμο σημείο. Στο διάγραμμα τα τετράγωνα αντιστοιχούν στα αποτελέσματα του αλγορίθμου Metropolis, οι κύκλοι στα αποτελέσματα του αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων ενώ η διακεκομμένη γραμμή και η συνεχής γραμμή στις αντίστοιχες προσαρμοζόμενες ευθείες ελαχίστων τετραγώνων. Φυσικά προσομοιώσαμε όλα τα δυνατά πλέγματα Baxter-Wu από 24×27 μέχρι 102×105 στο κρίσιμο σημείο.186

Διάγραμμα 6.16: Χρόνος συσχέτισης για τη μαγνήτιση τ_m σε συνάρτηση με το μέγεθος του πλέγματος L σε λογαριθμικό σύστημα αξόνων για τον αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων και τον αλγόριθμο Metropolis στο κρίσιμο σημείο. Στο διάγραμμα τα τετράγωνα αντιστοιχούν στα αποτελέσματα του αλγορίθμου Metropolis, οι κύκλοι στα αποτελέσματα του αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων ενώ η διακεκομμένη γραμμή και η συνεχής γραμμή στις αντίστοιχες προσαρμοζόμενες ευθείες ελαχίστων τετραγώνων. Φυσικά προσομοιώσαμε όλα τα δυνατά πλέγματα Baxter-Wu από 24×27 μέχρι 102×105 στο κρίσιμο σημείο.187

Διάγραμμα 6.17: Χρόνοι συσχέτισης για τη μαγνήτιση τ_m και την ενέργεια τ_e σε συνάρτηση με το μέγεθος του πλέγματος L σε λογαριθμικό σύστημα αξόνων για τον αλγόριθμο πλειάδων των Novotny και Evertz. Στο διάγραμμα τα τετράγωνα αντιστοιχούν στα αποτελέσματα για τη μαγνήτιση, οι κύκλοι σε εκείνα για την ενέργεια, ενώ η διακεκομμένη γραμμή και η συνεχής γραμμή στις αντίστοιχες προσαρμοζόμενες ευθείες ελαχίστων τετραγώνων. Φυσικά

προσομοιώσαμε όλα τα δυνατά πλέγματα Baxter-Wu από 24×27 μέχρι 102×105 στο κρίσιμο σημείο.188

Διάγραμμα 7.1: Λογαριθμικό διάγραμμα των μέγιστων τιμών της ισόθερμης μαγνητικής επιδεκτικότητας χ_T , $L^{(\max)}$ σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος στην κρίσιμη θερμοκρασία (έχουμε θεωρήσει όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 102×105 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες στο κρίσιμο σημείο).193

Διάγραμμα 7.2: Λογαριθμικό διάγραμμα των θέσεων H_L^* του μεγίστου της ισόθερμης μαγνητικής επιδεκτικότητας σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος στην κρίσιμη θερμοκρασία (έχουμε θεωρήσει όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 102×105 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες).193

Διάγραμμα 7.3: Λογαριθμικό διάγραμμα της ισόθερμης μαγνητικής επιδεκτικότητας χ_T , $L|H=0$ στο κρίσιμο σημείο μηδενικού μαγνητικού πεδίου σε συνάρτηση με το μέγεθος του πλέγματος L (έχουμε θεωρήσει όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 102×105 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες στο κρίσιμο σημείο υπό μηδενικό εξωτερικό πεδίο).197

Διάγραμμα 7.4: «Ανακλιμακωμένη» ισόθερμη μαγνητική επιδεκτικότητα $\chi_{T,L}^{\gamma}$ σε συνάρτηση με το ανακλιμακωμένο εξωτερικό

μαγνητικό πεδίο $H_L^{\beta+\gamma}$ στην κρίσιμη θερμοκρασία για τρία διαφορετικά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες (45×48 , 60×63 και 75×78).199

Διάγραμμα 7.5: Γραφικές προστώσεις των λογαρίθμων των θέσεων m_p^* του σιδηρομαγνητικού μεγίστου και των θέσεων m_n^* του σιδηριμαγνητικού μεγίστου της κατανομής μαγνήτισης ως προς το λογάριθμο του μεγέθους L του πλέγματος στο κρίσιμο σημείο για μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο (έχουμε θεωρήσει όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 102×105 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες στο κρίσιμο σημείο υπό μηδενικό εξωτερικό πεδίο).201

