

**ΕΘΝΙΚΟ ΚΑΙ ΚΑΠΟΔΙΣΤΡΙΑΚΟ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΘΗΝΩΝ
ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΗΣ**

**Μέθοδοι Υπολογιστικής Επιστήμης
και Στατιστικής Φυσικής
στη μελέτη Συστημάτων Αταξίας
Θοδωρής Παπακωνσταντίνου**



Αθήνα 2016

Εξεταστική επιτροπή

Τριμελής Συμβουλευτική Επιτροπή

- Αναπληρωτής Καθηγητής Ι. Χατζηαγαπίου ¹
- Αναπληρωτής Καθηγητής Κ. Παρασκευαΐδης ²
- Επίκουρος Καθηγητής Ι. Λελίδης ¹

Μέλη Επταμελούς Επιτροπής

- Καθηγητής Γ. Τριμπέρης ¹
- Αναπληρωτής Καθηγητής Φ. Διάκονος ¹
- Επίκουρος Καθηγητής Ν. Φυτάς ³
- Επίκουρος Καθηγητής Κ. Σιμσερίδης ¹

- 1: Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Σχολή Θετικών Επιστημών Τμήμα Φυσικής
- 2: Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών.
- 3: Coventry University, Faculty of Engineering and Computing, Department of Mathematics & Physics.

Summary

In this thesis we present the numerical study of the critical behavior of Ising models with quenched disorder.

Unfrustrated models were studied, like the $2d$ and $3d$ Blume-Capel (BC) random bond, as well as the $S = 1$ and $S = 1/2$ Ising models in archimedean lattices. We also studied the cubic Edwards-Anderson (EA) spin glass model with transverse and longitudinal anisotropy in the exchange interaction probability distribution. In order to tackle the strong entrapment phenomena of the MC procedure in the models studied, especially the spin glass phase of the EA models, we applied the Parallel Tempering (PT) simulation method.

PT procedure was optimized through a global comparative study of proposed methods for choosing temperature sequence, exchanging replicas and applying local sampling algorithms. We accurately confirmed, through a hybrid Wolff-Metropolis MC study, that the phase transition of the $S = 1/2$ and $S = 1$ Ising models in two archimedean lattices belongs to the universality of the $2d$ Ising model.

A two stage Wang-Landau sampling numerical study was performed on the $2d$ random bond BC model, in both the weak and strong disorder regime. In the weak disorder case we evaluated the phase diagram and critical behavior as well as the multi-critical points. The ground state and finite temperature study of the strong disorder point $\Delta = 1.5, r = 0.5/1.5$ was found to be near the border between the weak and strong disorder universality class.

The influence of bond randomness in the first and second-order transitions was also studied via PT in the case of the $3d$ BC model. The ex-second-order phase transition was categorized in the universality class of the $3d$ random Ising model. On the other hand the ex-first-order was also found to be second-order, but did not follow the same critical behavior mainly due to the differentiation of the critical exponent γ/ν . This fact indicates violation of universality principle since the two continuous transitions do not belong to the same universality class.

We produced the phase diagrams of transverse and longitudinal anisotropic EA spin glass models through extensive PT simulations. We examined the criticality of the transitions between the ferromagnetic (F), spin glass (G) and paramagnetic (P) phase of the models. In all cases we found that the transitions remained in the universality of the isotropic EA. In both models we established with accuracy that the F-P transition belongs to the class of the random Ising model. In the symmetric case

of the phase diagram, we observed that the critical temperature and ground state energy of the transversal and isotropic model coincided, while the same quantities of the longitudinal differed. These findings were interpreted highlighting the role of frustration in Ising spin glass models.

Περίληψη

Στην παρούσα διατριβή παρουσιάζεται η αριθμητική μελέτη της κρίσιμης συμπεριφοράς μαγνητικών συστημάτων τύπου Ising με αταξία. Μελετήθηκαν πρότυπα σπιν χωρίς σύγχυση, όπως τα πρότυπα Blume-Capel (BC) τυχαίων δεσμών δύο και τριών διαστάσεων, καθώς και το πρότυπο Ising και $S = 1$ σε αρχιμήδεια πλέγματα (ΑΠ). Επίσης, μελετήθηκαν δύο κυβικά πρότυπα υάλων σπιν Edwards-Anderson (EA) με ανισοτροπία στην κατανομή πιθανότητας αλληλεπιδράσεων, το εγκάρσια και κατά μήκος ανισοτροπικό.

Προκειμένου να αντιμετωπιστούν τα έντονα φαινόμενα παγίδευσης στην δειγματοληψία MC τα οποία παρουσιάζουν τα υπό μελέτη συστήματα σπιν και ειδικά η υαλώδης φάση των προτύπων EA, έγινε εφαρμογή της μεθοδολογίας παράλληλης θερμοποίησης (ΠΘ). Η ΠΘ βελτιστοποιήθηκε μέσω συνολικής συγκριτικής μελέτης σύγχρονων μεθόδων επιλογής θερμοκρασιών, ανταλλαγής αντιγράφων και εφαρμογής τοπικών αλγορίθμων.

Μέσω υβριδικού αλγορίθμου Wolff-Metropolis επιβεβαιώθηκε με μεγάλη ακρίβεια ότι η μετάβαση φάσης στα πρότυπα Ising $S = 1/2$ και $S = 1$ σε ΑΠ ανήκει στην οικουμενικότητα του $2d$ προτύπου Ising.

Το $2d$ πρότυπο BC τυχαίων δεσμών μελετήθηκε με δειγματοληψία Wang-Landau δύο επιπέδων. Το πρότυπο μελετήθηκε στην περιοχή ασθενούς και ισχυρής αταξίας. Στην περιοχή ασθενούς αταξίας μελετήθηκε το διάγραμμα φάσης καθώς και η κρίσιμη συμπεριφορά καθώς και εκτιμήθηκαν τα πολυ-κρίσιμα σημεία. Το σημείο ισχυρής αταξίας $\Delta = 1.5, r = 0.5/1.5$, από την μελέτη θεμελιώδους κατάστασης καθώς από τη μελέτη πεπερασμένης θερμοκρασίας φαίνεται να βρίσκεται στο σύνορο μεταξύ ασθενούς και ισχυρής αταξίας κλάσης οικουμενικότητας.

Στο $3d$ πρότυπο BC τυχαίων δεσμών μελετήθηκε η επίδραση της αταξίας στις μεταβάσεις πρώτης και δεύτερης τάξης, του απλού προτύπου, μέσω δειγματοληψίας ΠΘ. Η μελέτη της κρισιμότητας της περιοχής πρώην δεύτερης τάξης την ενέταξε στην κλάση οικουμενικότητας του τυχαίου προτύπου Ising. Η μετάβαση της περιοχής πρώην πρώτης τάξης μετατράπηκε και αυτή σε δεύτερης τάξης αλλά έδειξε διαφορετική κρίσιμη συμπεριφορά κυρίως λόγω της διαφοροποίησης του κρίσιμου εκθέτη γ/ν . Παρατηρήθηκε, έτσι, παραβίαση της οικουμενικότητας αφού οι δύο μεταβάσεις δεύτερης τάξης που επάγονται από την αταξία, δεν ανήκουν στην ίδια κλάση οικουμενικότητας.

Για τα ανισοτροπικά υαλώδη συστήματα EA κατασκευάστηκαν τα διαγράμματα φάσης στα οποία αναδεικνύονται τρεις μεταβάσεις: σιδη-

ρομαγνητική – παραμαγνητική (F-P), σιδηρομαγνητική – υαλώδης (F-G) και παραμαγνητική – υαλώδης (P-G). Μελετήθηκε η κρίσιμη συμπεριφορά όλων των μεταβάσεων και αποδείχτηκε ότι οι μεταβάσεις ανήκουν στις ίδιες κλάσεις οικουμενικότητας με το ιστροπικό. Ιδιαίτερα επαληθεύτηκε ότι η F-P μετάβαση ανήκει στην κλάση οικουμενικότητας του τυχαίου προτύπου Ising. Επίσης στο συμμετρικό σημείο των διαγραμμάτων φάσης παρατηρήθηκε σύμπτωση στη κρίσιμη θερμοκρασία και την ενέργεια θεμελιώδους κατάστασης για το ιστροπικό και το εγκάρσια ανιστροπικό πρότυπο, ενώ παρατηρήθηκαν διαφορές των αντιστοιχών μεγεθών για το κατά μήκος ανιστροπικό. Τα ευρήματα αυτά ερμηνεύθηκαν, και αναδείχθηκε ο ρόλος της σύγχυσης στα υαλώδη πρότυπα σπιν.

Δημοσιεύσεις

- A. Malakis, A. Berker, I. Hadjiagapiou, N. Fytas, and T. Papakonstantinou. Multicritical points and crossover mediating the strong violation of universality: Wang-landau determinations in the random-bond $d = 2$ blume-capel model. *Phys. Rev. E*, 81:041113, Apr 2010.
- A. Malakis, A. N. Berker, I. A. Hadjiagapiou, N. G. Fytas, and T. Papakonstantinou. Uncovering the secrets of the 2D random-bond Blume-Capel model. *Physica A Statistical Mechanics and its Applications*, 389:2930–2933, August 2010.
- A. Malakis, G. Gulpinar, Y. Karaaslan, T. Papakonstantinou, and G. Aslan. Universality of the ising and the $s = 1$ model on archimedean lattices: A monte carlo determination. *Phys. Rev. E*, 85:031146, Mar 2012.
- A. Malakis, A. Nihat Berker, N. G. Fytas, and T. Papakonstantinou. Universality aspects of the $d = 3$ random-bond Blume-Capel model. *Phys. Rev. E*, 85:061106, Jun 2012.
- T. Papakonstantinou and A. Malakis. Critical behavior of the three-dimensional Ising model with anisotropic bond randomness at the ferromagnetic-paramagnetic transition line. *Phys. Rev. E*, 87(1):012132, Jan 2013.
- A. Malakis and T. Papakonstantinou. Comparative study of selected parallel tempering methods. *Phys. Rev. E*, 88:013312, Jul 2013.
- T. Papakonstantinou and A. Malakis. Parallel tempering and 3D spin glass models. *J. Phys.: Conf. Ser.*, 487:012010, 2014.
- T. Papakonstantinou, N. G. Fytas, A. Malakis, and I. Lelidis. Critical aspects of three-dimensional anisotropic spin-glass models. *Eur. Phys. J. B*, 88:4:94, Apr 2015.

Πρόλογος

Η παρούσα διατριβή εκπονήθηκε στον Τομέα Φυσικής Στερεάς Κατάστασης του Τμήματος Φυσικής της Σχολής Θετικών Επιστημών του Εθνικού και Καποδιστριακού Πανεπιστημίου Αθηνών, από τον Ιούνιο του 2009 μέχρι τον Μάιο του 2016, με κύριο επιβλέποντα αρχικά τον Αναπληρωτή Καθηγητή Αναστάσιο Μαλάκη και κατόπιν τον Αναπληρωτή Καθηγητή Ιωάννη Χατζηαγαπίου. Θα ήθελα να ευχαριστήσω ιδιαιτέρως τον Α. Μαλάκη για τον χρόνο, την επιστημονική υποστήριξη, τις ευκαιρίες και την καθοδήγηση που μου προσέφερε, χωρίς τα οποία η παρούσα διατριβή δεν θα ήταν δυνατή.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τα μέλη της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής Αναπλ. Καθηγητή Ι. Χατζηαγαπίου, Αναπλ. Καθηγητή Κ. Παρασκευαΐδη και Επίκ. Καθηγητή Ι. Λελίδη. Ευχαριστώ επίσης τα μέλη της επταμελούς εξεταστικής επιτροπής Καθηγητη Γ. Τριμπέρη, τον Αναπλ. Καθηγητή Φ. Διάκονο τον Επίκ. Καθηγητή Κ. Σιμσερίδη του Ε.Κ.Π.Α καθώς και τον Επίκ. Καθηγητή του πανεπιστημίου του Coventry του Ηνωμένου Βασιλείου Ν. Φυτά.

Ευχαριστώ επίσης τους εργαζόμενους του τμήματος, τους συμφοιτητές και φίλους και γενικά όλους όσους παρέχουν, υπερασπίζονται και διευρύνουν το δικαίωμα στην γνώση.

Η διατριβή υποστηρίχθηκε μέσω διατροφής από τον Ειδικό Λογαριασμό Κονδυλίων Έρευνας του Ε.Κ.Π.Α.

Περιεχόμενα

1	Εισαγωγή	1
1.1	Στατιστική μηχανική και κρίσιμα φαινόμενα	2
1.2	Θεωρίες κρίσιμων φαινομένων	8
1.2.1	Κλιμάκωση	8
1.2.2	Οικουμενικότητα και Επανακανονικοποίηση	11
1.2.3	Επανακανονικοποίηση	12
1.2.4	Κλιμάκωση πεπερασμένου μεγέθους	15
1.3	Πλεγματικά πρότυπα κρισιμότητας.	18
1.3.1	Πρότυπα χωρίς αταξία	18
1.3.2	Πρότυπα με αταξία	19
2	Μεθοδολογία	27
2.1	Εισαγωγή	27
2.2	Μαρκοβιανές Ανεξίξεις	29
2.2.1	Λεπτομερές Ισοζύγιο	30
2.3	Δειγματοληψία σημαντικότητας	32
2.3.1	Ο αλγόριθμος Metropolis	32
2.3.2	Ο αλγόριθμος Bortz Kalos Lebowitz - BKL	34
2.3.3	Ο αλγόριθμος Wolff	35
2.4	Εντροπική Δειγματοληψία	37
2.4.1	Ο αλγόριθμος Wang-Landau	38
2.5	Παράλληλη Θερμοποίηση	41
2.5.1	Περιγραφή - σύγκριση σχημάτων PT	41
2.5.2	Μέθοδος επιλογής ακολουθίας θερμοκρασιών	43
2.5.3	Μέθοδος ανταλλαγής αντιγράφων	46
2.5.4	Στοιχειώδες βήμα και αλγόριθμοι τοπικών κινήσεων	49
2.5.5	Σύγκριση στο $2d$ πρότυπο Ising	49
2.5.6	Θεμελιώδεις καταστάσεις στο $3d$ πρότυπο EA	59
2.5.7	Σύνοψη και συμπεράσματα	63

3	Πρότυπα τύπου Ising	65
3.1	Εισαγωγή	65
3.2	Πρότυπο Ising $S=1/2$ και $S=1$ σε αρχιμήδεια πλέγματα . .	66
3.2.1	Ορισμός προτύπων και περιγραφή σχήματος MC .	67
3.2.2	Μοντέλο Ising $S = 1/2$ στα $(3, 4, 6, 4)$ και $(3^4, 6)$ ΑΠ	69
3.2.3	Μοντέλο Ising $S = 1$ στα $(3, 4, 6, 4)$ και $(3^4, 6)$ ΑΠ .	71
3.2.4	Συμπεράσματα	75
3.3	$2d$ πρότυπο Blume-Capel αταξίας αλληλεπιδράσεων . . .	76
3.3.1	Απλό και τυχαίο $2d$ πρότυπο BC	76
3.3.2	Περιγραφή της υλοποίησης Wang-Landau δειγματοληψίας	77
3.3.3	Διάγραμμα φάσης	79
3.3.4	Ισχυρή παραβίαση της οικουμενικότητας	81
3.3.5	Οικουμενικότητα απλού και τυχαίων δεσμών $2d$ προτύπου BC	83
3.3.6	Εκτίμηση πολυ-κρίσιμων σημείων	84
3.3.7	Θεμελιώδης κατάσταση	87
3.3.8	Περιοχή ισχυρής αταξίας	90
3.3.9	Συμπεράσματα	91
3.4	$3d$ πρότυπο Blume-Capel αταξίας αλληλεπιδράσεων . . .	93
3.4.1	Απλό και τυχαίο $3d$ πρότυπο BC	94
3.4.2	Διαδικασία προσομοίωσης	94
3.4.3	Περιοχή πρώην δεύτερης τάξης: Κλάση οικουμενικότητας RIM	95
3.4.4	Περιοχή πρώην πρώτης τάξης	99
3.4.5	Σύνοψη και συμπεράσματα	106
4	Υαλώδη πρότυπα σπιν	107
4.1	Εισαγωγή	107
4.1.1	Ρήξη συμμετρίας αντιγράφου	108
4.1.2	Πρότυπο μικρή εμβέλειας EA	111
4.2	Ισοτροπικό κυβικό πρότυπο Edwards-Anderson	113
4.2.1	Σιδηρομαγνητική-παραμαγνητική μετάβαση FP . .	114
4.2.2	Σιδηρομαγνητική-υαλώδης μετάβαση FG	114
4.2.3	Υαλώδης-παραμαγνητική μετάβαση GP	115
4.3	Εγκάρσια ανισοτροπικό πρότυπο EA	116
4.3.1	Σιδηρομαγνητική-παραμαγνητική μετάβαση FP . .	116
4.3.2	Σιδηρομαγνητική-υαλώδης μετάβαση FG	126
4.3.3	Υαλώδης-παραμαγνητική μετάβαση GP	127
4.3.4	Περιγραφή διαδικασίας προσομοίωσης	129
4.3.5	Συμπεράσματα	132

4.4	Κατά μήκος ανισοτροπικό μοντέλο EA	134
4.4.1	Σιδηρομαγνητική-παραμαγνητική μετάβαση <i>FP</i>	134
4.4.2	Σιδηρομαγνητική-υαλώδης μετάβαση <i>FG</i>	139
4.4.3	Υαλώδης-παραμαγνητική μετάβαση <i>GP</i>	141
4.4.4	Περιγραφή διαδικασίας προσομοίωσης	142
4.4.5	Συμπεράσματα	144
4.5	Συνολικό διάγραμμα φάσης	146
4.6	Συμπεράσματα	148

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

Η στατιστική μηχανική, μαζί με την κβαντομηχανική, συνιστούν τα θεμέλια της σύγχρονης φυσικής που στόχο έχει την ενδελεχή κατανόηση των φυσικών φαινομένων από τη μικροσκοπική ματιά της ατομικής φυσικής. Η στατιστική μηχανική συμβάλλει όχι μόνο στην κατανόηση των ιδιοτήτων της ύλης αλλά και σχεδόν σε όλα τα πεδία της φυσικής επιστήμης - από την πυρηνική φυσική μέχρι την αστροφυσική. Εκτός της φυσικής η εφαρμογή της επεκτείνεται συνεχώς και σε άλλους τομείς των θετικών επιστημών (χημεία, βιολογία, επιστήμη υπολογιστών κ.ά.) καθώς και στις κοινωνικές επιστήμες.

1.1 Στατιστική μηχανική και κρίσιμα φαινόμενα

Η στατιστική μηχανική μελετά συστήματα αποτελούμενα από μεγάλο αριθμό συστατικών, τυπικά ατόμων ή μορίων, της τάξης του αριθμού του Αβοκάντρο. Η περιγραφή της κατάστασης στην οποία βρίσκονται (μακροκατάσταση) γίνεται μέσω της χρήσης θεωρίας πιθανοτήτων στον χώρο των καταστάσεων της κλίμακας των συστατικών τους (μικροκαταστάσεων). Από την δυναμική των στοιχειωδών συστατικών, μέσω στατιστικής ανάλυσης των δυνατών καταστάσεων στις οποίες είναι δυνατόν να βρίσκονται, ή αλλιώς του χώρου των φάσεων, επάγεται η συνολική συμπεριφορά του συστήματος. Χαρακτηριστικό παιδαγωγικό παράδειγμα είναι η αναπαραγωγή των νόμων της θερμοδυναμικής αερίων από τους νόμους κίνησης ελεύθερων ατόμων.

Στην παρούσα διατριβή μελετώνται μαγνητικά συστήματα, τα οποία είναι ικανά να περιγράψουν την συμπεριφορά φυσικών μαγνητικών υλικών, αλλά ταυτόχρονα αποτελούν πολύ εύστοχα ανάλογα για πληθώρα φυσικών και θεωρητικών συστημάτων. Κλασικό παράδειγμα αποτελεί η αντιστοιχία μετάβασης από υγρό σε αέριο και σιδηρομαγνητισμού - παραμαγνητισμού [167] στα ρευστά και σιδηρομαγνήτες αντίστοιχα. Κυρίως όμως λόγω της μοντελοποίησης των μαγνητικών υλικών που εισήγαγε το πρότυπο Ising, και λόγω της απλότητας του, έγινε αυτό και παραλλαγές του, το κύριο πεδίο έρευνας και ανάπτυξης των σύγχρονων θεωριών και εργαλείων στα κρίσιμα φαινόμενα.

Στην συνέχεια παρατίθενται μια σειρά από αναγκαίες για την συνέχεια βασικές έννοιες και ορισμοί. Η μακροκατάσταση ή αλλιώς κατάσταση ορίζεται από μικρό αριθμό μετρήσιμων ποσοτήτων. Η κατάσταση ενός αερίου για παράδειγμα ορίζεται από την πίεση- P , πυκνότητα- ρ , όγκο- V , θερμοκρασία- T , ενέργεια- E , αριθμό ατόμων- N και γενικά τα μεγέθη τα οποία μπορούμε να μετρήσουμε μακροσκοπικά.

Για τα μαγνητικά υλικά τα οποία θα μας αποσχολήσουν εδώ η πίεση αντικαθίσταται από το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο H και αντί για πυκνότητα μετράμε την αυθόρμητη μαγνήτιση ή μαγνήτιση ή μαγνητική ροπή M . Ο όγκος αντιστοιχεί στον αριθμό σωματιδίων N .

Από την άλλη, κάθε μικροκατάσταση έχει τεράστιο αριθμό βαθμών ελευθερίας ανάλογο του αριθμού στοιχειωδών συστατικών (άτομα, μόρια, σπιν, ...) N και υπό αυτή την έννοια ο αριθμός των μακροσκοπικών ποσοτήτων είναι μικρός.

Κάθε υπό μελέτη σύστημα υπόκειται σε ένα σύνολο περιορισμών που περιγράφουν ποιες μακροσκοπικές ποσότητες παραμένουν σταθε-

ρές ($E, T, N \dots$) και με την σειρά τους υπαγορεύουν την κατανομή της συλλογής των μικροκαταστάσεων.

Έτσι αν ένα σύστημα δεν ανταλλάσσει ενέργεια και αριθμό σωματιδίων με το περιβάλλον καλείται απομονωμένο. Η συλλογή των μικροκαταστάσεων του καλείται μικροκανονική και ακολουθεί ομοιόμορφη κατανομή.

Στην περίπτωση που το σύστημα έχει σταθερή θερμοκρασία, αλλά επιτρέπεται η ανταλλαγή ενέργειας με το περιβάλλον όπως σε λουτρό θερμότητας, τότε η συλλογή μικροκαταστάσεων λέγεται κανονική. Στην παρούσα διατριβή μελετήθηκαν συστήματα των οποίων η στατιστική των μικροκαταστάσεων υπακούει στην κανονική κατανομή.

Οι ποσότητες για τις οποίες δεν υπάρχει περιορισμός μπορούν να κυμαίνονται, οπότε για μια ποσότητα A ορίζεται για την συλλογή του συστήματος, η μέση της τιμή $\langle A \rangle$. Αν συμβολίσουμε με \bar{A} την μέση χρονική τιμή της ποσότητας τότε στην θερμοδυναμική ισορροπία ισχύει το εργοδικό θεώρημα:

$$\bar{A} = \langle A \rangle \quad (1.1)$$

Η κανονική κατανομή εκφράζεται με την βοήθεια του παράγοντα Boltzmann:

$$f_i = \exp\{-\beta E_i\} \quad (1.2)$$

όπου $\beta = \frac{1}{k_B T}$ με k_B την σταθερά Boltzmann.

Η πιθανότητα μιας μικροκατάστασης i , ενέργειας E_i είναι:

$$p_i = \frac{1}{Z} \exp\{-\beta E_i\} \quad (1.3)$$

όπου Z είναι το άθροισμα των μικροκαταστάσεων και καλείται συνάρτηση επιμερισμού, η γνώση της οποίας αντιστοιχεί με πλήρη κατανόηση του συστήματος, καθώς μέσω αυτής υπολογίζονται όλες οι μακροσκοπικές ποσότητες.

$$Z = \sum_i \exp\{-\beta E_i\} \quad (1.4)$$

Η κατάσταση ισορροπίας στην κανονική συλλογή και όταν το πεδίο είναι σταθερό (συνθήκες οι οποίες ισχύουν σε όλες τις περιπτώσεις που μελετώνται εδώ), αντιστοιχεί σε ελάχιστο της ελεύθερης ενέργειας η οποία υπολογίζεται απευθείας από την συνάρτηση επιμερισμού:

$$\mathcal{F} = -\frac{1}{\beta} \log Z \quad (1.5)$$

Η αναμενόμενη τιμή $\langle A \rangle$ ενός οποιουδήποτε μετρήσιμου μεγέθους A προκύπτει από την άθροισή του στις μικροκαταστάσεις:

$$\langle A \rangle = \sum_i p_i A_i = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_i A_i e^{-\beta E_i} = \frac{\sum_i A_i e^{-\beta E_i}}{\sum_i \exp\{-\beta E_i\}} \quad (1.6)$$

Για παράδειγμα η εσωτερική ενέργεια U υπολογίζεται σαν:

$$U = \langle E \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_i E_i e^{-\beta E_i} = -\frac{\partial \log \mathcal{Z}}{\partial \beta} \quad (1.7)$$

Η θερμοχωρητικότητα δίνεται από την εσωτερική ενέργεια:

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = k_B \beta^2 \frac{\partial^2 \log \mathcal{Z}}{\partial \beta^2} \quad (1.8)$$

και συνακόλουθα από την διακύμανση της εσωτερικής ενέργειας.

$$C = k_B \beta^2 [\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2] \quad (1.9)$$

Για ένα μαγνητικό σύστημα, η μαγνήτιση δίνεται από την παράγωγο της ελεύθερης ενέργειας ως προς το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο (H):

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

Συνήθως η \mathcal{F} είναι άγνωστη οπότε η M υπολογίζεται από την άθροιση στις μικροκαταστάσεις $\langle M \rangle$.

Ολοκληρώνοντας την παράθεση των βασικών θερμοδυναμικών ποσοτήτων δίνεται η (ισόθερμη) μαγνητική επιδεκτικότητα η οποία ορίζεται ως:

$$\chi_T = \left(\frac{\partial M}{\partial H} \right)_T = \beta^{-1} \frac{\partial^2 \log \mathcal{Z}}{\partial H^2} \quad (1.11)$$

η οποία εκφράζεται μέσω της διακύμανση της μαγνήτισης ως:

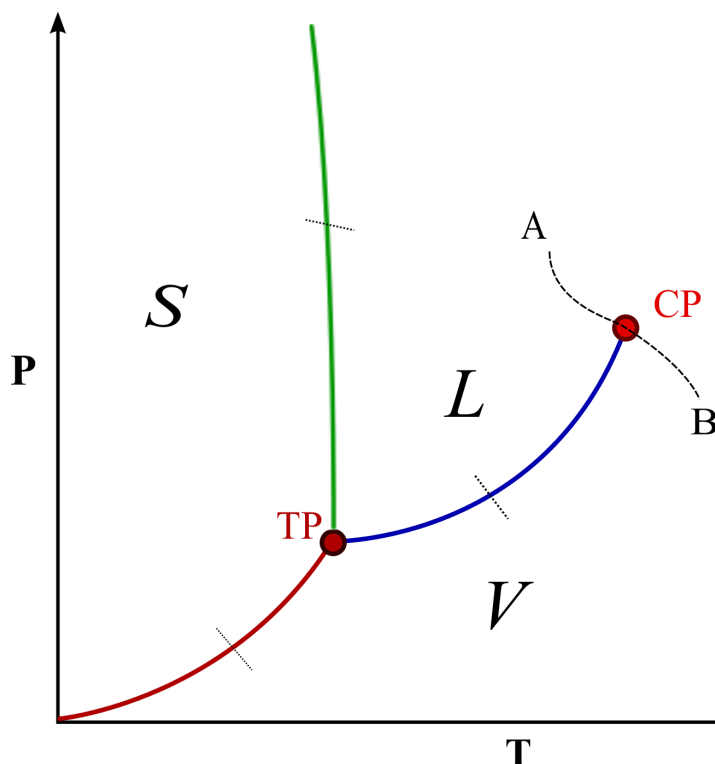
$$\chi = \beta [\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2] \quad (1.12)$$

Ακολουθεί εισαγωγική περιγραφή του πεδίου των κρίσιμων φαινομένων, περιγράφονται οι φάσεις της ύλης, οι αλλαγές φάσης και τα κρίσιμα σημεία τα οποία αποτελούν το αντικείμενο μελέτης των κρίσιμων φαινομένων.

Η φάση στην οποία βρίσκεται ένα σύστημα καθορίζεται από την ομάδα συμμετρίας¹ στην οποία υπόκεινται οι μικροκαταστάσεις του.

¹ομάδα συμμετρίας είναι το σύνολο των μετασχηματισμών στους οποίους το σύστημα παραμένει αμετάβλητο

Διαφορετικές φάσεις δηλαδή χαρακτηρίζονται από διαφορετική ομάδα συμμετρίας. Για συγκεκριμένες μακροσκοπικές συνθήκες, δύο ή περισσότερες φάσεις μπορούν να συνυπάρχουν στην ίδια κατάσταση σε κατάσταση ισορροπίας. Ας πάρουμε για παράδειγμα το νερό το οποίο αποτελεί το παλαιότερο αντικείμενο μελέτης της θερμοδυναμικής και του οποίου το διάγραμμα φάσης παρατίθεται στο σχήμα 1.1. Το νερό μπορεί να βρίσκεται ταυτόχρονα στην υγρή και αέρια του φάση σε συγκεκριμένα ζεύγη πίεσης και θερμοκρασίας (P, T) .



Σχήμα 1.1: Διάγραμμα φάσης του νερού. Οι συνεχείς γραμμές διαχωρίζουν τις τρεις φάσεις: στερεή (S), υγρή (L) και αέρια (V). Στο κρίσιμο σημείο CP κάθε μετάβαση ($A - B$) είναι συνεχής (δεύτερης τάξης) ενώ οποιαδήποτε άλλη μετάβαση είναι ασυνεχής (στικτές γραμμές).

Πάνω στις συνεχείς γραμμές, οι οποίες καλούνται γραμμές μετάβασης, συνυπάρχουν οι δύο φάσεις που βρίσκονται εκατέρωθεν, σε ομογενή μέρη, τα οποία καταλαμβάνουν συγκεκριμένο όγκο και βρίσκονται σε επαφή. Κάθε τέμνουσα σε μια από αυτές τις γραμμές αντιστοιχεί σε μια μετάβαση φάσης. Οι μεταβάσεις αυτές καλούνται πρώτης τάξης και χαρακτηρίζονται μεταξύ άλλων από ασυνέχεια, σε μία ή και περισσότερες πρώτες παραγώγους της ελεύθερης ενέργειας με ταυτόχρονη ύπαρξη

λανθάνουσας θερμότητας καθώς και διπλή κορυφή στην κατανομή της ενέργειας. Το σημείο στο οποίο σταματάει μια γραμμή μετάβασης λέγεται κρίσιμο σημείο. Το κρίσιμο σημείο υγρού - αερίου φαίνεται στο διάγραμμα φάσης του νερού CP στο σχήμα 1.1. Οι υπόλοιπες γραμμές μετάβασης του νερού δεν έχει βρεθεί να καταλήγουν σε αντίστοιχα κρίσιμα σημεία.

Στο κρίσιμο σημείο οι δύο φάσεις δεν είναι διακριτές, το υλικό δηλαδή είναι ομοιογενές, μοιάζει να βρίσκεται σε μια κατάσταση η οποία να είναι υπέρθεση των δύο φάσεων. Στην ουσία οι δύο φάσεις είναι "συνυφασμένες" η μία στην άλλη σε όλες κλίμακες. Πρέπει εδώ να σημειωθεί ότι η συμμετρία αφορά στην κατανομή των μικροκαταστάσεων και έτσι μπορεί να υπάρχει σε τμήμα του συστήματος. Το σύστημα (ή τμήμα του) καλείται διατεταγμένο όταν του λείπει η συμμετρία την οποία έχει η άλλη φάση.

Έτσι μπορούμε να ορίσουμε κατάλληλη εντατική ποσότητα η οποία καλείται **παράμετρος τάξης** και αντιστοιχεί στο ποσοστό του συστήματος το οποίο είναι διατεταγμένο. Η μετάβαση δηλαδή γίνεται από μια διατεταγμένη φάση στην οποία η παράμετρος τάξης είναι πεπερασμένη σε μια αδιάτακτη φάση με παράμετρο τάξης μηδέν με συνεχή τρόπο. Πάνω στο κρίσιμο σημείο η παράμετρος τάξης είναι επίσης 0. Το παραπάνω αποτελεί επιπλέον διαφορά των μεταβάσεων πρώτης και δεύτερης τάξης αφού στην πρώτη τάξης η παράμετρος τάξης είναι μη μηδενική.

Χαρακτηριστικό δείγμα συνεχούς μετάβασης είναι η σιδηρομαγνητική - παραμαγνητική μετάβαση στα μαγνητικά υλικά την οποία μοντελοποιεί το πρότυπο Ising, που αποτελεί τον ακρογωνιαίο λίθο στην μελέτη των κρίσιμων φαινομένων.

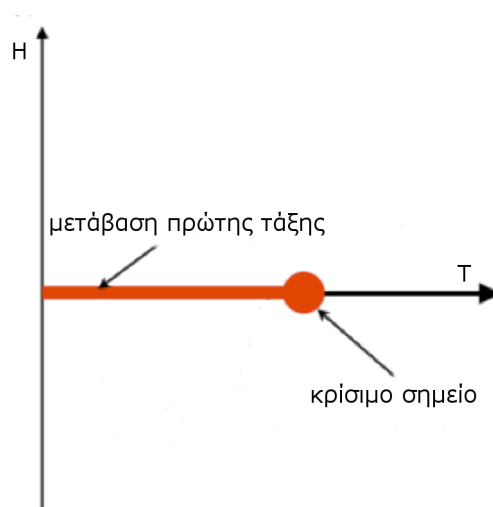
Η Χαμιλτονιανή του προτύπου Ising είναι:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i \quad (1.13)$$

Το μοντέλο αποτελείται από πλέγμα N σπιν τα οποία παίρνουν τιμές $S_i \in \{-1, 1\}$. Η σταθερά της αλληλεπίδρασης ανταλλαγής ($J > 0$) αφορά μόνο τους πρώτους γείτονες $\langle ij \rangle$ και H είναι η ισχύς του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου που εφαρμόζεται.

Σαν παράμετρος τάξης της μετάβασης επιλέγεται η μαγνήτιση M , που ορίζεται με τη βοήθεια του θερμικού μέσου ($\langle \dots \rangle$) της μαγνητικής ροπής ως:

$$M = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i^N S_i \right\rangle \quad (1.14)$$



Σχήμα 1.2: Διάγραμμα φάσης σιδηρομαγνητικής μετάβασης όπου το κρίσιμο σημείο αντιστοιχεί στην θερμοκρασία Curie T_c κάτω από την οποία το υλικό αποκτά αυθόρμητη μαγνήτιση.

Απουσία εξωτερικού πεδίου, όταν το υλικό πέσει κάτω από μια θερμοκρασία T_c (θερμοκρασία Curie) αποκτά αυθόρμητη μαγνήτιση M . Κοντά στο κρίσιμο σημείο μικρές θερμικές διακυμάνσεις αναγκάζουν το σύστημα να "διαλέξει" ανάμεσα στην πάνω και κάτω κατάσταση, ενώ δηλαδή στην παραμαγνητική φάση υπάρχει πάνω-κάτω συμμετρία αυτή κάτω από την T_c παύει να υφίσταται. Το φαινόμενο καλείται ρήξη συμμετρίας (symmetry breaking) και είναι συνυφασμένο με την συμμετρία της θεμελιώδους κατάστασης.

Τα κρίσιμα φαινόμενα έχουν σαν αντικείμενο την μελέτη της συμπεριφοράς των συστημάτων όταν αυτά προσεγγίζουν το κρίσιμο σημείο. Τα κύρια εργαλεία που αναπτύχθηκαν για την προσέγγιση των κρίσιμων φαινομένων είναι η κλιμάκωση, η οικουμενικότητα και η επανακανονικοποίηση οι κύριες αρχές των οποίων παρατίθενται στην συνέχεια.

1.2 Θεωρίες κρίσιμων φαινομένων

Στις αρχές του προηγούμενου αιώνα ο Weiss εισήγαγε την θεωρία μέσου πεδίου για την ερμηνεία του σιδηρομαγνητισμού κατά την οποία οι ατομικές αλληλεπιδράσεις αντιπροσωπεύονται από την τιμή του ενός ισοδύναμου μαγνητικού πεδίου H' που καλείται μοριακό πεδίο ή πεδίο Weiss. Οπότε το πεδίο που "βλέπει" ένα σπιν γίνεται $H_{eff} = H + H'$ και το πεδίο Weiss είναι ανάλογο της μαγνήτισης $H' \propto M$. Μια τέτοια προσέγγιση θέτει ως προϋπόθεση ότι οι διακυμάνσεις της μαγνήτισης φθίνουν.

Αυτή η προσέγγιση της μαγνητικής συμπεριφοράς απαλείφει τον όρο της αλληλεπίδρασης καθιστώντας το πρόβλημα πολύ πιο βατό.

Τα μοντέλα μέσου πεδίου προβλέπουν ότι τόσο το M^2 όσο και το αντίστροφο της επιδεκτικότητας χ^{-1} προσεγγίζουν γραμμικά το μηδέν και ότι η θερμοχωρητικότητα C_H δεν αποκλίνει όταν $T \rightarrow T_c$, κάτι που θα διαπιστώσουμε στην συνέχεια ότι δεν ισχύει. Στην πραγματικότητα η αποτυχία της θεωρίας μέσου πεδίου είναι κυρίως ποιοτική αφού αδυνατεί να προσεγγίσει την κρίσιμη συμπεριφορά όπως αυτή εκφράζεται με τους κρίσιμους εκθέτες όπως επίσης δεν μπορεί να εντοπίσει την T_c καλύτερα από 40% [166]. Η αποτυχία της θεωρίας μέσου πεδίου αλλά και η γενικά επικρατούσα άποψη ότι μόνο ένας πολύ μικρός αριθμός μοντέλων μπορούν να επιλυθούν σε κλειστή μορφή (το μοντέλο Ising έχει λυθεί μόνο για $d=1,2$ ενώ στις τρεις διαστάσεις ελάχιστα πολύ ειδικά μοντέλα όπως το $n \rightarrow \infty$ του n -vector ή το Sherington Kirkpatrick μοντέλο σπιν) έχουν αναγκάσει στην ανάπτυξη πληθώρας τεχνικών και θεωριών κυρίως φαινομενολογικών τα τελευταία χρόνια που, σε συνδυασμό με τις εκτενείς προσομοιώσεις, μας έχουν οδηγήσει στην αποσαφήνιση πολλών ανοιχτών ερωτημάτων.

Η κλιμάκωση αφορά στη συμπεριφορά του συστήματος κοντά στο T_c , έχει ξεκινήσει από φαινομενολογικά επιχειρήματα και έχει αιτιολογηθεί από την θεωρία επανακανονικοποίησης.

1.2.1 Κλιμάκωση

Η κλιμάκωση (scaling) σαν θεωρία αναπτύχθηκε ώστε να προσεγγιστεί το κρίσιμο σημείο δεδομένου ότι εκεί η ελεύθερη ενέργεια είναι μη αναλυτική. Εδώ θα εκφράσουμε την συνάρτηση της ελεύθερης ενέργειας ως προς την θερμοκρασία (T) και το εφαρμοζόμενο πεδίο (H) περιγράφοντας την σιδηρομαγνητική μετάβαση (σχ. 1.2) χωρίς άρση γενικότητας.

Η βασική υπόθεση της θεωρίας κλιμάκωσης (υπόθεση Widom) είναι

ότι το μη αναλυτικό μέρος της ελεύθερης ενέργειας $\mathcal{F}(H, T)$ είναι γενικευμένη ομογενής συνάρτηση κοντά στην περιοχή του κρίσιμου σημείου ($H \rightarrow H_c, T \rightarrow T_c$).

Μια γενικευμένη ομογενής συνάρτηση (generalized homogeneous function - GHF) $f(x, y)$ ικανοποιεί τη σχέση:

$$f(\lambda^a x, \lambda^b y) = \lambda f(x, y) \quad (1.15)$$

Μια σημαντική ιδιότητα των ομογενών συναρτήσεων είναι ότι η γνώση της τιμής τους σε ένα σημείο (x_0) οδηγεί στην εξαγωγή της τιμής για όλα τα $x = \lambda x_0$. Έτσι η συνήθης πρακτική είναι η προσέγγιση του κρίσιμου σημείου με δεδομένη είτε την κρίσιμη θερμοκρασία ή το κρίσιμο πεδίο.

Στο σημείο αυτό εισάγεται ο όρος της ανηγμένης κρίσιμης θερμοκρασίας

$$t = \frac{T - T_c}{T_c} \quad (1.16)$$

Από την υπόθεση Widom για την ελεύθερη ενέργεια:

$$\mathcal{F}(\lambda^r t, \lambda^p H) = \lambda \mathcal{F}(t, H) \quad (1.17)$$

έχουμε τώρα τη δυνατότητα παραγωγίζοντας κατάλληλα να εξάγουμε τους κρίσιμους εκθέτες των υπολοίπων θερμοδυναμικών ποσοτήτων.