Διάγραμμα 7.6: Γραφική παράσταση των λογαρίθμων των σιδηρομαγνητικών μεγίστων $P_{\max,p}$ και των σιδηριμαγνητικών μεγίστων $P_{\max,n}$ της συνάρτησης κατανομής μαγνήτισης σε συνάρτηση με το λογάριθμο του μεγέθους L του πλέγματος στο κρίσιμο σημείο για μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο (έχουμε θεωρήσει όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 102×105 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες στο κρίσιμο σημείο υπό μηδενικό εξωτερικό πεδίο).202

Διάγραμμα 7.7: Γραφική παράσταση της ανακλιμακωμένης συνάρτησης κατανομής μαγνήτισης $P_{L0}(m)$ σε συνάρτηση με την ανακλιμακωμένη μεταβλητή mL^{β} στο κρίσιμο σημείο με μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο για

τρία διαφορετικά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu (45×48, 60×63 και 72×75) με περιοδικές συνοριακές συνθήκες.	203
Διάγραμμα 7.8: Γραφική παράσταση του $\log P_{\max} = f(\log L)$, όπου $P_{\max,p}$ το σιδηρομαγνητικό και $P_{\max,n}$ το σιδηριμαγνητικό μέγιστο της κατανομής μαγνήτισης, στο κρίσιμο σημείο υπό μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο (έχουμε θεωρήσει όλα τα δυνατά υποπλέγματα Binder από 3×6 ως 69×72 σε ένα 69×72 συνολικό πλέγμα Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες στο κρίσιμο σημείο).	204
Διάγραμμα 7.9: Γραφική παράσταση του $\log P_{\max} = f(\log L)$, όπου $P_{\max,p}$ το σιδηρομαγνητικό και $P_{\max,n}$ το σιδηριμαγνητικό μέγιστο της κατανομής μαγνήτισης, στο κρίσιμο σημείο υπό μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο (έχουμε θεωρήσει όλα τα δυνατά υποπλέγματα Binder από 3×6 ως 96×99 σε ένα 96×99 συνολικό πλέγμα Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες στο κρίσιμο σημείο).	205
Διάγραμμα 7.10: Συγκριτικό διάγραμμα των σωρευτών του Binder σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu (έχουμε θεωρήσει όλα τα ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 102×105 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες) με τους ίδιους σωρευτές όπως προκύπτουν για την περίπτωση των υποπλεγμάτων τύπου Binder από 3×6 μέχρι 69×72 σε ένα 69×72 πλέγμα Baxter-Wu και για την περίπτωση των υποπλεγμάτων τύπου Binder από 3×6 μέχρι 96×99 σε ένα 96×99 πλέγμα Baxter-Wu, αμφότερα με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Όλες οι προσομοιώσεις έχουν πραγματοποιηθεί με τον καινούριο αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων στο κρίσιμο σημείο.	208
Διάγραμμα 7.11: Γραφική παράσταση των σωρευτών του Binder σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 102×105 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Όλες οι προσομοιώσεις έχουν πραγματοποιηθεί με τον καινούριο αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων στο κρίσιμο σημείο.	209
Διάγραμμα 7.12: Γραφική παράσταση των σωρευτών Binder σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για υποπλέγματα τύπου Binder από 3×6 μέχρι 69×72 σε ένα 69×72 πλέγμα Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Οι σχετικές προσομοιώσεις έχουν πραγματοποιηθεί με τον καινούριο αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων στο κρίσιμο σημείο.	210
Διάγραμμα 7.13: Γραφική παράσταση των σωρευτών Binder σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για υποπλέγματα τύπου Binder από 3×6 μέχρι 96×99 σε ένα 96×99 πλέγμα Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Οι σχετικές προσομοιώσεις έχουν πραγματοποιηθεί με τον καινούριο αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων στο κρίσιμο σημείο.	211
Διάγραμμα 7.14: Πολυωνυμική προσαρμογή του διαγράμματος του λόγου Q_L του Binder σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 102×105 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Όλες οι προσομοιώσεις έχουν πραγματοποιηθεί με τον καινούριο αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων στο κρίσιμο σημείο.	213