Ως παράδειγμα αναφέρεται η μαγνήτιση η οποία ως γνωστόν δίνεται από την εξ. (1.10), η μερική παράγωγος της (1.17) ως προς H δίνει

$$\lambda^p M(\lambda^r t, \lambda^p H) = \lambda M(t, H) \quad (1.18)$$

Περιορίζουμε στη συνέχεια την κρίσιμη συμπεριφορά στην ειδική περίπτωση²: $t \rightarrow 0, H = 0$

Η (1.18) γίνεται $M(t, 0) = \lambda^{p-1} M(\lambda^r t, 0)$ η οποία ισχύει για όλα τα λ οπότε θέτοντας $\lambda = -\left(\frac{1}{t}\right)^{1/r}$ παίρνουμε $M(t, 0) = -t^{\frac{1-p}{r}} M(-1, 0)$ την οποία ξαναγράφουμε για $t \rightarrow 0^-$

$$M(t, 0) \sim -t^\beta \quad (1.19)$$

Ο εκθέτης β είναι ο κρίσιμος εκθέτης μαγνήτισης για τη μετάβαση $t \rightarrow 0, H = 0$ και ορίζεται από τους εκθέτες της ελεύθερης ενέργειας ως:

$$\beta = \frac{1-p}{r} \quad (1.20)$$

²Υπάρχουν δύο τρόποι να προσεγγιστεί το $t \rightarrow 0$, για $t < 0$ και $t > 0$. Για τα μεγέθη στα οποία ορίζονται και στις δύο περιοχές οι αντίστοιχοι δύο κρίσιμοι εκθέτες, αποδεικνύεται ότι ταυτίζονται στο $t = 0$

Αν τώρα προσεγγίσουμε το κρίσιμο σημείο ακολουθώντας την κάθετη στην προηγούμενη διαδρομή: $t = 0, H \rightarrow 0$. αντίστοιχα ορίζεται ο κρίσιμος εκθέτης δ

$$M(0, H) \sim H^{1/\delta} \quad (1.21)$$

με

$$\delta = \frac{p}{1-p} \quad (1.22)$$

Η ανάλογη διαδικασία κατάλληλης παραγωγίσιμης της (1.17) προσεγγίζοντας το κρίσιμο σημείο με $t \rightarrow 0, H = 0$ δίνει τους αντίστοιχους κρίσιμους εκθέτες της θεμοχωρητικότητας C και ισόθερμης μαγνητικής επιδεκτικότητας χ .

$$\begin{aligned} C(t, 0) &\sim t^{-\alpha} \\ \chi(t, 0) &\sim -t^{-\gamma} \end{aligned} \quad (1.23)$$

με

$$\alpha = -\frac{1-2r}{r} \quad (1.24)$$

και

$$\gamma = -\frac{1-2p}{r} \quad (1.25)$$

Είναι εμφανές ότι μπορούμε απαλείφοντας τους εκθέτες p, r από οποιοσδήποτε τρεις από τις (1.20), (1.22), (1.24) και (1.25) να πάρουμε τις αντίστοιχες σχέσεις μεταξύ των κρίσιμων εκθετών ($\alpha, \beta, \gamma, \delta$) οι οποίες καλούνται **νόμοι κλιμάκωσης**. Οι πιο γνωστοί είναι:

- Η ισότητα Rushbrooke:

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad (1.26)$$

- η ισότητα Griffiths:

$$\alpha + \beta(\delta + 1) = 2 \quad (1.27)$$

- και η ισότητα Widom:

$$\gamma = \beta(\delta - 1) \quad (1.28)$$

Καταστατική εξίσωση μαγνήτισης και συνάρτηση κλιμάκωσης

Η καταστατική εξίσωση της μαγνήτισης είναι η σχέση μεταξύ της μαγνήτισης M , θερμοκρασίας T και εξωτερικού πεδίου H και αποτελεί το δεύτερο σημαντικό εύρημα της θεωρίας κλιμάκωσης. Είναι επίσης χρήσιμη για την περιγραφή της έννοιας της Οικουμενικότητας.

Με κατάλληλη αντικατάσταση της αυθαίρετης μεταβλητής $\lambda = H^{-1/p}$ στην (1.18) παίρνουμε την

$$M_H = M(t_H, 1) = \mathcal{F}^{(1)}(t_H) \quad (1.29)$$

όπου

$$M_H = \frac{M}{H^{(1-p)/p}} \quad (1.30)$$

και

$$t_H = \frac{t}{H^{r/p}} \quad (1.31)$$

είναι οι νέες κλίμακες της μαγνήτισης και θερμοκρασίας αντίστοιχα.

Η συνάρτηση $\mathcal{F}^{(1)}(x) = M(x, 1)$ της (1.29) καλείται **συνάρτηση κλιμάκωσης**.

Δηλαδή επανασχεδιάζοντας τις καμπύλες $M(H, t)$, με καινούργιους άξονες τους ανηγμένους (1.30) και (1.31) γίνεται συσσώρευση των δεδομένων (data-collapse) της μαγνήτισης σε μια καμπύλη που θυμίζει τον νόμο των αντιστοιχών καταστάσεων van der Waals.

1.2.2 Οικουμενικότητα και Επανακανονικοποίηση

Στη συνέχεια περιγράφεται η οικουμενικότητα, η οποία αναφέρεται στο φαινόμενο κατά το οποίο συστήματα με πολύ διαφορετική δυναμική παρουσιάζουν σχεδόν ταυτόσημη κρίσιμη συμπεριφορά, φαινόμενο εντελώς αναπάντεχο όταν πρωτοδιαπιστώθηκε. Προχωρούμε στην παράθεση των βασικών αρχών της θεωρίας της επανακανονικοποίησης, η οποία εξήγησε επιτυχώς την οικουμενικότητα και αποτελεί σήμερα τον ακρογωνιαίο λίθο της μεθοδολογίας στην έρευνα κρίσιμων φαινομένων.

Οικουμενικότητα

Σαν κρίσιμη συμπεριφορά καλούμε τους κρίσιμους εκθέτες και τις συναρτήσεις κλιμάκωσης. Η μελέτη ενός κρίσιμου φαινομένου έγκειται στην εξακρίβωση του κρίσιμου σημείου και της κρίσιμης συμπεριφοράς. Συστήματα με κοινούς κρίσιμους εκθέτες και συναρτήσεις κλιμάκωσης ανήκουν στην ίδια **κλάση οικουμενικότητας**. Από την ταξινόμηση αυτή προέκυψε το ερώτημα, ποιοι μικροσκοπικοί παράγοντες καθορίζουν την

κρίσιμη συμπεριφορά και ποιοι όχι. Το φαινόμενο της οικουμενικότητας έκανε δυνατή την αναγωγή πολύπλοκων μικροσκοπικά δομών σε πολύ απλούστερα μοντέλα, όπως για παράδειγμα το μοντέλο Ising, Heisenberg κ.α.

Μήκος συσχέτισης

Το μήκος συσχέτισης είναι κομβική έννοια για την περιγραφή των μεταβάσεων φάσης καθώς η κλιμάκωσή του οδηγεί ομαλά στην εισαγωγή της μεθόδου επανακανονικοποίησης.

Ας ορίσουμε το μήκος συσχέτισης στο μοντέλο Ising. Αρχικά η συνάρτηση συσχέτισης δύο σπιν S_i, S_j που απέχουν απόσταση r είναι:

$$\mathcal{G}_c(r) = \langle S(0)S(r) \rangle - \langle S(0) \rangle^2 \quad (1.32)$$

η $\mathcal{G}_c(r)$ για $t < 0$ τείνει στο 0

$$\mathcal{G}_c(r) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}} \exp(-r/\xi) \quad (1.33)$$

όπου το ξ καλείται μήκος συσχέτισης.

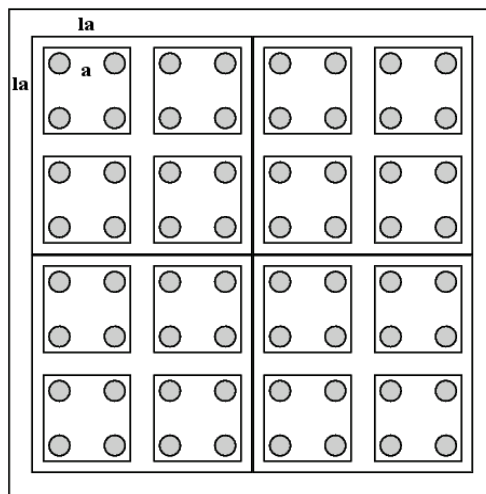
Η συνολική δηλαδή συμπεριφορά της συνάρτησης συσχέτισης αποτελείται από τον εκθετικό όρο και τον νόμο δύναμης. Μακριά από το κρίσιμο σημείο ο εκθετικός όρος επικρατεί και η συσχέτιση φθίνει πολύ γρήγορα με την απόσταση. Όσο πλησιάζουμε όμως το κρίσιμο σημείο, το ξ αποκλίνει σαν $\xi \sim t^{-\nu}$ μέχρι που απειρίζεται και επικρατεί ο νόμος δύναμης.

1.2.3 Επανακανονικοποίηση

Η διαδικασία της επανακανονικοποίησης έχει σαν στόχο την δραστηκή μείωση των παραμέτρων ενός στατιστικού συστήματος. Ξεκινώντας δηλαδή από ελεύθερες μεταβλητές της τάξης του αριθμού του Αβοκάντρο μέσω της διαδικασίας αδρομερούς μετασχηματισμού (coarse graining), επιτυγχάνει να περιγράψει το σύστημα με έναν πολύ μικρό αριθμό μεταβλητών. Με σκοπό την ανάδειξη της μεθόδου περιγράφεται η διαδικασία μετασχηματισμού επανακανονικοποίησης ομάδας (RGT) του μοντέλου Ising [121].

Έστω για παράδειγμα, χωρίς άρση της γενικότητας, το τετραγωνικό μοντέλο Ising σχήμα 1.3. Η διαδικασία ενός μετασχηματισμού επανακανονικοποίησης ομάδας (Renormalization Group Transformation - RGT) αποτελείται από δύο στάδια, τα οποία είναι:

- Ο αδρομερής μετασχηματισμός κατά τον οποίο αυξάνουμε την σταθερά πλέγματος $a' \rightarrow la$. Στη συνέχεια υπολογίζεται το συλλογικό σπιν S' σαν συνάρτηση των σπιν S που περιέχει η a' . Η διαδικασία έχει σαν αποτέλεσμα την δημιουργία n κυψελών $n = N/l^d$ (d είναι η διάσταση του πλέγματος). Έτσι μειώνονται οι ελεύθερες



Σχήμα 1.3

μεταβλητές δηλαδή ο αριθμός των σπιν από N σε N' .

- Επιβάλλοντας το αναλλοίωτο της συνάρτησης επιμερισμού κάτω από τον καινούργιο μετασχηματισμό, δηλαδή: $Z' = Z$ υπολογίζεται ο κατάλληλος μετασχηματισμός R_b της αλληλεπίδρασης ανταλλαγής $J' = R_b J$ και άρα η καινούργια Χαμιλτονιανή: $H' = R_b H$

Η διαδικασία είναι επαναληπτική και το σημείο στο οποίο καταλήγει καλείται **σταθερό σημείο** (fixed point), όταν δηλαδή ισχύει:

$$J' = J \equiv J^* \quad (1.34)$$

Στην περίπτωση της σιδηρομαγνητικής-παραμαγνητικής μετάβασης υπάρχουν τρία σταθερά σημεία, τα τετριμμένα για $t \rightarrow -\infty; t \rightarrow \infty$ και το κρίσιμο σημείο $|t| \rightarrow 0$. Τα σταθερά σημεία μπορεί να έλκουν, να απωθούν ή και να είναι μεικτά, ανάλογα τις συνθήκες με τις οποίες ξεκινάμε την RGT. Η ύπαρξη των σταθερών σημείων εξηγεί το φαινόμενο της οικουμενικότητας και κατά συνέπεια την ικανότητα πολύ βασικών και καθαρών συστημάτων όπως το Ising να περιγράφουν με ακρίβεια την κρίσιμη συμπεριφορά φυσικών υλικών.

Για τον υπολογισμό των κρίσιμων εκθετών ορίζεται η ανηγμένη ελεύθερη ενέργεια:

$$\bar{\mathcal{F}} = \beta\mathcal{F} \quad (1.35)$$

η οποία είναι και αυτή αναλλοίωτη και κατόπιν η κατ' όγκο ανηγμένη ελεύθερη ενέργεια \bar{f} .

Κοντά στο κρίσιμο σημείο

$$\bar{f}(t, \bar{H}) \sim l^{-d} \bar{f}(l^{y_1} t, l^{y_2} \bar{H}) \quad (1.36)$$

με $\bar{H} = \beta H$ το ανηγμένο πεδίο. Τα t, \bar{H} στην γλώσσα της επανακανονικοποίησης λέγονται πεδία κλιμάκωσης (scaling fields), και οι εκθέτες y_i κρίσιμοι δείκτες (critical indices). Επάγεται ότι

$$\alpha = 2 - d/y_1 \quad (1.37)$$

με

$$y_1 = 1/\nu \quad (1.38)$$

όπου ν είναι ο κρίσιμος εκθέτης του μήκους συσχέτισης:

$$\xi \sim |t|^{-\nu} \quad (1.39)$$

και άρα από τις σχέσεις (1.37) και (1.38) προκύπτει η σχέση υπερκλιμάκωσης:

$$\alpha = 2 - d\nu \quad (1.40)$$

Αναδεικνύεται έτσι ο καθοριστικός ρόλος του εκθέτη του μήκους συσχέτισης ν καθώς και της διάστασης d του συστήματος στον προσδιορισμό της κλάσης οικουμενικότητας.

Συνοπτικά η συνεισφορά της θεωρίας ομάδας επανακανονικοποίησης έγκειται στα εξής:

- Προσέφερε τη βάση για την κατανόηση της κλιμάκωσης και της οικουμενικότητας.
- Έδωσε καινούργια υπολογιστικά εργαλεία για την προσέγγιση των κρίσιμων εκθετών.
- Ανέδειξε τον αναπάντεχο ρόλο της διάστασης d . Πιο συγκεκριμένα συνδέοντας τις στατιστικές διακυμάνσεις με την d , ορίζονται δύο οριακές διαστάσεις d_- και d_+ . Για $d < d_-$ το σύστημα δεν μπορεί να συντηρήσει τάξη για $T > 0$ ενώ για $d < d_+$ οι θεωρίες μέσου πεδίου δεν είναι εφαρμόσιμες. Έτσι οι υπολογιστικές προσομοιώσεις, καθίστανται το κυριότερο εργαλείο στην μελέτη συστημάτων για $d \leq d_+$

1.2.4 Κλιμάκωση πεπερασμένου μεγέθους

Η προσέγγιση του θερμοδυναμικού ορίου μέσω προσομοιώσεων συστημάτων πεπερασμένου μεγέθους, έγινε δυνατή μέσω των εργαλείων που προσέφερε η επανακανονικοποίηση. Έτσι μπορούμε να προσδιορίσουμε τους κρίσιμους εκθέτες μέσω της παρακολούθησης της συμπεριφοράς των θερμοδυναμικών ποσοτήτων κατά την μεταβολή του μεγέθους του συστήματος. Η διαδικασία λέγεται κλιμάκωση πεπερασμένου μεγέθους (finite size scaling - FSS) και αποτελεί αναπόσπαστο κομμάτι της ερμηνείας των αποτελεσμάτων της διαδικασίας προσομοίωσης.

Ξεκινώντας από την RGT σχέση (1.36) για την ελεύθερη ενέργεια και προσθέτοντας το γραμμικό μήκος του συστήματος L σαν μεταβλητή παίρνουμε:

$$\mathcal{F}(t, H, L^{-1}) = l^{-d} \bar{f}(l^{1/\nu} t, l^{y_h} H, l/L) \quad (1.41)$$

η οποία γίνεται ανεξάρτητη του μεγέθους L στο θερμοδυναμικό όριο $L \rightarrow \infty$. Θέτοντας τώρα $l = L$ παίρνουμε την συνάρτηση κλιμάκωσης της ελεύθερης ενέργειας:

$$\mathcal{F}(t, H, L^{-1}) = L^{-d} \bar{f}(L^{1/\nu} t, L^{y_h} H, 1) \equiv L^{-d} \tilde{\mathcal{F}}(L^{1/\nu} t, L^{y_h} H) \quad (1.42)$$

Από την συνάρτηση κλιμάκωσης της ελεύθερης ενέργειας $\tilde{\mathcal{F}}(t_L)$ όπου θέσαμε³

$$t_L = L^{1/\nu} t \quad (1.43)$$

προκύπτουν οι αντίστοιχες συναρτήσεις κλιμάκωσης της Μαγνήτισης \tilde{M} , επιδεκτικότητας $\tilde{\chi}$ και θερμοχωρητικότητας \tilde{C} [96]:

$$M_L = L^{-\beta/\nu} \tilde{M}(t_L) \quad (1.44)$$

$$\chi_L = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(t_L) \quad (1.45)$$

και

$$C_L = L^{\alpha/\nu} \tilde{C}(t_L) \quad (1.46)$$

Οι συναρτήσεις \tilde{M} , $\tilde{\chi}$ και \tilde{C} ενώ είναι ανεξάρτητες του L για μικρά μεγέθη, μακριά από την κρίσιμη θερμοκρασία ενδέχεται να χρειάζεται η προσθήκη διορθωτικού παράγοντα της μορφής $(1 + cL^{-\omega} + \dots)$ [1, 47].

³Υπενθυμίζεται ότι $t = \frac{T-T_c}{T_c}$

Ψευδοκρίσιμα σημεία

Οι κορυφές των $\{C_L; T\}$ και $\{\chi_L; T\}$ έχουν ιδιαίτερη σημασία καθώς στα σημεία αυτά δεν υπάρχει εξάρτηση από τις συναρτήσεις κλιμάκωσης, αφού η παράγωγος των $\tilde{C}, \tilde{\chi}$ ως προς t_L μηδενίζεται. Τα σημεία καλούνται ψευδοκρίσιμα $\{C_L^*, T_L^*\}$ και $\{\chi_L^*, T_L^*\}$. Στα ψευδοκρίσιμα σημεία η ψευδοκρίσιμη ειδική θερμοότητα κλιμακώνεται ως

$$C_L^* \sim L^{\alpha/\nu} \quad (1.47)$$

και η αντίστοιχη κλιμάκωση των ψευδοκρίσιμων για την επιδεκτικότητα είναι

$$\chi_L^* \sim L^{\gamma/\nu}. \quad (1.48)$$

Από τον ορισμό του $t_L^* = \frac{T_L^* - T_c}{T_c} L^{1/\nu}$ προκύπτει ότι οι ψευδοκρίσιμες θερμοκρασίες ακολουθούν τον παρακάτω νόμο κλιμάκωσης:

$$T_L^* = T_c + bL^{-1/\nu} \quad (1.49)$$

με $b = t_L^* T_c$. Δίνεται η δυνατότητα να εκτιμήσουμε την T_c και τον εκθέτη ν από τον παραπάνω νόμο κλιμάκωσης χρησιμοποιώντας όλες τις ψευδοκρίσιμες των ποσοτήτων που μετρήθηκαν κάνοντας ταυτόχρονη προσαρμογή, κάτι που χρησιμοποιήθηκε εκτεταμένα στην παρούσα διατριβή.

Ένας εναλλακτικός τρόπος για την εκτίμηση του κρίσιμου εκθέτη ν έδωσαν οι Ferrenberg και Landau [47] μέσω των παραγώγων του λογαρίθμου διαφόρων ροπών της παραμέτρου τάξης:

$$\frac{\partial \ln \langle M^n \rangle}{\partial K} = \frac{\langle M^n \mathcal{H} \rangle}{\langle M^n \rangle} - \langle \mathcal{H} \rangle, \quad (1.50)$$

Όπου \mathcal{H} είναι η ενέργεια του συστήματος και η αντίστροφη θερμοκρασία ορίζεται⁴ $K = J/(k_B T)$.