Διάγραμμα 7.15: Γραφική παράσταση της θέσης του ελαχίστου $H_0 = f(L)$ του λόγου του Binder Q_L στο μοντέλο Baxter-Wu για $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του νέου αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων (χρησιμοποιούμε όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu διαστάσεων από 3×6 έως 99×102 και περιοδικές συνοριακές συνθήκες).	216
Διάγραμμα 7.16: Γραφική παράσταση του ελαχίστου του σωρευτή Binder $Q_{Lmin} = f(L^{-1})$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του νέου αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων.	217
Διάγραμμα 7.17: Γραφική παράσταση του λογαρίθμου της μέγιστης θερμοχωρητικότητας $\log c_{max}$ σε συνάρτηση με το λογάριθμο του μεγέθους L του πλέγματος υπό μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο (χρησιμοποιούμε όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu διαστάσεων από 3×6 έως 99×102 και περιοδικές συνοριακές συνθήκες).	220
Διάγραμμα 7.18: γραφική παράσταση της θερμοκρασίας μέγιστης θερμοχωρητικότητας T^* σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος υπό μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο (χρησιμοποιούμε όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu διαστάσεων από 3×6 έως 99×102 και περιοδικές συνοριακές συνθήκες).	222
Διάγραμμα 7.19: Γραφική παράσταση του λογαρίθμου της θερμοχωρητικότητας ανά δεσμό $\log c_{crit}$ σε συνάρτηση με το λογάριθμο του μεγέθους L του πλέγματος για θερμοκρασία $\frac{k_B T}{J} = 2,27$ και μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο (χρησιμοποιούμε όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu διαστάσεων από 3×6 έως 99×102 και περιοδικές συνοριακές συνθήκες).	223
Διάγραμμα 7.20: Γραφική παράσταση $P_{L0} = f(E)$ στο μοντέλο Baxter-Wu, για $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$, $H = 0$ και $L = 72$, όπως προκύπτει από τα αποτελέσματα του νέου αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων.	225
Διάγραμμα 7.21: Γραφικές παραστάσεις $P_{L0} = f(E)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $L = 36$, $L = 72$, $L = 90$, $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και $H = 0$, όπως προκύπτουν από τα αποτελέσματα του νέου αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων. Τα στατιστικά σφάλματα παραλείπονται για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.	226
Διάγραμμα 7.22: Γραφική παράσταση των θέσεων του μεγίστου E_L^* της πυκνότητας πιθανότητας της ενέργειας σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για θερμοκρασία $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό	

πεδίο (χρησιμοποιούμε όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu διαστάσεων από 3×6 έως 99×102 και περιοδικές συνοριακές συνθήκες).228

Διάγραμμα 7.23: Γραφική παράσταση του μεγίστου P_{Lmax} της πυκνότητας πιθανότητας της ενέργειας σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για θερμοκρασία $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο

(χρησιμοποιούμε όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu διαστάσεων από 3×6 έως 99×102 και περιοδικές συνοριακές συνθήκες).230

Διάγραμμα 7.24: Γραφική παράσταση της μέσης τιμής της ενέργειας $\langle E \rangle$ σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για θερμοκρασία $\frac{k_B T}{J} = 2,27$ και

μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο (χρησιμοποιούμε όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu διαστάσεων από 3×6 έως 99×102 και περιοδικές συνοριακές συνθήκες).232

Διάγραμμα 7.25: Κοινό διάγραμμα της μέσης τιμής της ενέργειας $\langle E \rangle$ και της θέσης μεγίστου της κατανομής ενέργειας E^* σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για θερμοκρασία $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό

πεδίο (χρησιμοποιούμε όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu διαστάσεων από 3×6 έως 99×102 και περιοδικές συνοριακές συνθήκες).234

Διάγραμμα 7.26: Γραφικές παραστάσεις $V_{L0} = f(T)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $L = 54, L = 72, L = 90, \frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και $H = 0$, όπως προκύπτουν από

τα αποτελέσματα του νέου αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων. Τα στατιστικά σφάλματα παραλείπονται για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.236

Διάγραμμα 7.27: Γραφική παράσταση της θερμοκρασίας του ελαχίστου $T_0 = f(L)$ του σωρευτή του Binder V_{L0} στο μοντέλο Baxter-Wu υπό μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του νέου αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων (χρησιμοποιούμε όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu διαστάσεων από 3×6 έως 99×102 και περιοδικές συνοριακές συνθήκες).240

Διάγραμμα 7.28: Γραφική παράσταση του $\log\left(\frac{2}{3} - V_{L0min}\right)$ σε συνάρτηση με

το λογάριθμο του μεγέθους L του πλέγματος για ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 99×102 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Όλες οι προσομοιώσεις έχουν πραγματοποιηθεί με τον καινούριο αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων στο κρίσιμο σημείο.242

Διάγραμμα 7.29: Γραφική παράσταση του σωρευτή του Binder V_{L0} σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 99×102 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Όλες οι προσομοιώσεις έχουν πραγματοποιηθεί με τον καινούριο αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων στο κρίσιμο σημείο.244