Για τις παραπάνω ποσότητες ορίζονται ψευδοκρίσιμες τιμές στα μέγιστα τους τα οποία κλιμακώνονται ως

$$\left(\frac{\partial \ln \langle M^n \rangle}{\partial K} \right)^* \sim L^{1/\nu} \quad (1.51)$$

Σύμφωνα με την ίδια μελέτη [47] η κλιμάκωση των μεγίστων της παραγώγου του απολύτου της παραμέτρου τάξης:

$$\frac{\partial \langle |M| \rangle}{\partial K} = \langle |M| H \rangle - \langle |M| \rangle \langle H \rangle \quad (1.52)$$

⁴Στην παρούσα διατριβή ακολουθούμε την συνήθη σύμβαση $J = k_B = 1$

οδηγεί στην εκτίμηση των εκθετών β και ν μέσω του νόμου κλιμάκωσης των αντίστοιχων ψευδοκρίσιμων:

$$\left(\frac{\partial\langle|M|\rangle}{\partial K}\right)^* \sim L^{(1-\beta)/\nu} \quad (1.53)$$

Binder cumulant

Ιδιαίτερα χρήσιμη ποσότητα για τον προσδιορισμό της κρισιμότητας αποτελεί ο συσσωρευτής τέταρτης τάξης του Binder ή αλλιώς Binder cummulant, ο οποίος ορίζεται ως [18]:

$$U \equiv 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3\langle M^2 \rangle^2} \quad (1.54)$$

Ο Binder μελετώντας τη συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας της παραμέτρου τάξης έφτασε στο συμπέρασμα ότι ο συσσωρευτής έχει συνάρτηση κλιμάκωσης

$$U_L = \tilde{U}(t_L) \quad (1.55)$$

με συνέπεια στην κρίσιμη θερμοκρασία δηλαδή για $T = T_c$ η U_L να γίνεται σταθερή $U_L = \tilde{U}(0)$. Επίσης ο U_L δίνει την δυνατότητα να εντοπίσουμε εύκολα, με συσσώρευση δεδομένων, τον κρίσιμο εκθέτη ν , αφού δεν εξαρτάται από άλλον εκθέτη (όπως η C , χ ή M).

1.3 Πλεγματικά πρότυπα κρισιμότητας.

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζονται μια σειρά από μαγνητικά πλεγματικά μοντέλα σπιν η κρίσιμη συμπεριφορά των οποίων μελετάται ή αναφέρεται στην παρούσα διατριβή. Ξεκινώντας από τα καθαρά μοντέλα (pure models) στα οποία δεν υπάρχει αταξία προχωράμε στα μοντέλα με αταξία, παραθέτοντας τους βασικούς τύπους αταξίας και αναδεικνύοντας τις διαφορές τους.

Τα πρότυπα με αταξία προέκυψαν από την ανάγκη να μοντελοποιηθεί η συμπεριφορά μαγνητικών υλικών με ατέλειες. Η μελέτη συστημάτων με αταξία ανέδειξε νέες πτυχές στην κρίσιμη συμπεριφορά, αλλά και την επιρροή της εισαγωγής αταξίας στα καθαρά συστήματα, εμπλουτίζοντας τόσο θεωρητικά όσο και μεθοδολογικά το πεδίο των κρίσιμων φαινομένων.

1.3.1 Πρότυπα χωρίς αταξία

Στην συνέχεια παρουσιάζουμε μια επιλογή χαρακτηριστικών μαγνητικών προτύπων χωρίς αταξία παραθέτοντας τις βασικές τους ιδιότητες.

- Το πρότυπο Ising το οποίο πήρε το όνομα του από τον φυσικό Ernst Ising αποτελεί το θεμελιώδες μαθηματικό μοντέλο του σιδηρομαγνητισμού.

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - H \sum_{i=1}^N S_i \quad (1.56)$$

Το πρότυπο αυτό έχει δίτιμο σπιν με την έννοια ότι τα σπιν είναι πάνω ή κάτω και αλληλεπιδράσεις κοντινότερων γειτόνων. Για $d = 1$ το μοντέλο έχει λυθεί αναλυτικά από τον ίδιο τον Ising όπου απέδειξε ότι δεν υπάρχει μετάβαση φάσης ($\neq 0$). Το $d = 2$ μοντέλο έχει επιλυθεί από τον Onsager (1944) [137] με κρίσιμο σημείο $k_B T_c / J = \frac{2}{\ln(\sqrt{2}+1)} \simeq 2.26918531421$. Για $d \geq 3$ δεν υπάρχει μέχρι στιγμής αναλυτική λύση και για την ποσοτική τους μελέτη βασιζόμαστε κυρίως σε αριθμητικές προσομοιώσεις.

- Το μοντέλο Heisenberg ορίζεται από την χαμιλτονιανή του μοντέλου Ising (1.56). Το σπιν όμως είναι τρισδιάστατο διάνυσμα και μπορεί να θεωρηθεί σαν το κλασικό όριο του κβαντομηχανικού μοντέλου Heisenberg. Αντί για τον κβαντομηχανικό διακριτό προσανατολισμό $(2S + 1)$ έχουμε συνεχή προσανατολισμό δηλαδή το

S είναι κλασικό διάνυσμα. Το συγκεκριμένο μοντέλο είναι το πιο ρεαλιστικό κοντά στην κρίσιμη θερμοκρασία. Το μοντέλο δεν έχει λυθεί αναλυτικά, επομένως έχει μελετηθεί μόνο αριθμητικά.

- Το πρότυπο Potts q καταστάσεων. Το μοντέλο αποτελεί γενίκευση του μοντέλου Ising επιτρέποντας περισσότερες καταστάσεις. Η Χαμιλτονιανή του είναι:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \delta(S_i, S_j) \quad (1.57)$$

Η μεταβλητή σπιν παίρνει τιμές $S_i \in 1, \dots, q$. Δύο σπιν συνεισφέρουν στην Χαμιλτονιανή ενέργεια $-J$, όταν έχουν την ίδια τιμή σπιν. Το $q = 2$ πρότυπο αντιστοιχεί στο μοντέλο Ising. Για $d = 2; q > 4$ και $d \geq 3; q \geq 3$ το μοντέλο παρουσιάζει μετάβαση πρώτης τάξης. Κοντά όμως στις οριακές αυτές τιμές η μετάβαση είναι ασθενής και ο αριθμητικός καθορισμός της τάξης της παρουσιάζει σημαντική δυσκολία.

- Πρότυπο Blume Capel. Στην παρούσα διατριβή εξετάζεται το συγκεκριμένο πρότυπο στις δύο και τις τρεις διαστάσεις. Η Χαμιλτονιανή του είναι:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + \Delta \sum_i S_i^2 \quad (1.58)$$

όπου οι μεταβλητές σπιν S_i παίρνουν τιμές $-1, 0, +1$. Στην παρούσα διατριβή η άθροιση γίνεται στους πρώτους γείτονες και η αλληλεπίδραση ανταλλαγής είναι σιδηρομαγνητική ($J > 0$). Η παράμετρος Δ καλείται κρυσταλλικό πεδίο. Το διάγραμμα φάσης παρουσιάζει μεγάλο ενδιαφέρον αφού αποτελείται από ένα μέρος συνεχούς μετάβασης Ising για υψηλές θερμοκρασίες και μικρές τιμές του κρυσταλλικού πεδίου το οποίο καταλήγει σε ένα τρικρίσιμο σημείο όπου ενώνονται η μετάβαση δεύτερης τάξης με το κομμάτι μετάβασης πρώτης τάξης (Δ_t, T_t) και $(\Delta_0, T = 0)$ όπου $\Delta_0 = \frac{Jz}{2}$, με z τον αριθμό πρώτων γειτόνων του πλέγματος (coordination number).

1.3.2 Πρότυπα με αταξία

Στην συνέχεια γίνεται συνοπτική παράθεση μοντέλων αταξίας τα οποία αποτελούν το βασικό αντικείμενο της παρούσας διατριβής. Η αταξία μοντελοποιεί τις προσμίξεις στα υλικά. Στα υπό μελέτη μοντέλα

η αταξία είναι πακτωμένη (quenched disorder) δηλαδή είναι σταθερή και ορίζεται από την Χαμιλτονιανή. Ένα μοντέλο με αταξία προκύπτει από ένα καθαρό μοντέλο (pure model) στο οποίο μια σταθερά της Χαμιλτονιανής μετατρέπεται σε τυχαία μεταβλητή μέσω μιας διαδικασίας τυχαιοποίησης. Έτσι η αταξία του συστήματος αντιπροσωπεύεται από μια συλλογή τυχαίων διαμορφώσεων.

Η άθροιση στα συστήματα με αταξία γίνεται σε ένα σύνολο αρκετών δειγμάτων ή διαμορφώσεων αταξίας. Η μέση τιμή, Q τέτοιων δειγμάτων τυχειότητας, μιας ποσότητας a ορίζεται ως:

$$[a] = \frac{1}{Q} \sum_{i=1}^Q a_i \quad (1.59)$$

Συνεπώς αυξάνεται σημαντικά το αναγκαίο υπολογιστικό έργο, σε σχέση με τα καθαρά συστήματα, το οποίο χρειάζεται ώστε να αποκτήσουμε σαφή στατιστική εικόνα, αφού στην θερμοκρασιακή άθροιση, την οποία συμβολίζουμε $\langle a \rangle$, προστίθεται η δειγματική.

Κριτήριο Harris

Κομβικής σημασίας στην ανάλυση ενός στατιστικού μεγέθους A του συστήματος είναι η έννοια της αυτοαθροιστικότητας. Η αυτοαθροιστικότητα καθορίζεται από την συμπεριφορά της διακύμανσης της συνάρτησης πιθανότητας $P(A)$ του μεγέθους A . Έτσι για την κατανομή με μέση τιμή $[A]$ λέμε ότι αυτοαθροιστικότητα έχει ένα σύστημα όταν η ποσότητα, $R_A = \frac{[A^2] - [A]^2}{[A]^2}$ φθίνει $R_A \rightarrow 0$ με το μέγεθος $L \rightarrow \infty$ του συστήματος. Σε αντίθετη περίπτωση το σύστημα χαρακτηρίζεται από έλλειψη αυτοαθροιστικότητας.

Μακριά από την κρίσιμη θερμοκρασία το μικρό εύρος του μήκους συσχέτισης μαζί με το κεντρικό οριακό θεώρημα εξασφαλίζει την αυτοαθροιστικότητα. Κοντά όμως στο κρίσιμο σημείο λόγω της αταξίας δεν εξασφαλίζεται η αυτοαθροιστικότητα και σύμφωνα με το κριτήριο Harris [60] αν ο κρίσιμος εκθέτης της θερμοχωρητικότητας $\alpha < 0$ η αταξία είναι μη σχετική (irrelevant randomness) και το σύστημα παραμένει στην κλάση οικουμενικότητας του καθαρού συστήματος. Στην περίπτωση όμως που ο εκθέτης α είναι θετικός η τυχειότητα είναι σχετική (relevant) δηλαδή υπάρχει έλλειψη αυτοαθροιστικότητας με αποτέλεσμα η μετάβαση να έχει διαφορετικό σταθερό σημείο και άρα κρίσιμους εκθέτες. Κατ' αρχήν το κριτήριο Harris εκφράζεται ως

$$d\nu/2 \geq 1 \quad (1.60)$$

το οποίο ισοδυναμεί μέσω της σχέσης υπερκλιμάκωσης (1.40) σε $\alpha < 0$.

Η έλλειψη αυτοαθροιστικότητας καθιστά τις δειγματικές διακυμάνσεις κομβικής σημασίας για την κρίσιμη συμπεριφορά των συστημάτων με σχετική αταξία. Όπως έδειξαν οι Aharony και Harris [2] το εύρος της κατανομής των ψευδοκρίσιμων θερμοκρασιών μιας ποσότητας a κλιμακώνεται ως:

$$\delta(T_{[a]^*}) \sim L^{-1/\nu} \quad (1.61)$$

όπου ν είναι ο κρίσιμος εκθέτης του μήκους συσχέτισης του καινούργιου τυχαίου σταθερού σημείου. Τα ψευδοκρίσιμα σημεία των δειγματικών μέσων ποσοτήτων $\{[a]^*, T_{[a]^*}\}$ ακολουθούν δηλαδή αντίστοιχους κλασικούς νόμους κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους των συστημάτων χωρίς αταξία. Για παράδειγμα οι ψευδοκρίσιμες θερμοκρασίες κλιμακώνονται ως:

$$T_{[a]^*} = T_c + bL^{-1/\nu} \quad (1.62)$$

αντίστοιχα δηλαδή με την (1.49).

Ακολουθεί περιγραφή χαρακτηριστικών μοντέλων τυχαιότητας, με σκοπό την ανάδειξη των ιδιαιτεροτήτων και προβλημάτων στα οποία οδηγεί η μελέτη τους.

Τυχαίο Πρότυπο Ising

Το τυχαίο μοντέλο Ising (Random Ising Model - RIM) ή τυχαία αραιωμένο μοντέλο Ising (Randomly diluted Ising model) περιγράφεται από την παρακάτω χαμιλτονιανή.

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} \rho_{ij} J_{ij} p_i S_i p_j S_j \quad (1.63)$$

Το πρότυπο αποτελεί παραλλαγή του απλού Ising (1.56) με τυχαιότητα στις θέσεις ή στους δεσμούς. Επιβάλεται δηλαδή τυχαιότητα στην ύπαρξη ενός σπιν ή δεσμού. Στα συστήματα με αραιώση θέσεων η ύπαρξη ενός σπιν ακολουθεί δίτιμη κατανομή $P(p_i) = p\delta(1 - p_i) + (1 - p)\delta(p_i)$ και αντίστοιχα στα συστήματα με αραιώση δεσμών: $P(\rho_{ij}) = \rho\delta(1 - \rho_{ij}) + (1 - \rho)\delta(\rho_{ij})$. Όπου p και ρ είναι η πυκνότητα θέσεων και δεσμών αντίστοιχα.

Στην ίδια κατηγορία προτύπων αταξίας ανήκουν τα μοντέλα με τυχαιότητα στο μέτρο της αλληλεπίδρασης ανταλλαγής J . Στην παραλλαγή της τυχαιότητας αυτής, την οποία ακολουθήσαμε, οι αλληλεπιδράσεις είναι σιδηρομαγνητικές $J_{ij} > 0$, με την αντίστοιχη συνάρτηση πιθανότητας να ορίζεται από την παρακάτω δίτιμη κατανομή:

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{2} (\delta(J_{ij} - J_1) + \delta(J_{ij} - J_2)) \quad (1.64)$$

Η κλάση οικουμενικότητας του $d = 3$ τυχαίου μοντέλου Ising φαίνεται να περιέχει μια σειρά μοντέλων σπιν [19,73,86]. Το κυβικό μοντέλο Blume Capel τυχαίων δεσμών επίσης ανήκει στην ίδια κλάση [107] καθώς και η σιδηρομαγνητική παραμαγνητική μετάβαση του κυβικού υαλώδους μοντέλου Edwards-Anderson το οποίο παρουσιάζεται στο κεφάλαιο 4.

Πρότυπο Blume Capel τυχαίων δεσμών

Ακολουθεί η περιγραφή του μοντέλου Blume Capel $d = 2, 3$ με αταξία δεσμών όπως αυτό έχει μελετηθεί στην παρούσα διατριβή. Η Χαμιλτονιανή του μοντέλου είναι:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j + \Delta \sum_i S_i^2 \quad (1.65)$$

όπου η αλληλεπίδραση ανταλλαγής δίνεται από την δίτιμη κατανομή της (1.64):

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{2} (\delta(J_{ij} - J_1) + \delta(J_{ij} - J_2))$$

με $\frac{J_1 + J_2}{2} = 1$; $J_1 > J_2 > 0$. Οι αλληλεπιδράσεις δηλαδή παραμένουν σιδηρομαγνητικές αλλά μοιράζονται ισοπίθानα, με πιθανότητα $1/2$, σε ισχυρές (J_1) και ασθενείς (J_2). Ο λόγος $r = J_1/J_2$ αποτελεί το μέτρο τυχειότητας.

Όπως και στο απλό πρότυπο το διάγραμμα φάσης αποτελείται από σιδηρομαγνητική φάση και παραμαγνητική φάση. Στην παρούσα διατριβή μελετήθηκε η επίδραση της τυχειότητας στις μεταβάσεις φάσης πρώτης και δεύτερης τάξης του καθαρού μοντέλου. Βρέθηκε ότι η μετάβαση πρώτης τάξης μετατρέπεται σε δεύτερης τάξης και η πρώτην δεύτερης τάξης παρέμεινε δεύτερης και μελετήθηκε η κρίσιμη συμπεριφορά της. Η μελέτη μας έδειξε ότι οι δύο περιοχές της γραμμής μετάβασης, πρώην πρώτης και πρώην δεύτερης, δεν ανήκουν στην ίδια κλάση οικουμενικότητας. Υπάρχει δηλαδή παραβίαση της οικουμενικότητας αφού η ίδια συνεχής μετάβαση φάσης αναμένεται να έχει το ίδιο σταθερό σημείο σε όλο το μήκος της γραμμής του διαγράμματος φάσης. Λεπτομέρειες και περαιτέρω ανάλυση παρατίθενται στο κεφάλαιο 3.

Πρότυπο υάλων Ising σπιν

Ακολουθεί συνοπτική περιγραφή των προτύπων υάλων Ising σπιν (Ising spin glasses - ISG όπως και θα αναφέρονται εφεξής) παραθέτοντας τους βασικούς ορισμούς και ιδιότητες καθώς και τα σημεία ερευνη-

τικού ενδιαφέροντος τα οποία αυτά παρουσιάζουν. Πληρέστερη εικόνα δίνεται στο κεφάλαιο 4.

Η σημαντικότερη ιδιότητα των μοντέλων είναι η ύπαρξη της υαλώδους φάσης. Δηλαδή κάτω από την κρίσιμη θερμοκρασία, παρουσιάζουν συμπεριφορά όμοια των χημικών υαλωδών άμορφων υλικών όπως το γυαλί. Όταν το σύστημα βρίσκεται στην υαλώδη φάση παραβιάζεται η εργοδικότητα, αφού μέρος του υλικού παγώνει εμποδίζοντας το σύστημα να επισκεφτεί το σύνολο του χώρου των φάσεων. Ο χρόνος⁵ δηλαδή ο οποίος χρειάζεται για να απεγκλωβιστεί από το ελάχιστο είναι εκθετικός με το μέγεθος του συστήματος, πράγμα που καθιστά εκθετικό και τον χρόνο αποκατάστασης. Το φαινόμενο οφείλεται στην πολύ οξεία τραχύτητα της επιφάνειας της ελεύθερης ενέργειας στον φασικό χώρο. Λόγω αυτού, η μελέτη της υαλώδους φάσης παρουσιάζει την μεγαλύτερη δυσκολία στο πεδίο των κρίσιμων φαινομένων.

Η χαμιλτονιανή των *ISG* είναι παρόμοια με αυτή του Ising αλλά με τυχειότητα στις αλληλεπιδράσεις:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\{ij\}} J_{ij} S_i S_j - \sum_i H_i S_i \quad (1.66)$$

Οι μεταβλητές σπιν ως συνήθως είναι δίτιμες $S_i \in \{-1, 1\}$. Η τυχειότητα στις αλληλεπιδράσεις J_{ij} παράγεται τυπικά από Γκαουσιανή ή δίτιμη⁶ κατανομή, με αποτέλεσμα εκτός από σιδηρομαγνητικές να υπάρχουν και αντισιδηρομαγνητικές αλληλεπιδράσεις ($J_{ij} < 0$).

Τα *ISG* χωρίζονται σε δύο κατηγορίες

- Το μοντέλο Sherrington Kriekpatrick (*SK*) [160] ή άπειρης εμβέλειας (infinite range), κατά το οποίο όλα τα σημεία είναι συνδεδεμένα δηλαδή όλα τα σπιν του πλέγματος αλληλεπιδρούν μεταξύ τους και επιπλέον το πλήθος τους τείνει στο άπειρο. Το πρότυπο *SK* έλυσε ο Parisi το 1979 [144], η λύση του οποίου είχε σημαντικές επιπτώσεις στην φυσική των κρίσιμων φαινομένων, λόγω της εισαγωγής της έννοιας ρήξης συμμετρίας αντιγράφου (Replica Symmetry Breaking - *RSB*).
- Μικρής εμβέλειας όπως το τυπικό πρότυπο το οποίο πρότειναν οι Edwards-Anderson [43]⁷ όπου οι αλληλεπιδράσεις είναι μόνο

⁵Τόσο ο φυσικός όσο και ο υπολογιστικός χρόνος στην περίπτωση των προσομοιώσεων έχει την ίδια ιδιότητα

⁶Στην παρούσα διατριβή χρησιμοποιούνται δίτιμες κατανομές

⁷Στο παρόν μελετάται το μοντέλο *EA* δίτιμης κατανομής χωρίς την παρουσία εξωτερικού πεδίου

γειτονικές, με το σπιν S_i να ανήκει σε πλέγμα γραμμικού μεγέθους $L \rightarrow \infty$ και σταθερής d διάστασης τυπικά 2, 3. Κανένα μοντέλο EA δεν έχει λυθεί αναλυτικά και η μελέτη του μοντέλου βασίζεται σε υπολογιστικές προσομοιώσεις.

Παράμετρος τάξης της παραμαγνητικής - υαλώδους μετάβασης δεν μπορεί να είναι η μαγνήτιση όπως στην σιδηρομαγνητική - παραμαγνητική μετάβαση καθώς η μαγνήτιση παραμένει μηδενική και στις δύο φάσεις. Κατάλληλη επομένως παράμετρος τάξης αποτελεί η επικάλυψη (overlap) q :

$$q_{ab} = \frac{1}{N} \sum_{i=1, N} \langle S_i \rangle \langle T_i \rangle \quad (1.67)$$

όπου a, b είναι αντίγραφα μιας διαμόρφωσης J_{ij} με S_i, T_i τις σπιν μεταβλητές τους αντίστοιχα. Ο δειγματικός μέσος όρος στο σύνολο Q των διαμορφώσεων ορίζεται:

$$q = [q_{ab}] = \frac{1}{Q} \sum_{i=1, Q} q_{ab} \quad (1.68)$$

και ενώ είναι μηδέν στην παραμαγνητική φάση παίρνει μη μηδενική τιμή στην υαλώδη.

Οι τρεις χαρακτηριστικές ιδιότητες των ISG είναι η ρήξη της συμμετρίας αντιγράφου RSB , η σύγχυση (frustration) και η άρση της εργοδικότητας.

Ρήξη συμμετρίας αντιγράφου υπάρχει όταν η κατανομή $P_{q_{ab}} \neq \delta(q_{ab} - q_{aa})$, δηλαδή τα αντίγραφα βρίσκονται σε διαφορετικές καταστάσεις ισοροπίας. Για παράδειγμα στην παραμαγνητική φάση η επικάλυψη είναι $q_{ab} = 0$ και έτσι η κατανομή είναι συνάρτηση δέλτα, κάτι το οποίο δεν συμβαίνει στην υαλώδη φάση όπου το σύστημα μπορεί να βρεθεί σε διαφορετικό ελάχιστο της ελεύθερης ενέργειας.

Η σύγχυση αναφέρεται στην κατανομή της αλληλεπίδρασης $\mathbf{J} \equiv \{J_{11}, J_{12}, \dots, J_{NN}\}$ και συγκεκριμένα είναι ιδιότητα των κλειστών μονοπατιών ή κύκλων του \mathbf{J} . Ένας κύκλος $c \in \mathbf{J}$ είναι διάφωνος όταν:

$$\prod_{ij \in c} J_{ij} < 0 \quad (1.69)$$

Άμεσες επιπτώσεις της σύγχυσης είναι ότι στην θεμελιώδη κατάσταση ένα ποσοστό των αλληλεπιδράσεων δεν ικανοποιούνται δηλαδή $S_i S_j J_{ij} < 0$. Ο Barahona [8] απέδειξε ότι για $d > 2$ το πρόβλημα της εύρεσης θεμελιώδους κατάστασης ανήκει στην NP -hard κλάση πολυπλοκότητας.

Αποτέλεσμα του ορισμού των $NP - hard$ προβλημάτων είναι ότι ο χρόνος τόσο για την επίλυσή τους αυξάνεται εκθετικά με το μέγεθος του συστήματος N [37].

Στην παρούσα διατριβή (κεφάλαιο 4) μελετάται η εισαγωγή ανισοτροπίας στο τριών διαστάσεων πρότυπο EA όπου ερευνήθηκε τόσο η κρίσιμη συμπεριφορά όσο και οι ιδιότητες της θεμελιώδους κατάστασης. Λόγω της απαιτητικότητας του μοντέλου εφαρμόστηκε η μέθοδος προσομοίωσης, παράλληλης θερμοποίησης (Parallel Tempering) η οποία είναι μέχρι στιγμής η αποδοτικότερη αφού επιτυγχάνει να υπερβαίνει με μεγαλύτερη επιτυχία τους φραγμούς της ελεύθερης ενέργειας.

Στο επόμενο κεφάλαιο θα αναφερθούμε στην μέθοδο και θα περιγράψουμε διεξοδικά η διαδικασία υλοποίησης κάθε περίπτωσης.

Κεφάλαιο 2

Μεθοδολογία

2.1 Εισαγωγή

Στο παρόν κεφάλαιο αναλύουμε τις υπολογιστικές μεθόδους που χρησιμοποιήθηκαν στη μελέτη των πολύπλοκων μαγνητικών προτύπων τα οποία παρουσιάζονται στα κεφάλαια 3 και 4.

Δεδομένου ότι εν γένει η κρίσιμη συμπεριφορά των περισσότερων συστημάτων δεν έχει λυθεί αναλυτικά πλην ελάχιστων μοντέλων, έχουν αναπτυχθεί υπολογιστικές μέθοδοι προσομοίωσης ικανές να περιγράψουν την κρισιμότητα των πολύπλοκων συστημάτων σε μεγάλη ακρίβεια [96,128].

Κάθε προσομοίωση είναι κατ' ουσίαν δειγματοληπτική διαδικασία κατά την οποία ακολουθούμε ένα μονοπάτι στον χώρο των φάσεων, το οποίο περιγράφεται από Μαρκοβιανή ανέλιξη¹ (Markov chain) η οποία περιγράφει κατάσταση ισορροπίας.

Πραγματοποιώντας κατάλληλη τυχαία δειγματοληψία, ή αλλιώς διαδικασία Monte Carlo, στην αντίστοιχη Μαρκοβιανή ανέλιξη (MCMC) μας δίνεται η δυνατότητα να προσεγγίσουμε τις αναμενόμενες τιμές των καταστατικών μεγεθών.

Στις επόμενες ενότητες παρατίθενται ο ορισμός και οι βασικές ιδιότητες μιας διαδικασίας MCMC, ακολουθούν οι διαδικασίες δειγματοληψίας τις οποίες χρησιμοποιήσαμε οι οποίες χωρίζονται σε δύο κατηγορίες, δειγματοληψία σημαντικότητας και εντροπική. Το κεφάλαιο καταλήγει στην περιγραφή της παράλληλης θερμοποίησης (Parallel Tempering - PT) και τη συγκριτική μελέτη μεθόδων της, την οποία διεξαγάγαμε [112] (§ 2.5). Η διαδικασία αυτή αποτελεί την πιο σύγχρονη και αποτελεσματική μέθοδο προσομοίωσης βάσει της οποίας έγινε εφικτή η μελέτη

¹Στην βιβλιογραφία συναντάται επίσης ο όρος Μαρκοβιανή αλυσίδα.

των πολύ απαιτητικών υαλωδών συστημάτων στην οποία μελετήσαμε στην παρούσα διατριβή.

2.2 Μαρκοβιανές Ανελίξεις

Ξεκινώντας περιγράφονται τα βασικά στοιχεία της διαδικασίας Monte Carlo μιας Μαρκοβιανής ανελίξης ή MCMC.

Έστω πεπερασμένος χώρος των φάσεων Ω και η συνάρτηση βάρους $w : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^+$. Ο σκοπός είναι να σχεδιαστεί μια διαδικασία στην οποία να λαμβάνεται κάθε στοιχείο $x \in \Omega$ με πιθανότητα $p_x = \frac{w(x)}{Z}$ όπου $Z = \sum_{x \in \Omega} w(x)$ είναι η συνάρτηση επιμερισμού ή αλλιώς ο συντελεστής κανονικοποίησης.

Μαρκοβιανή ανελίξη στον Ω ορίζεται η στοχαστική διαδικασία

$$\{X_0, X_1, \dots, X_t, \dots\}$$

με $X_i \in \Omega$ ώστε:

$$\begin{aligned} Pr(X_{t+1} = y | X_t = x, X_{t-1} = x_{t-1}, \dots, X_0 = x_0) = \\ Pr(X_{t+1} = y | X_t = x) \equiv P(x, y) \end{aligned} \quad (2.1)$$

Η Μαρκοβιανή ανελίξη περιγράφεται δηλαδή από τον $|\Omega| \times |\Omega|$ πίνακα πιθανότητας P του οποίου το (x, y) στοιχείο αντιστοιχεί στην παραπάνω πιθανότητα $P(x, y)$. Συχνά συγχέεται η έννοια της Μαρκοβιανής ανελίξης με τον πίνακά P .

Ακολουθώντας τη συνήθη σημειογραφία της βιβλιογραφίας MCMC φυσικών συστημάτων, η πιθανότητα μετάβασης από την κατάσταση x στην y συμβολίζεται $P(x \rightarrow y)$ αντί για $P(x, y)$ στο καθεξής.

Οι δύο κύριες ιδιότητες του πίνακα P είναι:

- Ο P δεν είναι αρνητικός, δηλαδή $\forall x, y \in \Omega, P(x \rightarrow y) \geq 0$
- και

$$\forall x \in \Omega; \sum_{y \in \Omega} P(x \rightarrow y) = 1 \quad (2.2)$$

Στις Μαρκοβιανές ανελίξεις φυσικών συστημάτων ο χώρος των φάσεων αντιστοιχεί στον Ω . Δηλαδή οι καταστάσεις $x \in \Omega$ είναι αντίστοιχες μικροκαταστάσεις του συστήματος. Για να εξασφαλιστεί η επισκεψιμότητα όλου του χώρου των φάσεων, επιβάλλεται η συνθήκη της **εργοδικότητας** βάσει της οποίας από οποιαδήποτε κατάσταση x είναι δυνατόν με πεπερασμένο αριθμό βημάτων να καταλήξουμε σε οποιαδήποτε κατάσταση y .

Όταν το σύστημα είναι σε ισορροπία, ανεξάρτητα από στην κατανομή την οποία υπακούει, οι πληθυσμοί των καταστάσεων έχουν κατασταλάξει και οι αντίστοιχες πιθανότητες τους είναι p_x ². Έτσι στην κατάσταση ισορροπίας ισχύει ο νόμος διατήρησης:

$$\sum_y p_x P(x \rightarrow y) = \sum_y p_y P(y \rightarrow x) \quad (2.3)$$

ο οποίος μέσω της (2.2) δίνει την

$$p_x = \sum_y p_y P(y \rightarrow x) \quad (2.4)$$

2.2.1 Λεπτομερές Ισοζύγιο

Η συνθήκη 2.4 είναι αναγκαία αλλά όχι ικανή για την επίτευξη ισορροπίας λόγω του ότι επιτρέπει την ύπαρξη οριακών κύκλων (limit cycle) κατά τους οποίους οι πληθυσμοί p_x δεν καταλήγουν σε οριακή σταθερή κατανομή αλλά ακολουθούν *modn* εξέλιξη στο όριο $t \rightarrow \infty$.

Η συνθήκη λεπτομερούς ισοζυγίου (detailed balance) εγγυάται την σύγκλιση στην επιθυμητή κατανομή ισορροπίας:

$$p_x P(x \rightarrow y) = p_y P(y \rightarrow x) \Rightarrow \frac{P(y \rightarrow x)}{P(x \rightarrow y)} = \frac{p_x}{p_y} \quad (2.5)$$

Η συνθήκη συνδέει την κατανομή πληθυσμών με τις πιθανότητες μετάβασης χωρίς όμως να τις καθορίζει μονοσήμαντα. Έτσι υπάρχει πλειάδα αλγορίθμων οι οποίοι όλοι υπακούουν στη συνθήκη λεπτομερούς ισοζυγίου.

Συνήθης πρακτική είναι η παραμετροποίηση της πιθανότητας μετάβασης:

$$P(x \rightarrow y) = S(x \rightarrow y)A(x \rightarrow y) \quad (2.6)$$

όπου $S(x \rightarrow y)$ είναι η πιθανότητα να επιλεγεί η μετάβαση $x \rightarrow y$ και $A(x \rightarrow y)$ η πιθανότητα να πραγματοποιηθεί. Η δυνατότητα εισαγωγής της πιθανότητας αποδοχής $A(x \rightarrow y)$ δίνεται από την ιδιότητα της μετάβασης στην παρούσα κατάσταση δηλαδή στην παραμονή στην x να ικανοποιεί πάντα τη συνθήκη λεπτομερούς ισοζυγίου.

Χαρακτηριστικό μέγεθος μιας διαδικασίας MCMC η οποία περιγράφει σύστημα σε ισορροπία, είναι ο χρόνος ανάμιξης (mixing time) ή αλλιώς χρόνος ισορρόπησης (equilibration time). Χρόνος ανάμιξης είναι το

²Στην κανονική συλλογή οι p_x ακολουθούν την κατανομή Boltzmann

πλήθος των βημάτων που χρειάζονται μέχρις ότου αποκτήσουν οι πληθυσμοί τις προσδοκώμενες τιμές ισορροπίας, για παράδειγμα $p_x = \frac{e^{-\beta E_x}}{Z}$ στην κανονική συλλογή.

Στη συνέχεια παρουσιάζονται οι δειγματοληπτικοί αλγόριθμοι που έχουν χρησιμοποιηθεί στην παρούσα διατριβή.

2.3 Δειγματοληψία σημαντικότητας

Είναι φανερό ότι για συστήματα αξιόλογου μεγέθους, η απ' ευθείας άθροιση της συνάρτησης επιμερισμού είναι αδύνατη. Για παράδειγμα το τετραγωνικό μοντέλο Ising γραμμικού μεγέθους³ $L = 20$ έχει χώρο των φάσεων αποτελούμενο από 2^{400} διαφορετικές διατάξεις σπιν⁴. Αποκλείεται επίσης η τυφλά τυχαία δειγματοληψία δεδομένου ότι η περιοχή ενδιαφέροντος είναι συνήθως πολύ στενή στον χώρο των φάσεων και επομένως η εντελώς τυχαία επιλογή έχει μηδαμινή πιθανότητα να την εντοπίσει. Το πρόβλημα αντιμετωπίζουν επιτυχώς οι μέθοδοι δειγματοληψίας σημαντικότητας κατά τις οποίες η δειγματοληψία επικεντρώνεται στην περιοχή του χώρου των φάσεων πληθυσμών μεγαλύτερης πιθανότητας.

Οι δειγματοληπτικές μέθοδοι σημαντικότητας χωρίζονται σε δύο κύριες κατηγορίες.

- Αλγόριθμοι τοπικής εξέλιξης (local update) ή αλλιώς αντιστροφής μεμονωμένου σπιν (single spin flip) ή απλά τοπικούς, με αντιπροσωπευτικούς τους Metropolis, Glauber, Heat Bath και BKL. Οι διαδοχικές καταστάσεις των Μαρκοβιανών ανελίξεων στους τοπικούς αλγόριθμους διαφέρουν κατά ένα το πολύ σπιν.
- Συμπλεγματικοί (cluster) αλγόριθμοι όπως οι Wolff και Swendsen-Wang κατά τους οποίους δίνεται η δυνατότητα να ενημερώνονται ταυτόχρονα περισσότερα του ενός σπιν.

Ενώ οι τοπικοί αλγόριθμοι εφαρμόζονται εύκολα ανεξαρτήτως της δυναμικής - χαμιλτονιανής του συστήματος, οι συμπλεγματικοί εξαρτώνται σημαντικά από το εκάστοτε σύστημα.

2.3.1 Ο αλγόριθμος Metropolis

Ο πιο ευέλικτος κανόνας ενημέρωσης με άμεση εφαρμογή στα συστήματα σπιν και όχι μόνο, είναι ο κλασικός πλέον αλγόριθμος Metropolis [122]. Εδώ προτείνεται αλλαγή της τιμής ενός μόνο βαθμού ελευθερίας, στην περίπτωσή μας, ενός σπιν.

Ακολουθώντας την σχέση 2.6 επιλέγεται ομοιόμορφα ένα σπιν $S(x \rightarrow y) = S(y \rightarrow x) = 1/N$ με N το πλήθος τους. Η πιθανότητα αποδοχής

³ $L = 20$ είναι το μικρότερο μέγεθος στη μελέτη του διδιάστατου μοντέλου Ising $S = 1$ (βλ. § 3.2)

⁴Ο αριθμός είναι αστρονομικός δεδομένου ότι είναι 40 τάξεις μεγέθους μεγαλύτερος από το πλήθος των στοιχειωδών σωματιδίων του παρατηρήσιμου σύμπαντος.

ορίζεται ως:

$$A(x \rightarrow y) = \begin{cases} 1 & E_x - E_y \leq 0 \\ e^{-\beta(E_y - E_x)} & E_x - E_y > 0 \end{cases} \quad (2.7)$$

Εναλλακτικά η (2.7) γράφεται:

$$A(x \rightarrow y) = \min \{1, e^{-\beta \Delta E}\} \quad (2.8)$$

Η αποτελεσματικότητά του έγκειται στη μεγάλη πιθανότητα αποδοχής δεδομένου ότι επιθυμούμε να παραμένει το σύστημα στην ίδια κατάσταση το λιγότερο δυνατόν.

Κρίσιμη επιβράδυνση

Το βασικό μειονέκτημα του Metropolis παρουσιάζεται στην κρίσιμη περιοχή και είναι γνωστό ως **κρίσιμη επιβράδυνση**.

Σε μια διαδικασία MCMC η μέση τιμή μιας μετρήσιμης ποσότητας Q δίνεται από την σχέση:

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{t} \sum_{i=1}^t Q_i \quad (2.9)$$

Η συνάρτηση χρονικής αυτοσυσχέτισης ορίζεται ως

$$\mathcal{G}_t = \langle Q_i Q_{i+t} \rangle - \langle Q_i \rangle \langle Q_{i+t} \rangle \quad (2.10)$$

και φθίνει εκθετικά:

$$\mathcal{G}_t \xrightarrow{t \rightarrow \infty} e^{-t/\tau_{G_t}} \quad (2.11)$$

Ο τ_{G_t} καλείται χρόνος αυτοσυσχέτισης και είναι ένα μέτρο του κατά πόσο πρέπει να απέχουν οι μετρήσεις Q ώστε να είναι ασυσχέτιστες. Σε αυτό το σημείο πρέπει να σημειωθεί ότι η συνήθης πρακτική είναι να επιλέγεται σαν στοιχειώδης χρόνος το πλήθος $N = L^d$ κινήσεων Metropolis, που αντιστοιχεί σε μια σάρωση όλου του πλέγματος.

Ο τ_{G_t} στους τοπικούς αλγόριθμους κλιμακώνεται ως

$$\tau_{G_t} \sim \xi^z \quad (2.12)$$

όπου το ξ είναι το γνωστό μήκος συσχέτισης. Ο z καλείται δυναμικός κρίσιμος εκθέτης και είναι θετικός. Δεδομένου ότι όσο πλησιάζουμε την κρίσιμη θερμοκρασία $\xi \sim |T - T_c|^{-\nu}$, ο τ_{G_t} αποκλίνει ως $\tau_{G_t} \sim |T - T_c|^{-\nu z}$. Αυτό οδηγεί στο φαινόμενο της κρίσιμης επιβράδυνσης το οποίο εμποδίζει την αξιόπιστη δειγματοληψία της κρίσιμης περιοχής. Λύση στο πρόβλημα δίνουν οι μη τοπικοί αλγόριθμοι οι οποίοι όμως δεν είναι εφαρμόσιμοι σε όλα τα συστήματα.

2.3.2 Ο αλγόριθμος Bortz Kalos Lebowitz - BKL

Περιγράφεται στη συνέχεια ο αλγόριθμος των Bortz, Kalos και Lebowitz [25,111,128,157]. Στην βιβλιογραφία ο αλγόριθμος είναι επίσης γνωστός και ως Monte Carlo συνεχούς χρόνου, κινητικός Monte Carlo ή n-fold way.

Ενώ στον Metropolis κάθε MC βήμα μπορεί να παραμείνει στην ίδια κατάσταση για χρόνο Δt , στον κινητικό αλγόριθμο MC επιβάλουμε στο σύστημα να μεταβεί σε καινούργια κατάσταση εισάγοντας όμως χρονικά βάρη Δt τα οποία αντιστοιχούν στα χρονικά διαστήματα κατά τα οποία το σύστημα αναμένεται να παραμείνει στην ίδια κατάσταση σε μια Metropolis MC διαδικασία [128]. Κατά την διαδικασία άθροισης μιας παρατηρούμενης ποσότητας οι μέσες τιμές των ποσοτήτων γίνονται χρονικοί μέσοι μέσω της εφαρμογής των χρονικών βαρών Δt . Ο συνολικός χρόνος της αθροιστικής διαδικασίας άρα ισούται με το άθροισμα των βαρών Δt . Η επιλογή της καινούργιας κατάστασης γίνεται βάσει μιας κατανομής πιθανοτήτων η οποία παράγεται ως εξής: Έστω η παρούσα κατάσταση μ και $r_j \equiv r(\mu \rightarrow \nu)$ οι πιθανότητες αποδοχής για όλες τις πιθανές μεταβάσεις ($j = 1, 2, \dots, K$) από την παρούσα κατάσταση. Διαλέγοντας έναν τυχαίο αριθμό $0 < R \leq 1$ επιλέγεται η καινούργια κατάσταση ν η οποία αντιστοιχεί στη μετάβαση i αν $Z_{i-1} < RZ_K \leq Z_i$

όπου $Z_i = \sum_{j=1}^i r_j$. Με τη βοήθεια της αθροιστικής συνάρτησης Z_i , η κατάσταση ν επιλέγεται με πιθανότητα $P_i = r_i/Z_K$ η οποία είναι ανάλογη της πιθανότητας $r(\mu \rightarrow \nu)$. Οι P_j αποτελούν τις πιθανότητες επιλογής του κινητικού MC αλγόριθμου. Τα χρονικά βάρη Δt ή αλλιώς οι μέσοι χρόνοι παραμονής (average life-times) [157] υπολογίζονται εκ νέου σε κάθε βήμα μέσω της σχέσης: $\Delta t \propto Z_K^{-1}$ [25,111,128,157]. Εναλλακτικά η επιλογή της καινούργιας κατάστασης i μπορεί να γίνει από την αθροιστική συνάρτηση Q_m η οποία παράγεται από τις πιθανότητες επιλογής. Σε αυτήν την περίπτωση η συνθήκη επιλογής είναι $Q_{i-1} < R \leq Q_i$, όπου

$$Q_m = \sum_{j=1}^m P_j.$$

Σε μερικά συστήματα οι μεταβάσεις μπορούν να ταξινομηθούν σε ένα μικρό αριθμό κλάσεων n οπότε και η μέθοδος γίνεται αρκετά αποδοτική, αλλά εν γένει ο υπολογισμός εκ νέου όλων των πιθανοτήτων μετάβασης σε κάθε βήμα είναι το μεγαλύτερο μειονέκτημα της μεθόδου.