Διάγραμμα 7.30: Πολυωνυμική προσαρμογή του διαγράμματος σωρευτή του Binder V_{L0} σε συνάρτηση με το αντίστροφο του μεγέθους L του πλέγματος για ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 99×102 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Όλες οι προσομοιώσεις έχουν πραγματοποιηθεί με τον καινούριο αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων στο κρίσιμο σημείο.....247

Διάγραμμα 7.31: Γραφικές παραστάσεις $V_L = f(T)$ στο μοντέλο Baxter-Wu για $L = 54, L = 72, L = 90, \frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και $H = 0$, όπως προκύπτουν από τα

αποτελέσματα του νέου αλγορίθμου πλειάδων τριγώνων. Τα στατιστικά σφάλματα παραλείπονται για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.....250

Διάγραμμα 7.32: Γραφική παράσταση του προτεινόμενου σωρευτή ενέργειας V_L σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 99×102 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Όλες οι προσομοιώσεις έχουν πραγματοποιηθεί με τον καινούριο αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων στο κρίσιμο σημείο.....251

Διάγραμμα 7.33: Πολυωνυμική προσαρμογή του διαγράμματος του προτεινόμενου ενεργειακού σωρευτή V_L σε συνάρτηση με το αντίστροφο του μεγέθους L του πλέγματος για ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 99×102 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Όλες οι προσομοιώσεις έχουν πραγματοποιηθεί με τον καινούριο αλγόριθμο πλειάδων τριγώνων στο κρίσιμο σημείο.....252

Διάγραμμα 8.1: Γραφική παράσταση της συνάρτησης $c = f(T)$ για $H = -3,5$ (σε μονάδες J), όπως προέκυψε με εφαρμογή του αλγορίθμου Wang-Landau Entropic Sampling για πλέγμα Baxter Wu 45×48 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Οι γραμμές των στατιστικών σφαλμάτων έχουν παραλειφθεί για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.....256

Διάγραμμα 8.2: Γραφική παράσταση της συνάρτησης $\log c_{\max} = f(\log L)$ για $H = -3,5$ (σε μονάδες J) όπως προέκυψε με εφαρμογή του αλγορίθμου Wang-Landau Entropic Sampling για παραλληλόγραμμα πλέγματα Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες μεγέθους από 3×6 ως 54×57259

Διάγραμμα 8.3: Γραφική παράσταση της συνάρτησης $T^* = f(L)$ για $H = -3,5$ (σε μονάδες J) όπως προέκυψε με εφαρμογή του αλγορίθμου Wang-Landau Entropic Sampling για παραλληλόγραμμα πλέγματα Baxter-Wu με περιοδικές συνοριακές συνθήκες μεγέθους από 3×6 ως 54×57260

Διάγραμμα 8.4: Γραφική παράσταση της συνάρτησης $\chi_T = f(T)$ για $H = -3,5$ (σε μονάδες J), όπως προέκυψε με εφαρμογή του αλγορίθμου Wang-Landau Entropic Sampling για πλέγμα Baxter Wu 45×48 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Οι γραμμές των στατιστικών σφαλμάτων έχουν παραλειφθεί για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.....261

Διάγραμμα 8.5: Γραφική παράσταση της συνάρτησης $\chi_T = f(T)$ για $H = -1,5$ (σε μονάδες J), όπως προέκυψε με εφαρμογή του αλγορίθμου Wang-Landau Entropic Sampling για πλέγμα Baxter Wu 45×48 με περιοδικές συνοριακές

συνθήκες. Οι γραμμές των στατιστικών σφαλμάτων έχουν παραλειφθεί για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.	262
Διάγραμμα 8.6: Γραφική παράσταση της συνάρτησης $c = f(H)$ για $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$, όπως προέκυψε με εφαρμογή του αλγορίθμου Wang-Landau Entropic Sampling για πλέγμα Baxter Wu 45×48 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Οι γραμμές των στατιστικών σφαλμάτων έχουν παραλειφθεί για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.	264
Διάγραμμα 8.7: Γραφική παράσταση της συνάρτησης $\chi_T = f(H)$ για $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$, όπως προέκυψε με εφαρμογή του αλγορίθμου Wang-Landau Entropic Sampling για πλέγμα Baxter Wu 45×48 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Οι γραμμές των στατιστικών σφαλμάτων έχουν παραλειφθεί για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.	265
Διάγραμμα 8.8: Γραφική παράσταση της συνάρτησης $c = f(H)$ για $\frac{k_B T_c}{J} = 2,324$, όπως προέκυψε με εφαρμογή του αλγορίθμου Wang-Landau Entropic Sampling για πλέγμα Baxter Wu 45×48 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Οι γραμμές των στατιστικών σφαλμάτων έχουν παραλειφθεί για να βελτιωθεί η ευκρίνεια του διαγράμματος.	267
Διάγραμμα 8.9: Φασικό διάγραμμα του προτύπου Baxter-Wu όπως προέκυψε με μετρήσεις της θερμοχωρητικότητας και της ισόθερμης μαγνητικής επιδεικνυκότητας κρατώντας σταθερό το μαγνητικό πεδίο και μεταβάλλοντας τη θερμοκρασία. Οι γραμμές των στατιστικών σφαλμάτων και στις δυο περιπτώσεις είναι αρκετά μικρές ώστε να καλύπτονται από τα σύμβολα των σημείων.	268
Διάγραμμα 8.10: Φασικό διάγραμμα του προτύπου Baxter-Wu όπως προέκυψε με μετρήσεις της θερμοχωρητικότητας και της ισόθερμης μαγνητικής επιδεικνυκότητας κρατώντας σταθερή τη θερμοκρασία και μεταβάλλοντας το μαγνητικό πεδίο. Οι γραμμές των στατιστικών σφαλμάτων και στις δυο περιπτώσεις είναι αρκετά μικρές ώστε να καλύπτονται από τα σύμβολα των σημείων.	269
Διάγραμμα 8.11: Γραφική παράσταση της θερμοκρασίας του ελαχίστου $T_0 = f(L)$ του σωρευτή του Binder V_{L0} στο μοντέλο Baxter-Wu υπό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο $H = -3,5$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγορίθμου εντροπικής δειγματοληψίας (χρησιμοποιούμε όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu διαστάσεων από 3×6 έως 54×57 και περιοδικές συνοριακές συνθήκες).	272
Διάγραμμα 8.12: Γραφική παράσταση του ελαχίστου του σωρευτή Binder V_{L0} σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 54×57 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες υπό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο $H = -3,5$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγορίθμου εντροπικής δειγματοληψίας.	273
Διάγραμμα 8.13: Γραφική παράσταση του σωρευτή Binder V_{L0} σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6	

ως 54×57 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες στο κρίσιμο σημείο με θερμοκρασία $\frac{k_B T_c}{J} = 1,883$ και εξωτερικό μαγνητικό πεδίο $H = -3,5$. Όλες οι προσομοιώσεις έχουν πραγματοποιηθεί με τον αλγόριθμο εντροπικής δειγματοληψίας.....	274
Διάγραμμα 8.14: Γραφική παράσταση του προτεινόμενου σωρευτή ενέργειας V_L σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 54×57 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες στο κρίσιμο σημείο με θερμοκρασία $\frac{k_B T_c}{J} = 1,883$ και εξωτερικό μαγνητικό πεδίο $H = -3,5$. Όλες οι προσομοιώσεις έχουν πραγματοποιηθεί με τον αλγόριθμο εντροπικής δειγματοληψίας.....	275
Διάγραμμα 8.15: Γραφική παράσταση των τοπικών ακροτάτων V_L^* του προτεινόμενου σωρευτή V_L σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu από 3×6 ως 54×57 με περιοδικές συνοριακές συνθήκες υπό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο $H = -3,5$. Όλες οι προσομοιώσεις έχουν πραγματοποιηθεί με τον αλγόριθμο εντροπικής δειγματοληψίας.....	280
Διάγραμμα B.1: Διάγραμμα ροής διαδικασίας- υποπρογράμματος προγραμμάτων προσομοίωσης στην οποία υλοποιείται ο αλγόριθμος Metropolis.....	293
Διάγραμμα B.2: Διάγραμμα ροής διαδικασίας-υποπρογράμματος προγραμμάτων προσομοίωσης στην οποία υλοποιείται ο αλγόριθμος Heat-Bath.....	294
Διάγραμμα B.3: διάγραμμα ροής διαδικασίας-υποπρογράμματος προγραμμάτων προσομοίωσης στην οποία υλοποιείται ο αλγόριθμος Wang-Landau (Entropic Sampling).....	295
Διάγραμμα B.4: διάγραμμα ροής διαδικασίας-υποπρογράμματος προγραμμάτων προσομοίωσης στο οποίο υλοποιείται ο αλγόριθμος πλειάδων (cluster) των Novotny και Evertz	296
Διάγραμμα B.5: διάγραμμα ροής διαδικασίας-υποπρογράμματος προγραμμάτων προσομοίωσης στο οποίο υλοποιείται ο αλγόριθμος πλειάδων τριγώνων (triangle cluster algorithm).....	297