Στην αναφορά [25] περιγράφεται λεπτομερώς η εφαρμογή του n-fold way αλγόριθμου στο τετραγωνικό μοντέλο Ising με περιοδικές συνοριακές συνθήκες (PBC) με την χρήση $n = 10$ διαφορετικών κλάσεων οι

οποίες αντιστοιχούν στις δυνατές ενεργειακές διαφορές από μία αντιστροφή σπιν.

Στην γενική περίπτωση ενός μοντέλου τύπου Ising σε μηδενικό πεδίο με περιοδικές συνθήκες αρκούν $n = 5$ κλάσεις οι οποίες αντιστοιχούν στις δυνατές ενεργειακές αλλαγές $\Delta E_j = 8 - 4(j - 1)$ όπου ο δείκτης των κλάσεων είναι $j = 5 - z$ και $z = 4, 3, 2, 1, 0$ είναι ο αριθμός πρώτων γειτόνων με παράλληλο σπιν με την υπό εξέταση για αντιστροφή θέση [25, 111, 157]. Σε αυτήν την περίπτωση τα στατιστικά βάρη για την επιλογή μιας κλάσης είναι το άθροισμα των λόγων αποδοχής όλων των σπιν της κλάσης και παίρνει τη μορφή: $r_j^{cl} = N_j A_j$, όπου N_j είναι οι τρέχοντες πληθυσμοί⁵ και $A_j = \min[1, \exp(-\beta \Delta E_j)]$ είναι οι αντίστοιχοι λόγοι αποδοχής Metropolis. Η επιλογή κλάσης γίνεται όπως ήδη έχει περιγραφεί μέσω της αθροιστικής συνάρτησης $Z_m = \sum_{j=1}^m r_j^{cl}$ και τα μέσα χρονικά διαστήματα δίνονται από την $\Delta t = NZ_n^{-1}$ [157]. Κατόπιν το σπιν επιλέγεται τυχαία μέσα από την κλάση και πάντα αντιστρέφεται. Η μέθοδος αυτή έχει χρησιμοποιηθεί επιτυχώς για την επίτευξη της θερμοδυναμικής ισορροπίας σε πλήθος μοντέλων τύπου Ising σε διδιάστατα αλλά και κυβικά μοντέλα υαλώδους σπιν όπου όμως $n = 7$.

2.3.3 Ο αλγόριθμος Wolff

Λίγο μετά την πρόταση του πρώτου συμπλεγματού αλγορίθμου από τους Swendsen και Wang το 1987 [174], ο Wolff προτείνει την απλοποιημένη παραλλαγή κατά την οποία κατασκευάζεται και αντιστρέφεται μόνο ένα σύμπλεγμα σπιν την φορά [180]. Περιγράφεται ο αλγόριθμος όπως εφαρμόζεται σε πρότυπα σπιν τύπου Ising.

Αρχικά σχηματίζεται το σύμπλεγμα των σπιν. Ξεκινώντας από δύο κενές λίστες στη μία τοποθετούνται τα σπιν του συμπλέγματος C και στην άλλη τα υπό εξέταση E . Αρχικά επιλέγεται τυχαία ένα σπιν και τοποθετείται στην C . Τα γειτονικά του τοποθετούνται στην E . Στη συνέχεια εξετάζεται ένα ένα τα σπιν της E και μετακινούνται στην C αν είναι παράλληλα και με πιθανότητα $p_{add} = 1 - e^{-2\beta J}$ αν είναι αντιπαράλληλα. Κατόπιν προστίθενται στην E τα γειτονικά του σπιν που ελέγχθηκε. Η διαδικασία ολοκληρώνεται όταν έχουν εξεταστεί όλα τα σπιν. Τέλος αντιστρέφονται όλα τα σπιν του συμπλέγματος ταυτόχρονα και επαναλαμβάνουμε την διαδικασία.

Η αντιστοιχία του χρόνου αυτοσυσχέτισης τ_W του αλγορίθμου Wolff

⁵ Δεδομένου ότι υπάρχουν N δυνατά spin flip και άρα μεταβάσεις ισχύει $\sum_j N_j = N$.

με τον χρόνο αυτοσυσχέτισης τ , του Metropolis δίνεται από την σχέση:

$$\tau = \tau_W \frac{\langle n \rangle}{N} \quad (2.13)$$

όπου $\langle n \rangle$ είναι το μέσο πλήθος των σπιν ενός συμπλέγματος. Ο αντίστοιχος δυναμικός κρίσιμος εκθέτης z ορίζεται ως $\tau \sim \xi^z$. Έχει βρεθεί ότι ο z είναι σημαντικά μικρότερος από τον αντίστοιχο του Metropolis, για παράδειγμα στο $d = 2$ μοντέλο Ising είναι 8 φορές μικρότερος ενώ στο $d = 3$, 6 φορές [128]. Έτσι για θερμοκρασία μακριά από την κρίσιμη προτιμάται ο Metropolis λόγω του επιπλέον χρόνου που απαιτεί ο Wolff για τον σχηματισμό των συμπλεγμάτων, αλλά όταν εξετάζεται η κρίσιμη περιοχή ο Wolff αποδεικνύεται ανώτερος.

Μια ενδιαφέρουσα ιδιότητά του είναι ότι για $T > T_c$ ισχύει:

$$\chi = \beta \langle n \rangle \quad (2.14)$$

Ο Wolff μπορεί να γενικευτεί για πρότυπα με τυχαίες αλληλεπιδράσεις. Έτσι στο πρότυπο υαλώδους Ising σπιν όπου συνυπάρχουν σιδηρομαγνητικές και αντισιδηρομαγνητικές αλληλεπιδράσεις, ο Wolff μετασχηματίζεται θεωρώντας τα σπιν παράλληλα όταν $S_i S_j \text{sign}(J) > 0$ και αντιπαράλληλα για $S_i S_j \text{sign}(J) < 0$. Στην περίπτωση όμως του προτύπου Blume Capel στο οποίο επιτρέπεται μηδενική τιμή σπιν δεν είναι δυνατή η αποκλειστική εφαρμογή του Wolff. Στην περίπτωση αυτή χρησιμοποιείται υβριδικός αλγόριθμος ο οποίος συνδυάζει τοπικές κινήσεις Metropolis και Wolff.

2.4 Εντροπική Δειγματοληψία

Η εντροπική δειγματοληψία παρουσιάστηκε αρχικά από τον Lee [100] το 1993 και η καινοτομία της είναι ότι δεν ακολουθεί την κατανομή Boltzmann αλλά υπολογίζεται η πυκνότητα καταστάσεων της ενέργειας και βάσει αυτής εξάγονται όλα τα θερμοδυναμικά μεγέθη σε ολόκληρο το θερμοκρασιακό εύρος.

Αφού περιγραφεί η αρχική διαδικασία του Lee, παρουσιάζεται η πιο σύγχρονη εκδοχή του αλγόριθμου από τους Wang και Landau [177] και τέλος εστιάζουμε σε τεχνικές βελτιστοποίησής του οι οποίες και εφαρμόστηκαν στην παρούσα μελέτη του $d = 2$ μοντέλου Blume-Capel (§ 3.3).

Ο Lee πρότεινε η δειγματοληψία αντί να ακολουθεί την κατανομή Boltzmann να παράγονται καταστάσεις μέσω τυχαίου περιπάτου με πιθανότητα:

$$p(E) = \frac{1}{KG(E)} \quad (2.15)$$

όπου $K = \int G^{-1}(E)dE$ είναι η σταθερά κανονικοποίησης και $G(E)$ η πυκνότητα καταστάσεων ενέργειας E .

Η μέση τιμή μακροσκοπικού μεγέθους Q στο σύνολο M παρατηρούμενων μικροκαταστάσεων, εξάγεται από την εκ' των υστέρων επιβολή του παράγοντα Boltzmann:

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_i^M Q_i G(E_i) e^{-\beta E_i}}{\sum_i^M G(E_i) e^{-\beta E_i}} \quad (2.16)$$

Η πρόκληση βέβαια της προσέγγισης της εντροπικής δειγματοληψίας είναι ότι για μη τετριμμένα συστήματα η $G(E)$ δεν είναι γνωστή. Ο Lee για να αντιμετωπίσει το πρόβλημα πρότεινε την εξής επαναληπτική διαδικασία. Αρχίζοντας από μια χοντρική εκτίμηση την $G(E)_0$, φτιάχνεται το ενεργειακό ιστόγραμμα $H(E)$ που προκύπτει από την δειγματοληψία. Σε κάθε βήμα επαναυπολογίζεται η $G(E)$ βάσει του τύπου:

$$G(E)_t = G(E)_{t-1} H(E)_{t-1} \quad (2.17)$$

Δεδομένου ότι η μικροκανονική εντροπία $S(E)$ ορίζεται ως:

$$S(E) = \log(G(E)) \quad (2.18)$$

Η (2.17) γίνεται:

$$S(E)_t = S(E)_{t-1} + \log(H(E)_{t-1}) \quad (2.19)$$

εξ' ου και ο όρος εντροπική δειγματοληψία.

2.4.1 Ο αλγόριθμος Wang-Landau

Οι Wang και Landau εισήγαγαν ένα επαναληπτικό αλγόριθμο ο οποίος έχει πολύ γρηγορότερη σύγκλιση επιτρέποντας όμως μικρή παραβίαση της συνθήκης λεπτομερούς ισοζυγίου. Η βασική ιδέα στηρίζεται στην επαναληπτική επιπεδοποίηση του ιστογράμματος της ενέργειας επιβάλλοντας

$$G(E)_t = fG(E)_{t-1} \quad (2.20)$$

κάθε φορά που επισκεπτόμαστε την E , είτε γίνει η μετάβαση είτε δεν γίνει. Ο συντελεστής $f > 1$ είναι αυθαίρετος και συνήθως επιλέγεται η αρχική τιμή $f = e$. Η περιήγηση στον ενεργειακό χώρο γίνεται με τυχαίο περίπατο βάσει της πιθανότητας:

$$P(E_i \rightarrow E_j) = \min \left\{ 1, \frac{G(E_i)}{G(E_j)} \right\} \quad (2.21)$$

Κατά τον περίπατο ανανεώνεται το ιστόγραμμα $H(E)$ και όταν αποκτήσει την επιθυμητή ομοιομορφία η οποία τυπικά δίνεται από σχέση της μορφής:

$$\frac{H_{max} - H_{min}}{H_{max}} \approx 10\% \quad (2.22)$$

μηδενίζεται το ιστόγραμμα και μειώνουμε τον παράγοντα $f \rightarrow \sqrt{f}$. Η διαδικασία επαναλαμβάνεται μέχρις ότου η $f \approx 1 + 10^{-8}$, δηλαδή περίπου ~ 26 φορές.

Μέθοδοι βελτιστοποίησης της δειγματοληψίας WL

Από την πρωτοεμφάνιση της WL έχουν γίνει πολλά βήματα προς την βελτιστοποίησή της κάνοντάς τη μία από τις αποδοτικότερες δειγματοληπτικές μεθόδους ειδικά για απλά συστήματα.

Η **πολλαπλά τμηματική** (multi-range) δειγματοληψία WL αποτελεί συνήθη πρακτική για την γρηγορότερη σύγκλιση της μεθόδου. Η διαδικασία συνίσταται στον χωρισμό του ενεργειακού χώρου σε μικρότερα κομμάτια συνήθως ίδιου μεγέθους. Έτσι ο τυχαίος περίπατος γίνεται ταυτόχρονα σε μικρότερα ενεργειακά τμήματα χωρίς να εισάγο-

νται απαγορευτικά σφάλματα όπως έχει δειχτεί σε απλά συστήματα σπιν⁶ [111, 157, 177].

Δραστηκότητα μείωση του μήκους των τυχαίων περιπάτων επιτυγχάνεται μέσω της μεθόδου εντοπισμού του **Κυρίαρχου Ενεργειακού Υπόχωρου** - CrMES των Μαλάκη κ.α. [110, 113]. Κατά την CrMES ο ενεργειακό χώρος περιορίζεται σε ένα σημαντικά μικρότερο τμήμα ($\Delta\tilde{E} \equiv [\tilde{E}_-, \tilde{E}_+]$) του ολικού ενεργειακού εύρους $[E_{min}, E_{max}]$. Η μείωση του χώρου είναι δυνατή γιατί ενώ η WL επιτρέπει θεωρητικά την περιγραφή όλου του θερμοκρασιακού εύρους, όταν το ενδιαφέρον μας επικεντρώνεται σε μία θερμοκρασία κοντά στην κρίσιμη ο ενεργειακός χώρος ο οποίος είναι στατιστικά σημαντικός εντοπίζεται σε μια στενή περιοχή πέριξ των ψευδοκρίσιμων.

Εξετάζοντας την περίπτωση του μεγίστου της θερμοχωρητικότητας C , η ψευδοκρίσιμη της θερμοκρασία συμβολίζεται $T_{L;C}^*$ και η αντίστοιχη ενέργεια $\tilde{E} = E(T_{L;C}^*)$. Το κρίσιμο ενεργειακό εύρος ορίζεται ως:

$$\Delta\tilde{E} = \tilde{E}_{\pm} \equiv \tilde{E} \pm \Delta^{\pm}, \Delta^{\pm} \geq 0 \quad (2.23)$$

Η κατανομή πιθανότητας της ενέργειας $f(T_{L;C}^*)$ είναι γνωστή:

$$f(T_{L;C}^*) \propto e^{\tilde{\Phi}(E)} \quad (2.24)$$

με

$$\tilde{\Phi}(E) = [S(E) - \beta E] - [S(\tilde{E}) - \beta\tilde{E}] \quad (2.25)$$

όπου $S(E) = \log G(E)$ είναι η μικροκανονική εντροπία.

Μπορούμε άρα να ορίσουμε σαν r , το μέτρο επιτρεπτού σφάλματος ούτως ώστε:

$$e^{\tilde{\Phi}(\tilde{E}_{\pm})} \leq r \quad (2.26)$$

Τυπική τιμή για την r είναι της τάξης του $r \sim 10^{-6}$.

Είναι λογικό να υποτεθεί ότι ο κυρίαρχος ενεργειακός χώρος $\Delta\tilde{E}$ είναι ανάλογος της τυπικής απόκλισης της κατανομής της ενέργειας σ_E . Κατά συνέπεια λόγω του κεντρικού οριακού θεωρήματος και της θερμοδυναμικής ισοδυναμίας των συλλογών, για σύστημα μεγέθους $N = L^d$ ισχύει:

$$\Delta\tilde{E} \propto \sigma_E = \sqrt{NT^2C} \quad (2.27)$$

Στο κρίσιμο σημείο όμως όπου λόγω της απόκλισης του μήκους συσχέτισης το κεντρικό οριακό θεώρημα δεν έχει ισχύ, μόλα ταύτα η

⁶Στα συστήματα με αταξία χρειάζεται μεγάλη προσοχή στην εφαρμογή της μεθόδου ρυθμίζοντας κατάλληλα τα επίπεδα.

έκταση του ενεργειακού υπόχωρου ΔE δεν αναμένεται να απέχει αισθητά από την (2.27). Μπορούμε άρα να εκφράσουμε τον νόμο κλιμάκωσης του ΔE , όταν $T \rightarrow T_c$, μέσου του κρίσιμου εκθέτη της θεμοχωρητικότητας α ως εξής:

$$\frac{\Delta \tilde{E}^2}{L^d} \sim L^{\frac{\alpha}{\nu}} \quad (2.28)$$

Ο νόμος κλιμάκωσης 2.28 έχει επιβεβαιωθεί με ικανοποιητική ακρίβεια στις [110, 113].

Συμπληρωματική μέθοδος κατά την οποία βελτιώνεται κατά πολύ η ακρίβεια των αποτελεσμάτων αποτελεί η δειγματοληψία **WL 2 επιπέδων**. Κατά τη διαδικασία αυτή χωρίζονται τα επαναληπτικά στάδια προσαρμογής του παράγοντα f σε δύο επίπεδα. Στο πρώτο που αφορά περίπου τα πρώτα 20 στάδια όπου ακολουθείται κανονικά η διαδικασία όπως έχει περιγραφεί παραπάνω και στο δεύτερο το οποίο αποτελείται από τα 4 ~ 6 τελευταία στάδια WL. Στο δεύτερο επίπεδο η διαδικασία γίνεται περισσότερο απαιτητική αφού αυξάνουμε την ακρίβεια του ιστογράμματος αλλά επίσης βελτιώνουμε τυχών εργοδικά προβλήματα. Αυτό επιτυγχάνεται διευρύνοντας τα ενεργειακά τμήματα ενώ εναλλακτικά μπορεί να χρησιμοποιηθεί μονοτμηματική δειγματοληψία.

2.5 Παράλληλη Θερμοποίηση

2.5.1 Περιγραφή - σύγκριση σχημάτων PT

Στο εδάφιο αυτό περιγράφονται τα βασικά στοιχεία της διαδικασίας παράλληλης θερμοποίησης μαζί με τα ευρήματα της συγκριτικής διαδικασίας σχημάτων PT όπως αυτά δημοσιεύτηκαν στην εργασία [112]. Για να υπερβούμε προβλήματα παγίδευσης τα οποία εμφανίζονται μεταξύ άλλων, στη μελέτη μεταβάσεων πρώτης τάξης, υαλωδών προτύπων σπιν τα οποία και μελετήσαμε στην παρούσα διατριβή, όπως και στη μελέτη βιομοριών, αναπτύχθηκαν η μέθοδος εντροπικής δειγματοληψίας, όπως και η μέθοδος παράλληλης θερμοποίησης - Parallel Tempering (PT) ή αλλιώς μέθοδος ανταλλαγής αντιγράφων (replica exchange) [42, 72, 81, 119, 120, 173]. Η αποτελεσματικότητα της μεθόδου PT έχει αποδειχτεί στη μελέτη υαλωδών συστημάτων σπιν [4, 20, 30, 34, 43, 66, 68, 74, 78, 82, 83, 86, 131, 133, 134, 138, 139, 141], αναδίπλωση πρωτεϊνών [164] και βιομοριών [59, 171, 183].

Σε μια υλοποίηση ενός τυπικού σχήματος PT έχουμε μια ακολουθία αντιγράφων (replica) του συστήματος όπου για το κάθε ένα αντιστοιχεί μία προεπιλεγμένη θερμοκρασία. Η διαδικασία προσομοίωσης αποτελείται από τη μίξη δύο βημάτων. Κατά το πρώτο βήμα πραγματοποιούνται κινήσεις MC σε μια σειρά προεπιλεγμένων θερμοκρασιών οι οποίες καλούνται **τοπικές κινήσεις**. Το δεύτερο αποτελείται από τις απόπειρες ανταλλαγής αντιγράφων για τα αντίστοιχα ζεύγη θερμοκρασιών, τις **κινήσεις ανταλλαγής**. Οι τοπικές κινήσεις εξαρτώνται από την υλοποίηση του τοπικού αλγορίθμου ο οποίος μπορεί να είναι ο απλός Metropolis (single spin-flip) [122], ο n-fold way ή BKL αλγόριθμος [25, 111, 128, 157] αλλά και ο cluster αλγόριθμος του Wolff. Το προφανές ζήτημα που προκύπτει είναι πόσο συχνά πρέπει να γίνεται το βήμα ανταλλαγής, αλλά και πόσο πρέπει να διαρκεί το βήμα των τοπικών κινήσεων. Για τον λόγο αυτό χρησιμοποιούμε σαν μέτρο αποτελεσματικότητας του σχήματος PT τον μέσο αριθμό βημάτων ανταλλαγής τα οποία χρειάζονται ώστε να μεταφερθεί ένα αντίγραφο από τη μέγιστη θερμοκρασία στην ελάχιστη και πίσω στη μέγιστη, δηλαδή τον χρόνο μιας πλήρους περιαγωγής στον χώρο των θερμοκρασιών (χρόνος round-trip). Ο χρόνος round-trip μπορεί να αναδείξει δυσκολίες στη ροή της κίνησης των αντιγράφων. Τα σχήματα με μικρό round-trip χρόνο είναι πιο αποτελεσματικά αφού έχουν μικρότερους χρόνους ισορρόπησης και απεγκλωβίζονται πιο εύκολα από τις καταστάσεις τοπικών ελαχίστων.