ΕΥΡΕΤΗΡΙΟ ΠΙΝΑΚΩΝ

Πίνακας 1.1: Παράμετροι τάξης ορισμένων αλλαγών φάσης.....	33
Πίνακας 1.2: Οι κυριότερες Κλάσεις Παγκοσμιότητας (όλα τα παρακάτω πρότυπα θεωρούνται ομογενή, συμμετρικά, με επίδραση μόνο μεταξύ πρώτων γειτόνων).....	45
Πίνακας 5.1: Αποτελέσματα των προσαρμογών (fitting) σε θερμοκρασία $\frac{k_B T}{J} = 2,222$	137
Πίνακας 5.2: Σύγκριση των σωρευτών του Binder στο πρότυπο Baxter-Wu σε θερμοκρασία $\frac{k_B T}{J} = 2,222$ και εξωτερικό μαγνητικό πεδίο $H = 0$	141
Πίνακας 5.3: Πίνακας σύγκρισης της κλίσης του λογαριθμικού διαγράμματος της απόλυτης τιμής των σωρευτών του Binder σε συνάρτηση με το πλεγματικό μέγεθος L στο πρότυπο Baxter-Wu για $\frac{k_B T}{J} = 3,000$ και $H = 0$	146
Πίνακας 7.1: Σύγκριση της κλίσης του λογαριθμικού διαγράμματος μεγίστων της ισόθερμης μαγνητικής επιδεκτικότητας $\chi_{T, L(\max)}$ σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος στην κρίσιμη θερμοκρασία.....	195
Πίνακας 7.2: Σύγκριση της κλίσης του λογαριθμικού διαγράμματος των θέσεων H_L^* των μεγίστων της ισόθερμης μαγνητικής επιδεκτικότητας σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος στην κρίσιμη θερμοκρασία.....	196
Πίνακας 7.3: Σύγκριση της κλίσης του λογαριθμικού διαγράμματος της ισόθερμης μαγνητικής επιδεκτικότητας $\chi_{T, L} _{H=0}$ στο κρίσιμο σημείο υπό μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο ως προς το μέγεθος L του πλέγματος...198	
Πίνακας 7.4: Σύγκριση των σωρευτών του Binder στο μοντέλο Baxter-Wu σε θερμοκρασία $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και εξωτερικό μαγνητικό πεδίο $H = 0$ (κρίσιμο σημείο).....	208
Πίνακας 7.5: Πίνακας σύγκρισης της κλίσης του λογαρίθμου της μέγιστης θερμοχωρητικότητας ανά δεσμό $\log c_{\max}$ σε συνάρτηση με το λογάριθμο του μεγέθους L του πλέγματος υπό μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο.....	221
Πίνακας 7.6: Πίνακας σύγκρισης της θερμοκρασίας μέγιστης θερμοχωρητικότητας T^* σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος υπό μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο.	222
Πίνακας 7.7: Πίνακας σύγκρισης της κλίσης του λογαρίθμου της θερμοχωρητικότητας $\log c_{\text{crit}}$ σε συνάρτηση με το λογάριθμο του μεγέθους L του πλέγματος σε θερμοκρασία $\frac{k_B T}{J} = 2,27$ μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο.....	224

Πίνακας 7.8: Πίνακας σύγκρισης των θέσεων του μεγίστου E_L^* της πυκνότητας πιθανότητας της ενέργειας σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για θερμοκρασία $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο (χρησιμοποιούμε όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu διαστάσεων από 3×6 έως 99×102 και περιοδικές συνοριακές συνθήκες).	229
Πίνακας 7.9: Πίνακας σύγκρισης των μεγίστων της πυκνότητας πιθανότητας της ενέργειας P_{Lmax} σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για θερμοκρασία $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο (χρησιμοποιούμε όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu διαστάσεων από 3×6 έως 99×102 και περιοδικές συνοριακές συνθήκες).	231
Πίνακας 7.10: Πίνακας σύγκρισης της μέσης τιμής της ενέργειας $\langle E \rangle$ σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος για θερμοκρασία $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο (χρησιμοποιούμε όλα τα δυνατά ανεξάρτητα πλέγματα Baxter-Wu διαστάσεων από 3×6 έως 99×102 και περιοδικές συνοριακές συνθήκες).	233
Πίνακας 7.11: Πίνακας σύγκρισης της θερμοκρασίας ελάχιστου του σωρευτή ενέργειας T_{0L} σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος υπό μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο.	241
Πίνακας 7.12: Πίνακας σύγκρισης της του $\log\left(\frac{2}{3} - V_{L0min}\right)$ σε συνάρτηση με το λογάριθμο του μεγέθους L του πλέγματος υπό μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο.	243
Πίνακας 7.13: Πίνακας σύγκρισης του σωρευτή της ενέργειας V_{L0} σε συνάρτηση με το μέγεθος L του πλέγματος σε θερμοκρασία $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$ και μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο.	245
Πίνακας 7.14: Πίνακας σύγκρισης της κλίσης του $\log\left(\frac{2}{3} - V_{L0critical}\right)$ σε συνάρτηση με το λογάριθμο του μεγέθους L του πλέγματος στο κρίσιμο σημείο.	245
Πίνακας 8.1: Πίνακας σύγκρισης της κλίσης του λογαρίθμου του μεγίστου της θερμοχωρητικότητας C_{max} σε συνάρτηση με το λογάριθμο του μεγέθους του πλέγματος L για $H = -3,5$	259
Πίνακας 8.2: Κρίσιμα σημεία και κρίσιμοι εκθέτες α, ν για $H \leq 0$	262
Πίνακας 8.3: Κρίσιμα σημεία και κρίσιμοι εκθέτες γ, ν για $H \leq 0$. Για τις τιμές του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου που σημειώνονται με αστερίσκο (*) δεν παρατηρείται ολικό μέγιστο της ισόθερμης μαγνητικής επιδεκτικότητας, τουλάχιστον για τα πλεγματικά μεγέθη που μελετήθηκαν.	263

Πίνακας 8.4: Κρίσιμα σημεία και κρίσιμοι εκθέτες α , $(\beta+\gamma)$ για $H \leq 0$	265
Πίνακας 8.5: Κρίσιμα σημεία και κρίσιμοι εκθέτες β , ν για $H \leq 0$. Για τις τιμές του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου που παραλείπονται δεν παρατηρείται καμμία κορυφή της ισόθερμης μαγνητικής επιδεικτικότητας, τουλάχιστον για τα πλεγματικά μεγέθη που μελετήθηκαν.....	266
Πίνακας 8.6: Πίνακας τιμών των ελαχίστων του σωρευτή Binder V_{L0} για την ενέργεια και των αντίστοιχων κρίσιμων θερμοκρασιών για διάφορες τιμές του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου $H \leq 0$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγορίθμου εντροπικής δειγματοληψίας. Στον πίνακα απεικονίζονται επίσης και οι αντίστοιχοι κρίσιμοι εκθέτες, όπως προέκυψαν από τους σχετικούς υπολογισμούς.....	273
Πίνακας 8.7: Πίνακας κρίσιμων τιμών των σωρευτών ενέργειας V_{L0} , V_L για διάφορες τιμές του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου $H \leq 0$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγορίθμου εντροπικής δειγματοληψίας. Στον πίνακα απεικονίζονται επίσης και οι αντίστοιχοι εκθέτες (w ο εκθέτης του V_L), όπως προέκυψαν από τους σχετικούς υπολογισμούς.	276
Πίνακας 8.8: Πίνακας θερμοκρασιών και τιμών αριστερού τοπικού ελαχίστου του προτεινόμενου σωρευτή ενέργειας V_L για διάφορες τιμές του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου $H \leq 0$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγορίθμου εντροπικής δειγματοληψίας. Στον πίνακα απεικονίζονται επίσης και οι αντίστοιχοι εκθέτες, όπως προέκυψαν από τους σχετικούς υπολογισμούς.....	277
Πίνακας 8.9: Πίνακας θερμοκρασιών και τιμών δεξιού τοπικού ελαχίστου του προτεινόμενου σωρευτή ενέργειας V_L για διάφορες τιμές του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου $H \leq 0$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγορίθμου εντροπικής δειγματοληψίας. Στον πίνακα απεικονίζονται επίσης και οι αντίστοιχοι εκθέτες, όπως προέκυψαν από τους σχετικούς υπολογισμούς.....	278
Πίνακας 8.10: Πίνακας θερμοκρασιών και τιμών μεγίστου του προτεινόμενου σωρευτή ενέργειας V_L για διάφορες τιμές του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου $H \leq 0$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγορίθμου εντροπικής δειγματοληψίας. Στον πίνακα απεικονίζονται επίσης και οι αντίστοιχοι εκθέτες, όπως προέκυψαν από τους σχετικούς υπολογισμούς.....	279

ΕΥΡΕΤΗΡΙΟ ΟΡΩΝ

Binder

σωρευτές, 16, 17, 18, 63, 69, 70, 71, 72,
73, 76, 77, 80, 81, 82, 84, 85,
89, 108, 118, 119, 120, 127,
128, 129, 130, 132, 133, 135,
136, 137, 140, 141, 146, 147,
149, 151, 153, 154, 155, 190,
199, 203, 204, 205, 206, 207,
208, 209, 210, 211, 212, 213,
214, 215, 216, 217, 218, 234,
240, 244, 245, 247, 248, 254,
270, 271, 272, 273, 274, 282,
283, 284, 285, 286, 287, 325,
327, 330, 331, 332, 337, 338,
339, 340, 341