Η ελευθερία στον σχεδιασμό ενός πρωτοκόλλου PT λόγω του πλήθους των παραμέτρων καθιστά τη συγκριτική μελέτη των PT σχημά-

των μη τετριμμένη και απαιτητική [7, 48, 103, 153, 178]. Στα πλαίσια της παρούσας εργασίας εξετάστηκαν δύο μέθοδοι επιλογής θερμοκρασιών και ελέγχθηκε η επίδοσή τους σε σχέση με τον αριθμό των τοπικών κινήσεων. Η πρώτη μέθοδος επιλογής θερμοκρασιών είναι η μέθοδος σταθερής αποδοχής ανταλλαγών ή constant acceptance exchange (CAE) [21, 42, 81, 171]. Χρησιμοποιώντας την CAE οι Bittner κ.ά. [21] έδειξαν ότι αν οι τοπικοί χρόνοι ακολουθούν τους κανονικούς χρόνους συσχέτισης ελαχιστοποιείται ο χρόνος round-trip. Ο υπολογισμός του χρόνου συσχέτισης για κάθε θερμοκρασία απαιτεί μια σειρά δαπανηρών προκαταρκτικών δοκιμών. Εκτός από το θεωρητικό ενδιαφέρον, οι χρόνοι συσχέτισης μπορούν να αποτελέσουν βάση για τον προσδιορισμό του τοπικού χρόνου αντικαθιστώντας την χρήση καθαρά εμπειρικών τιμών.

Η επόμενη μέθοδος επιλογής ακολουθίας θερμοκρασιών CEI εισήχθη από τους Sabo κ.α. [154]. Η μέθοδος στοχεύει στην σταθερή αύξηση της εντροπίας από τη μία θερμοκρασία στην επόμενη. Οι δύο μέθοδοι παράγουν ακολουθίες θερμοκρασιών οι οποίες είναι περισσότερο συγκεντρωμένες στην περιοχή όπου η ειδική θερμότητα έχει μέγιστο με τις CEI ακολουθίες να είναι πιο πυκνές. Σε συστήματα με απότομη κορυφή η διαφορά μεταξύ τους είναι σημαντική. Στην παρούσα μελέτη συγκρίθηκαν οι CEI και CAE καθώς και διάφορα σχήματα τοπικών αλγορίθμων και τελικά υιοθετήσαμε την πρόταση του Bittner [21], χρησιμοποιώντας τοπικούς χρόνους οι οποίοι σέβονται τους αντίστοιχους χρόνους συσχέτισης.

Ελέγχθηκε επίσης η διαδικασία ανταλλαγής αντιγράφων. Πιο συγκεκριμένα, ενώ στις περισσότερες υλοποιήσεις επιλέγονται γειτονικές θερμοκρασίες δίνεται η δυνατότητα ανταλλαγής μη γειτονικών αντιγράφων χωρίς να παραβιάζεται το λεπτομερές ισοζύγιο (detailed balance) [127]. Ακόμα όμως και στην περίπτωση απόπειρας ανταλλαγής μόνο γειτονικών αντιγράφων, η απόδοση του PT επηρεάζεται από παραμέτρους όπως ο τοπικός χρόνος μεταξύ των προσπαθειών ανταλλαγής αλλά και η σειρά με την οποία εκτελούνται οι απόπειρες ανταλλαγής. Από την άλλη, οι απομακρυσμένες ανταλλαγές έχουν εν γένει μικρότερους ρυθμούς αποδοχής, κάτι που τις καθιστά λιγότερο αποδοτικές αφού χάνεται χρόνος στις αποτυχημένες προσπάθειες. Για να ξεπεραστεί το πρόβλημα του χαμηλού ποσοστού αποδοχής ανταλλαγής, έχουν προταθεί κινητικές μέθοδοι MC [26, 28]. Η μέθοδος ανταλλαγής όλων των ζευγών (all-pair exchange) APE των Brenner κ.ά. [26] αποτελεί μια τέτοια περίπτωση. Η μέθοδος ικανοποιεί τη συνθήκη λεπτομερούς ισοζυγίου τουλάχιστον στον προσδιορισμό των πιθανοτήτων των παραγόμενων ανταλλαγών (μεταξύ γειτονικών και μη γειτονικών αντι-

γράφων). Η APE χρησιμοποιείται στην παρούσα συγκριτική μελέτη ως αντιπροσωπευτική των κινητικών μεθόδων MC και αντιπαραβάλλεται με τη μέθοδο κοντινότερων γειτόνων, NN .

Οι αριθμητικές δοκιμές έγιναν σε δύο μοντέλα: το τετραγωνικό μοντέλο Ising πλευράς $L = 50$, όπου συγκρίναμε τα σφάλματα στην τιμή της ειδικής θερμότητας και το κυβικό υαλώδες πρότυπο EA όπου δοκιμάστηκαν τα διάφορα σχήματα PT στην ικανότητα εύρεσης θεμελιώδους κατάστασης.

2.5.2 Μέθοδος επιλογής ακολουθίας θερμοκρασιών

Την τελευταία δεκαετία έχουν προταθεί αρκετές ιδέες για την κατασκευή του βέλτιστου τρόπου επιλογής θερμοκρασιών σε μια διαδικασία PT [21, 26, 28, 84, 91, 92, 127, 151, 154].

CAE

Σύμφωνα με τη διαδικασία των Katzgraber κ.α. [84], η βέλτιστη ακολουθία θερμοκρασιών πρέπει να ακολουθεί τον μέγιστο ρυθμό πλήρους περιαγωγής, δηλαδή από τη χαμηλότερη στη μέγιστη θερμοκρασία και πίσω. Η ακολουθία βρίσκεται μέσω αναδρομικής συνεχούς προσαρμογής. Η μέθοδος λόγω της αναδραστικότητάς της είναι αρκετά απαιτητική στην υλοποίησή της, αλλά και στην εφαρμογή της και λόγω αυτού προτιμούνται απλούστερες μέθοδοι, μία εκ των οποίων είναι η CAE. Η CAE όταν περιέχει επαρκή τοπικό χρόνο μεταξύ βημάτων ανταλλαγής έχειδειχτεί [21] ότι πλησιάζουν οι χρόνοι round-trip τους βέλτιστους. Στην CAE επιλέγεται εκ των προτέρων ο επιθυμητός ρυθμός αποδοχής ανταλλαγής αντιγράφων (r). Ακολουθώντας την [21] επιβάλλεται ο r ξεκινώντας από τη χαμηλότερη θερμοκρασία και βρίσκοντας τις επόμενες υπολογίζοντας τον ρυθμό αποδοχής ανταλλαγής από την

$$R(1 \leftrightarrow 2) = \sum_{E_1, E_2} P_{T_1}(E_1)P_{T_2}(E_2)p(E_1, T_1 \leftrightarrow E_2, T_2), \quad (2.29)$$

όπου $P_{T_i}(E_i)$ είναι η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας (pdf) της ενέργειας για το αντίγραφο i στην θερμοκρασία T_i και

$$p(E_1, T_1 \leftrightarrow E_2, T_2) = \min[1, \exp(\Delta\beta\Delta E)], \quad (2.30)$$

είναι η πιθανότητα αποδοχής της ανταλλαγής δύο αντιγράφων με $\Delta\beta = 1/T_2 - 1/T_1$ και $\Delta E = E_2 - E_1$. Εγγυόμενοι ότι $R(1 \leftrightarrow 2) = r$ για τα γειτονικά αντίγραφα παίρνουμε την επιθυμητή ακολουθία, αρκεί η pdf

της ενέργειας να είναι γνωστή ή έστω να έχει γίνει καλή προσέγγισή της μέσω προκαταρκτικών δοκιμών.

Αν και η πυκνότητα καταστάσεων (DOS) και η pdf της ενέργειας για το τετραγωνικό μοντέλο Ising πλευράς μήκους $L = 50$ είναι γνωστή από την [11], χρησιμοποιήσαμε την εργασία μόνο για τον προσδιορισμό των σφαλμάτων της ειδικής θερμότητας. Για τον προσδιορισμό της pdf της ενέργειας, όμως, εφαρμόστηκε απλή μέθοδος ιστογράμματος [128, 174] σε προκαταρκτικές δοκιμές (Metropolis) σε ένα κατάλληλο εύρος θερμοκρασίας κοντά στην περιοχή ενδιαφέροντος. Εφαρμόζοντας εν συνεχεία αναδρομική διαδικασία (2.29) υπολογίζεται η ακολουθία CAE και επαναλαμβάνεται δοκιμή Metropolis στις παραγόμενες θερμοκρασίες για την εύρεση των κανονικών χρόνων συσχέτισης [128]. Αυτή η πρακτική εφαρμόζεται σε συστήματα για τα οποία η DOS δεν είναι γνωστή εκ των προτέρων.

CEI

Η δεύτερη μέθοδος επιβάλλει σταθερή αύξηση της εντροπίας μεταξύ διαδοχικών θερμοκρασιών (CEI). Ακολουθώντας τη διαδικασία του Sabo [154] συμβολίζονται οι M θερμοκρασίες της CEI ακολουθίας με $(T_m; m = 1, \dots, M)$ και την ολική αύξηση της εντροπίας από T_1 ως T_M με ΔS . Οι επόμενες θερμοκρασίες προσδιορίζονται ξεκινώντας από την T_1 από την παρακάτω σχέση:

$$\int_{T_m}^{T_{m+1}} dT \frac{C_u(T)}{T} = \frac{\Delta S}{(M-1)} \quad (2.31)$$

όπου η ειδική θερμότητα C_u υπολογίζεται από προκαταρκτικές δοκιμές (Metropolis ή PT) και μια απλή μέθοδο ιστογράμματος [128, 174], παρόμοιες με αυτές που απαιτεί η CAE, όπου και από μια τελική δοκιμή Metropolis εξάγονται οι αντίστοιχοι κανονικοί χρόνοι συσχέτισης.

Στον πίνακα 2.1 παρουσιάζονται για τις CAE και CEI μεθόδους επιλογής θερμοκρασιών οι αντίστοιχες ακολουθίες, οι κανονικοί χρόνοι συσχέτισης και οι λόγοι αποδοχής ανταλλαγής μεταξύ γειτονικών αντιγράφων. Ως συνήθως ορίζουμε την κλίμακα της θερμοκρασίας θέτοντας την αλληλεπίδραση ανταλλαγής του μοντέλου Ising $J/k_B = 1$. Οι κανονικοί χρόνοι συσχέτισης εκτιμήθηκαν από την διακριτή μορφή της συνάρτησης αυτοσυσχέτισης της ενέργειας όπως περιγράφεται στην [128] και είναι εκφρασμένοι σε μονάδες αριθμού σάρωσης πλέγματος δηλαδή $N = 50^2$ απόπειρες Metropolis αναστροφής σπιν. Το κέντρο του εύρους θερμοκρασιών είναι κοντά στην ψευδοκρίσιμη θερμοκρασία της ειδικής θερμότητας και της μαγνητικής επιδεικτικότητας του $L = 50$ τετραγωνικού

Πίνακας 2.1: Ακολουθίες θερμοκρασιών (T) για την χρήση τους σε σχήματα PT. Οι κανονικοί χρόνοι συσχέτισης (τ) σε μονάδες σάρωσης πλέγματος και οι αντίστοιχοι λόγοι αποδοχής (r). Οι στήλες 1, 2 και 3 αφορούν την CAE και οι 4, 5 και 6 την CEI. Το θερμοκρασιακό εύρος είναι περίξ του ψευδοκρίσιμου σημείου του $L = 50$ τετραγωνικού μοντέλου Ising.

CAE			CEI		
T	τ	r	T	τ	r
1.9200	3.0	0.499	1.9200	3.0	0.361
1.9669	3.0	0.500	1.9825	3.0	0.403
2.0121	3.0	0.501	2.0375	3.6	0.428
2.0557	3.9	0.499	2.0875	4.0	0.452
2.0975	4.0	0.498	2.1325	4.8	0.480
2.1377	5.0	0.501	2.1725	6.2	0.509
2.1757	6.4	0.500	2.2075	10.0	0.551
2.2115	9.5	0.501	2.2375	13.7	0.594
2.2446	19.5	0.501	2.2625	25.6	0.607
2.2751	32.6	0.501	2.2850	39.0	0.617
2.3050	33.1	0.500	2.3075	31.3	0.601
2.3374	19.1	0.500	2.3325	20.3	0.572
2.3746	9.8	0.500	2.3625	11.2	0.531
2.4167	6.3	0.500	2.4000	7.3	0.519
2.4631	5.0	0.500	2.4425	5.6	0.489
2.5134	4.1	0.500	2.4925	4.5	0.447
2.5680	4.0	0.500	2.5525	4.0	0.434
2.6268	3.8	0.500	2.6200	3.9	0.410
2.6903	3.0	2.6975	3.0

μοντέλου Ising και περιέχει το ακριβές κρίσιμο σημείο του μοντέλου. Και στις δύο ακολουθίες οι θερμοκρασίες είναι πιο πυκνές κοντά στο μέγιστο της ειδικής θερμότητας με την CEI να είναι πολύ πιο πυκνή στο κέντρο.

Σημειώνεται ότι για τη μέθοδο CAE ξεκινάμε από την ελάχιστη θερμοκρασία (T_1) και ανεβαίνουμε βρίσκοντας τις επόμενες θερμοκρασίες, ώστε να υπάρχει ο προεπιλεγμένος λόγος αποδοχής ανταλλαγής (r), μέχρι να φτάσουμε στο επιθυμητό όριο (T_M). Για την κατασκευή του πίνακα 2.1 για την CAE χρησιμοποιήθηκαν οι τιμές $T_1 = 1.9200$, $r = 0.5$ και $T_M = 2.6903$ με πλήθος θερμοκρασιών $M = 19$. Στην [21] οι Bittner

κ.α. προτείνεται η τιμή $r = 0.5$, εξ' άλλου στην [152] προτείνεται η $r = 0.3874$. Ελέγχθηκαν διάφορες τιμές r σε δοκιμές που έγιναν για πλέγμα $L = 20$ και δεν προέκυψαν ουσιώδεις διαφορές. Για να είναι δίκαιη η σύγκριση επιλέχθηκε στην CEI $T_1 = 1.9200$ $T_M = 2.6975$ και ο ίδιος αριθμός αντιγράφων $M = 19$.

2.5.3 Μέθοδος ανταλλαγής αντιγράφων

Σε κάθε διαδικασία PT αναμιγνύονται τοπικές κινήσεις σε κάθε θερμοκρασία με απόπειρες αμοιβαίας θερμοκρασιακής ανταλλαγής μεταξύ αντιγράφων, κάτι που δίνει την δυνατότητα εργοδικού περιπάτου στον θερμοκρασιακό χώρο μεταφέροντας πληροφορία μεταξύ υψηλότερης και χαμηλότερης θερμοκρασία. Παρουσιάζονται εν συνεχεία αρχικά παραλλαγές της μεθόδου ανταλλαγής γειτονικών αντιγράφων NN και κατόπιν οι μέθοδοι ανταλλαγής όλων των ζευγών (all-pair exchange) APE.

Ανταλλαγή γειτονικών αντιγράφων - NN

Σε πρωτόκολλο ανταλλαγής πρώτων γειτόνων NN οι ανταλλαγές προτείνονται μόνο σε διπλανές θερμοκρασίες. Δεδομένου ότι έχουμε M αντίγραφα και άρα θερμοκρασίες, υπάρχουν $M - 1$ δυνατές προτάσεις οι οποίες συμβολίζονται μοναδικά από τον δείκτη της χαμηλότερης θερμοκρασίας $i = 1, \dots, M - 1$. Ακολουθώντας τους Brenner κ.α. [26], συμβολίζεται μία ρέπλικα πριν την απόπειρα ανταλλαγής $A = \{x_1, x_2, \dots, x_i, x_{i+1}, \dots, x_M\}$, όπου x_i είναι το αντίγραφο στην θερμοκρασία T_i . Κατόπιν μια απόπειρα NN ανταλλαγής συμβολίζεται $A \rightarrow B$ όπου $B = \{x_1, x_2, \dots, x_{i+1}, x_i, \dots, x_M\}$. Η πιθανότητα επιτυχούς ανταλλαγής $P_{acc}(A \rightarrow B)$ δίνεται τυπικά από την αντίστοιχη μορφή της εξίσωσης Metropolis εξ.(2.30) $p(x_i \leftrightarrow x_{i+1})$. Η πρόταση (επιλογή) ενός ζεύγους αντιγράφων γίνεται με την ίδια πιθανότητα για όλες τις πιθανές ανταλλαγές: $P_{gen}(A \rightarrow B) = P_{gen}(B \rightarrow A) = 1/(M - 1)$ έτσι ικανοποιείται το λεπτομερές ισοζύγιο: $P(A)P_{gen}(A \rightarrow B)P_{acc}(A \rightarrow B) = P(B)P_{gen}(B \rightarrow A)P_{acc}(B \rightarrow A)$. Η κατανομή πιθανότητας του γινομένου $P(A) = \rho(x_1)\rho(x_2)\dots\rho(x_M)$ είναι στάσιμη. Στη συνέχεια ορίζονται τέσσερις παραλλαγές την NN διαδικασίας: $[NN_a, NN_b, NN_c, \text{ και } NN_d]$ οι οποίες συμμετείχαν στην σύγκριση. Στην NN_a παράγεται μια τυχαία μεταθέση της ακολουθίας θερμοκρασιών (πχ j_1, \dots, j_{M-1}) η οποία χρησιμοποιείται στη συνέχεια στον κύκλο ανταλλαγής $M - 1$ προσπαθειών. Έτσι οι κινήσεις ανταλλαγής είναι ομαδοποιημένες σε κύκλους $M - 1$ προσπαθειών. Στη μέθοδο NN_b επιλέγεται τυχαία ένα ζεύγος θερμοκρασιών. Έτσι σε ένα κύκλο ανταλλαγής $M - 1$ επιλογών, είναι δυνατή

η πολλαπλή επιλογή του ίδιου ζεύγους. Στην NN_c η διαδικασία είναι εντελώς προκαθορισμένη, όπου κάθε κύκλος αποτελείται από δύο υποκύκλους οι οποίοι εναλλάσσονται διαδοχικά τα μονά ζεύγη $i = 1, 3, \dots$ με τα ζυγά ζεύγη $i = 2, 4, \dots$ σε αύξουσα σειρά. Τέλος στην NN_d οι παραπάνω μονές και ζυγές ακολουθίες είναι τυχαία μετατεθειμένες.

Ανταλλαγή μεταξύ όλων των ζευγαριών - APE

Στις μεθόδους APE τα ζεύγη ανταλλαγής αντιγράφων μπορούν να αποτελούνται από γειτονικά ή όχι αντίγραφα ($x_i \leftrightarrow x_j$). Το πλήθος των δυνατών ανταλλαγών $A \rightarrow B$ είναι $M(M-1)/2$.

$$\begin{aligned} A &= \{x_1, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_M\} \\ B &= \{x_1, \dots, x_j, \dots, x_i, \dots, x_M\} \end{aligned}$$

Στην απλούστερη περίπτωση ένα ζεύγος (x_i, x_j) επιλέγεται τυχαία από το σύνολο $M(M-1)/2$ όλων των διαφορετικών ζευγών. Έτσι η παραγωγή απόπειρας ανταλλαγής (P_{gen}) γίνεται ισοπίθانا $P_{gen}(A \rightarrow B) = P_{gen}(B \rightarrow A) = 1/[M(M-1)/2]$ και αν ο κανόνας αποδοχής / απόρριψης $p(x_i \leftrightarrow x_j)$ ακολουθεί τον κανόνα Metropolis (2.8) οι απόπειρες ικανοποιούν το λεπτομερές ισοζύγιο. Αυτή η APE μέθοδος θα συμπεριληφθεί στις δοκιμές και συμβολίζεται ως APE_M .