Monte Carlo, 16, 17, 58, 59, 65, 66, 69, 70,
72, 75, 77, 82, 85, 90, 91, 92, 93,
94, 95, 96, 97, 99, 100, 103, 104,
109, 110, 111, 113, 115, 116,
117, 119, 120, 121, 122, 123,
124, 125, 145, 147, 155, 160,
167, 178, 181, 182, 185, 190,
192, 211, 213, 217, 218, 219,
224, 226, 231, 235, 239, 243,
249, 253, 254, 257, 263, 271,
284, 285, 286, 287, 325, 327,
330, 333

αλγόριθμος

heat-bath, 16, 95, 97, 98

Metropolis, 16, 18, 95, 96, 97, 98, 99,
100, 104, 109, 111, 115, 120,
121, 123, 124, 125, 126, 127,
128, 129, 130, 131, 132, 133,
134, 135, 136, 138, 139, 140,
142, 143, 144, 145, 147, 148,
149, 150, 151, 152, 153, 154,
155, 156, 158, 167, 168, 169,
170, 171, 172, 173, 174, 175,
176, 177, 178, 182, 183, 185,
186, 187, 190, 200, 213, 218,
281, 282, 283, 293, 327, 330,
331, 332, 333, 334, 335, 342

Wang- Landau, 16

Wang-Landau, 16, 18, 107, 111, 256,
259, 260, 261, 262, 264, 265,
267, 286, 340, 341

θερμού λουτρού, 16

πλειάδων, 16, 115, 163, 167, 185, 218,
221, 224, 296, 297, 342

πλειάδων τριγώνων, 16, 163, 166, 168,
169, 170, 171, 172, 173, 174,
175, 176, 177, 178, 184, 185,
186, 187, 191, 200, 205, 208,
209, 210, 211, 213, 216, 217,
218, 219, 225, 226, 236, 240,
242, 243, 244, 247, 249, 250,
251, 252, 271, 280, 282, 283,
288, 303, 334, 335, 337, 338,
339, 340

αλλαγές φάσης, 16, 17, 19, 27, 31, 33, 39,
47, 57, 61, 63, 89, 104, 120, 158,
224, 248, 252, 253, 286, 287

ειδική θερμότητα, 16, 50, 219

επιδεκτικότητα

μαγνητική, 10, 16, 18, 20, 31, 33, 70, 79,
80, 99, 118, 130, 149, 155,
181, 190, 191, 192, 199, 255,
257, 258, 260, 266, 282, 287,
336

θερμοχωρητικότητα, 16, 18, 31, 33, 60, 88,
99, 119, 190, 218, 219, 222, 226,
237, 238, 249, 255, 256, 258,
260, 271, 274, 282, 285

κατανομή ενέργειας, 16, 18, 85, 219

κατανομή μαγνήτισης, 16, 69, 77, 155, 191,
200, 207, 225, 284

Κλάση Παγκοσμιοτητας, 16, 18, 65, 67,
82, 182, 188, 213, 237, 254, 267,
275, 286

Κλιμάκωση Πεπερασμένου Μεγέθους, 16

κρίσιμα φαινόμενα, 16, 19

κρίσιμο σημείο, 11, 16, 18, 25, 31, 33, 37,
38, 39, 40, 41, 42, 44, 47, 52, 58,
59, 67, 71, 72, 75, 90, 99, 115,
120, 125, 147, 148, 154, 155,
156, 178, 184, 185, 186, 187,
188, 191, 193, 197, 198, 200,
201, 202, 203, 204, 205, 206,
207, 208, 209, 210, 211, 212,
213, 214, 218, 222, 224, 231,
235, 238, 242, 243, 244, 245,
246, 247, 249, 251, 252, 260,
263, 267, 269, 271, 274, 275,
276, 282, 283, 284, 285, 286,
287, 335, 336, 337, 339, 340, 342

κρίσιμοι εκθέτες, 16, 42, 43, 50, 51, 61,
185, 228, 254, 262, 263, 265,
266, 267, 269, 273, 276, 285

πρότυπο Baxter-Wu, 1, 16, 18, 63, 64, 65,
66, 68, 69, 77, 81, 103, 107, 117,
127, 136, 141, 146, 147, 153,

154, 155, 158, 160, 178, 185,
188, 192, 205, 207, 253, 267,
269, 281, 284, 285, 287, 332, 333