Στη συνέχεια παρουσιάζονται οι κινητικές μέθοδοι MC APE που προτάθηκαν από τον Calvo [28] και τον Brenner κ.α. [26]. Η μέθοδος APE του Calvo [28] προσπαθεί να προσαρμόσει την ιδέα του κινητικού MC 2.3.2 στην διαδικασία ανταλλαγής αντιγράφων PT. Ακολουθώντας την ορολογία των Brenner κ.α. [26], έστω Φ το σύνολο των μακροκαταστάσεων (κατανομές των αντιγράφων) $B = \{x_1, x_2, \dots, x_j, \dots, x_i, \dots, x_{M-1}, x_M\}$ στις οποίες μπορεί να καταλήξει η τρέχουσα μακροκατάσταση $A = \{x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_{M-1}, x_M\}$ από μια ανταλλαγή ενός ζεύγους αντιγράφων (γειτονικών ή μη) ($x_i \leftrightarrow x_j$). Το σύνολο αυτό περιγράφει όλες τις δυνατές μεταβάσεις $A \rightarrow B$ σε μια καινούργια κατάσταση. Παρ' όλα αυτά ο Calvo συμπεριλαμβάνει την πιθανότητα να μην προταθεί ανταλλαγή, ή αλλιώς ($A \rightarrow A, j = 0$), για την οποία η πιθανότητα αποδοχής είναι $P_{acc}(A \rightarrow A) = 1$. Οι πιθανότητες [26, 28] επιλογής δίνονται από την:

$$P_j = P_{acc}(A \rightarrow C) / [1 + \sum_{M \in \Phi} P_{acc}(A \rightarrow M)], \quad (2.32)$$

όπου C είναι είτε η A είτε η B . Το ενδεχόμενο i επιλέγεται και επιβάλλεται η ανταλλαγή από το σύνολο των $j = 0, 1, 2, \dots, K$ χρησιμοποιώντας την αθροιστική συνάρτηση Q_m η οποία προκύπτει από τις πιθανότητες επιλογής. Ισχύει η συνθήκη $Q_{i-1} < R \leq Q_i$ όπου $Q_m = \sum_{j=1}^m P_j$.

Η επιβολή χρονικών βαρών όπως γίνεται στην κλασική κινητική μέθοδο MC δεν ενδείκνυται στα σχήματα PT [28]. Αντί αυτών συμπεριλήφθηκε η επιλογή παραμονής στην ίδια μακροκατάσταση $j = 0$. Οι Brenner κ.ά. σε επόμενο άρθρο [26] έδειξαν ότι η μέθοδος του Calvo παραβιάζει τη συνθήκη λεπτομερούς ισοζυγίου. Πιο συγκεκριμένα οι μακροκαταστάσεις Φ οι οποίες είναι προσβάσιμες από την A δεν είναι οι ίδιες με τις αντίστοιχες Ψ οι οποίες είναι προσβάσιμες από την B . Έτσι η πιθανότητα πρότασης (generation probability) η οποία είναι ο αντίστροφος του παρονομαστή της (2.32) $P_{gen}(A \rightarrow B) = [1 + \sum_{M \in \Phi} P_{acc}(A \rightarrow M)]^{-1}$ για τη μετάβαση $A \rightarrow B$ είναι εν γένει διαφορετική από την $P_{gen}(B \rightarrow A) = [1 + \sum_{L \in \Psi} P_{acc}(B \rightarrow L)]^{-1}$ της μετάβασης $B \rightarrow A$. Οπότε η συνθήκη λεπτομερούς ισοζυγίου της οποίας η έκφραση είναι: $P(A)P_{gen}(A \rightarrow B)P_{acc}(A \rightarrow B) = P(B)P_{gen}(B \rightarrow A)P_{acc}(B \rightarrow A)$ δεν ικανοποιείται.

Για να ξεπεραστεί το παραπάνω πρόβλημα οι Brenner κ.ά. πρότειναν στην [26] (AP_{EB}) μια αναθεωρημένη έκδοση της μεθόδου κατά την οποία οι πιθανότητες προτάσεων αντικαθίστανται από τις

$$P_{gen}(A \rightarrow B) = 1/\max \left\{ \sum_{M \in \Phi} P_{acc}(A \rightarrow M), \sum_{L \in \Psi} P_{acc}(B \rightarrow L) \right\} \quad (2.33)$$

και άρα ικανοποιείται το λεπτομερές ισοζύγιο $P_{gen}(A \rightarrow B) = P_{gen}(B \rightarrow A)$ [26]. Η διαδικασία ανταλλαγών PT της μεθόδου αφορά τις $K = M(M-1)/2$ της μορφής $A \rightarrow B \neq A$ ($i = 1, 2, \dots, K$) και οι πιθανότητες επιλογής δίνονται από την

$$P_j = P_{acc}(A \rightarrow B)P_{gen}(A \rightarrow B) \quad (2.34)$$

όπου $P_{acc}(A \rightarrow B)$ είναι ο αντίστοιχος λόγος αποδοχής PT $p(x_i \leftrightarrow x_j)$ όπως εκφράζεται στην (2.30). Η πιθανότητα πρότασης $P_{gen}(A \rightarrow B)$ δίνεται από την (2.33). Η επιλογή της μακροκατάστασης από το σύνολο $j = 1, 2, \dots, K$ γίνεται επίσης μέσω της αθροιστικής συνάρτησης Q_m η οποία προκύπτει από τις πιθανότητες επιλογής. Ισχύει η συνθήκη $Q_{i-1} < R \leq Q_i$, όπου $Q_m = \sum_{j=1}^m P_j$. Ο αλγόριθμος δεν περιλαμβάνει ρητά τη δυνατότητα παραμονής στην τρέχουσα κατάσταση. Παρ' όλα αυτά αυτό μπορεί να συμβεί όταν ισχύει η λιγότερο πιθανή περίπτωση $Q_K = \sum_i P_i < 1$. Η απουσία όμως και σε αυτήν τη μέθοδο χρονικών βαρών στην άθροιση, όπως αξιώνει η κινητική διαδικασία άθροισης MC,

αποτελεί ένα σοβαρό μειονέκτημα της μεθόδου. Ένα επιπλέον πρόβλημα της μεθόδου των Brenner κ.ά. αποτελεί η απαίτηση επαναυπολογισμού όλων των πιθανοτήτων αποδοχής το οποίο είναι πολύ χρονοβόρο. Στη συνέχεια θα αναφερθεί μια τεχνική την οποία προτείνουμε ώστε να υπολογίζονται μόνο κοντινές ανταλλαγές, αφού οι μακρινές ανταλλαγές έχουν σχεδόν μηδενική πιθανότητα αποδοχής.

2.5.4 Στοιχειώδεις βήμα και αλγόριθμοι τοπικών κινήσεων

Προχωρούμε στην περιγραφή ενός βήματος παράλληλης θερμοποίησης ή PTS ως στοιχειώδους βήματος MC κατά το οποίο γίνεται η καταμέτρηση - άθροιση της διαδικασίας προσομοίωσης. Ένα PTS αποτελείται από $M - 1$ προτάσεις ανταλλαγής αντιγράφων και χρησιμοποιούμε αυτόν τον ορισμό τόσο στα σχήματα ανταλλαγής γειτόνων NN όσο και στα σχήματα APE για διευκόλυνση της σύγκρισης. Μετά από κάθε προσπάθεια ανταλλαγής πραγματοποιούνται $n(T_i)$ τοπικές κινήσεις (Metropolis, cluster, BKL ...) σε όλα τα αντίγραφα. Ο $n(T_i)$ εξαρτάται από την θερμοκρασία κάθε αντιγράφου. Ο αριθμός τοπικών κινήσεων για μια θερμοκρασία T_i σε ένα PTS είναι $N_{local}(T_i) = (M - 1)n(T_i)$. Είναι βολικό να ορίσουμε $N_{local}(T_i) = f(T_i)\tau(T_i)N$, όπου $N = L^D$ είναι το πλήθος των πλεγματοειδών θέσεων του συστήματος, $\tau(T_i)$ είναι οι κανονικοί χρόνοι συσχέτισης και $f(T_i)$ είναι συντελεστές για την διευκόλυνση της ρύθμισης των τοπικών χρόνων $n(T_i)$ ανάλογα με τον τοπικό αλγόριθμο ή και το σύστημα. Σε μια κλασική εφαρμογή Metropolis $N_{local} = N$ που αντιστοιχεί σε μία πλεγματοειδή σάρωση.

Ο αρχικός αριθμός PTS χρησιμοποιείται για την ισορρόπηση του συστήματος κατά την οποία δεν γίνεται καταγραφή δεδομένων. Ο αριθμός αυτός καλείται χρόνος ισορρόπησης (t_{eq}). Ακολουθεί ο χρόνος άθροισης t_{av} ο οποίος τυπικά είναι πολλαπλάσιος του t_{eq} και όπου εκτελείται η καταγραφική διαδικασία. Επιπλέον πραγματοποιούμε αρκετές ανεξάρτητες επαναλήψεις N_r , δίνοντας την δυνατότητα ελέγχου της ακρίβειας και αποδοτικότητας των δοκιμών μας. Για την επίτευξη αξιόπιστων συγκρίσεων προσπαθήσαμε να έχουμε κοντινούς υπολογιστικούς χρόνους (CPU time) προσαρμόζοντας κατάλληλα τα $N_{local}(T)$, t_{eq} , t_{av} , και N_r .

2.5.5 Σύγκριση στο 2d πρότυπο Ising

Παρουσιάζονται στη συνέχεια οι δοκιμές που έγιναν στο $L = 50$ τετραγωνικό απλό μοντέλο Ising με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Υλοποιήθηκαν μια σειρά από σχήματα PT αναμιγνύοντας διαδικασίες που

περιγράψαμε παραπάνω. Χρησιμοποιώντας την αναλυτική πυκνότητα καταστάσεων (DOS) από την [11], υπολογίζουμε τις τιμές της ειδικής θερμότητας στις αντίστοιχες θερμοκρασίες των σχημάτων PT και από εκεί τα αντίστοιχα σφάλματα.

$$\epsilon(T_i) = [C_{exact}(T_i) - C_{PT}(T_i)]/C_{exact}(T_i), \quad (2.35)$$

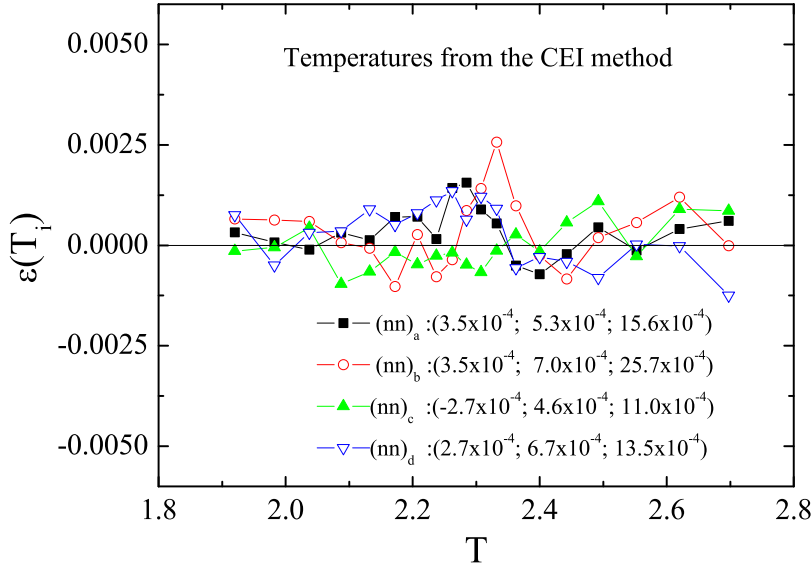
$$\bar{\epsilon} = \sum_{i=1}^M \epsilon(T_i)/M, \quad (2.36)$$

$$\hat{\epsilon} = \sum_{i=1}^M |\epsilon(T_i)|/M, \quad (2.37)$$

$$\epsilon^* = \max(|\epsilon(T_i)|), \quad (2.38)$$

Η πρώτη δοκιμή αφορά τα σχήματα ανταλλαγής πρώτων γειτόνων NN_a , NN_b , NN_c , και NN_d § 2.5.3. Στο σχήμα 2.1 παρατίθενται τα σφάλματά τους $\epsilon(T_i)$ και στο ένθεμα με παρενθέσεις δίνονται τα σφάλματά τους $\bar{\epsilon}, \hat{\epsilon}$, και ϵ^* όπως ορίστηκαν παραπάνω. Χρησιμοποιήθηκαν $N_r = 200$ ανεξάρτητες δοκιμές και $t_{eq} = 3N$, $t_{av} = 15N$ και $N_{local}(T) = N$. Ο αλγόριθμος Metropolis χρησιμοποιήθηκε για τις τοπικές κινήσεις. Η ακρίβεια όλων των μεθόδων είναι εξαιρετική και δεν εμφανίζεται αξιοσημείωτη διαφορά μεταξύ τους λόγω του ότι γίνεται καλή ανάμειξη μεταξύ των αντιγράφων και από τις τέσσερις μεθόδους. Για τον λόγο αυτό χρησιμοποιείται ο αλγόριθμος NN_a στη συνέχεια.

Στη συνέχεια ελέγχεται η απόδοση των CAE και CEI όπως και οι NN με τους APE. Στο σχήμα 2.2 δείχνουμε την συμπεριφορά δύο πρωτοκόλλων NN και δύο APE χρησιμοποιώντας τις CEI και CAE θερμοκρασιακές ακολουθίες. Χρησιμοποιήθηκαν οι ίδιες $[N_r, t_{eq}, t_{av}, N_{local}(T)]$ παράμετροι με την παραπάνω δοκιμή. Τα πρωτόκολλα NN αποδίδουν εξαιρετικά συγκρινόμενα με τα APE. Οι αλγόριθμοι CAE και CEI έχουν παρόμοια ακρίβεια. Η APE_B δίνει πολύ μεγάλα σφάλματα τα οποία οξύνονται όσο πλησιάζουμε στην κορυφή της ειδικής θερμότητας. Προφανώς η έλλειψη χρονικών βαρών της APE_B οδηγεί σε μεγαλύτερη συχνότητα μακρινότερων ανταλλαγών μην αφήνοντας το σύστημα να ισορροπήσει. Από την άλλη μεριά η APE_M (η απλούστερη APE μέθοδος) έχει πολύ καλή συμπεριφορά. Πρέπει να σημειωθεί επίσης ότι λόγω του υπολογισμού των (2.33) και (2.34) η APE_B χρειάζεται διπλάσιο υπολογιστικό χρόνο από την APE_M για τον ίδιο αριθμό PTS. Αυτό μπορεί όμως να βελτιωθεί δραματικά λαμβάνοντας υπ'όψιν ότι για ένα μικρό

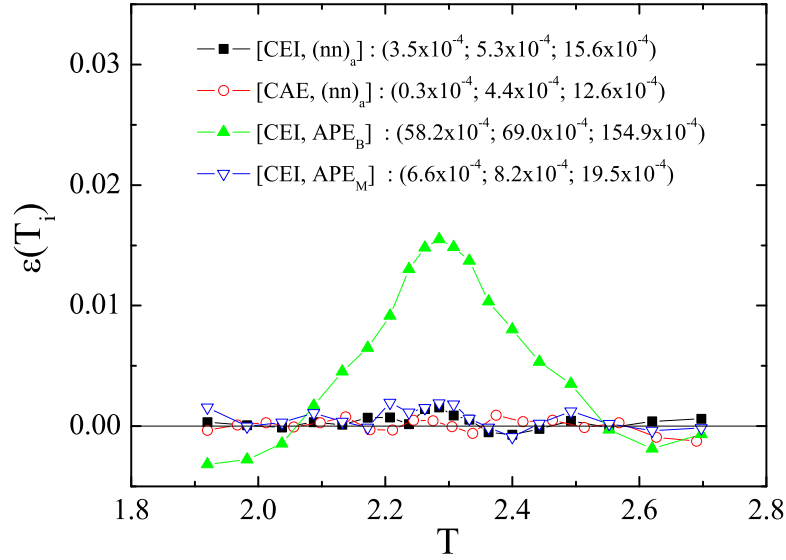


Σχήμα 2.1: Σφάλμα της ειδικής θερμότητας για πρωτόκολλα PT ανταλλαγής κοντινότερων γειτόνων NN . Χρησιμοποιήθηκε η CEI για την επιλογή θερμοκρασιών με τις τιμές του πίνακα 2.1. Τα σφάλματα δίνονται στις παρενθέσεις σαν $\bar{\epsilon}$, $\hat{\epsilon}$ και ϵ^*

υποσύνολο κοντινών αντιγράφων παίρνουμε μη αμελητέες πιθανότητες.

Για να παρατηρηθούν τα χαρακτηριστικά διάδοσης των πρωτοκόλλων PT ορίζεται για κάθε θερμοκρασία ο λόγος των αντιγράφων ανάλογα με το ποιος από τις δύο ακραίες θερμοκρασίες έχουν επισκεφθεί πιο πρόσφατα. Σημειώνουμε με *up* ή *down* κάθε αντίγραφο όταν επισκέπτεται τη μέγιστη (T_M) ή ελάχιστη θερμοκρασία (T_1) αντίστοιχα. Στη συνέχεια καταγράφονται τα ιστογράμματα $n_{up}(T_i)$ και $n_{down}(T_i)$ τα οποία αυξάνονται κατά ένα όταν υπάρχει επιτυχής ανταλλαγή με τη μέγιστη ή ελάχιστη θερμοκρασία αντίστοιχα.

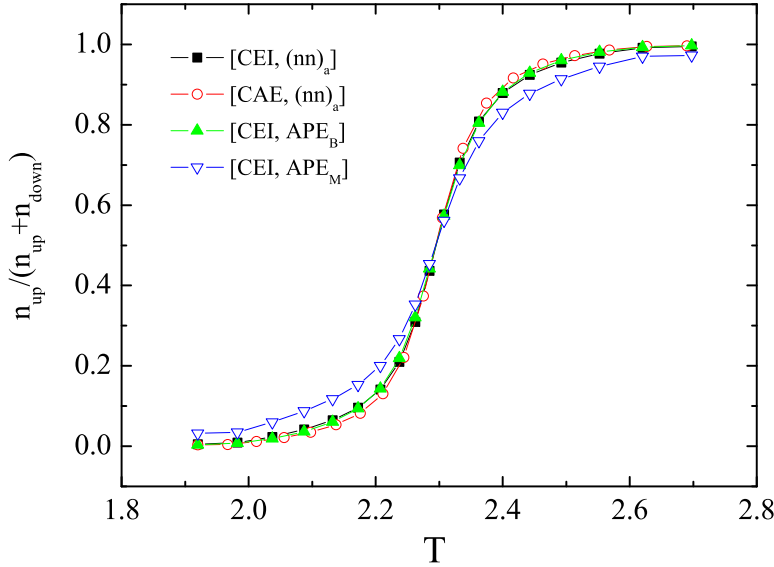
Το κλάσμα διάδοσης (diffusion fraction) $n_{up}(T_i)/(n_{up}(T_i) + n_{down}(T_i))$ παρουσιάζεται στο σχήμα 2.3 και αφορά τα ίδια πρωτόκολλα του σχήματος 2.2. Αντίστοιχες ποσότητες υπάρχουν στις αναφορές [21, 84]. Οι τέσσερις μέθοδοι δείχνουν κοινή συμπεριφορά με απότομη πτώση κοντά στο ψευδοκρίσιμο σημείο. Δεν παρατηρείται άρα εμφανής βελτίωση στην διάδοση των αντιγράφων στις κινητικές APE μεθόδους MC [26, 28] οι οποίες είναι και μεταξύ τους παρόμοιες. Επίσης παρατηρείται συ-



Σχήμα 2.2: Σφάλματα ειδικής θερμότητας για τα τέσσερα πρωτόκολλα. Τα πρώτα δύο χρησιμοποιούν NN_a ενώ τα υπόλοιπα APE_M και APE_B §2.5.3. Η μέθοδος επιλογής θερμοκρασιών και τα αντίστοιχα σφάλματα παρατίθενται στον πίνακα 2.1.

γκρίσιμη συμπεριφορά στις μεθόδους CAE και CEI. Αυτό μπορεί να εξηγηθεί από τα ευρήματα της αναφοράς [152] (βλ. σχήμα 1 §V και στα συμπεράσματα) κατά την οποία μικρές μεταβολές στους λόγους αποδοχής (r) δεν αλλάζει σημαντικά την απόδοση του PT αρκεί να παραμένει ο r στο εύρος βέλτιστης απόδοσης.

Η επόμενη δοκιμή του σχήματος 2.4, επιβεβαιώνει την σημαντική παρατήρηση των Bittner κ.ά. [21]. Προσαρμόζοντας τον χρόνο τοπικών κινήσεων στους κανονικούς χρόνους συσχέτισης βλέπουμε ισχυρή επίδραση στο κλάσμα διάδοσης. Τα τρία πρωτόκολλα χρησιμοποιούν τη μέθοδο CEI με $t_{eq} = 3N$ και $t_{av} = 15N$ και αντιστοιχούν σε τοπικούς χρόνους $N_{local}(T) = N$, $N_{local}(T) = 0.25\tau(T)N$ και $N_{local}(T) = \tau(T)N$. Ο αριθμός ανεξάρτητων δοκιμών προσαρμόστηκε κατάλληλα σε $N_r = 200$, 80 και $N_r = 20$ όπως φαίνεται και στο υπόμνημα του σχήματος ($[CEI200, NN_a]$, $[CEI80, NN_a]$ και $[CEI20, NN_a]$ αντίστοιχα). Οι χρόνοι $\tau(T)$ πάρθηκαν από τον πίνακα 2.1 και έχει περίπου μέση τιμή 10. Στη συνέχεια στο σχήμα 2.5 αναπαρήχθησαν τα σχήματα $[CEI200, NN_a]$ και $[CEI20, NN_a]$ του σχήματος 2.4 αλλά χρησιμοποιώντας την θερμο-



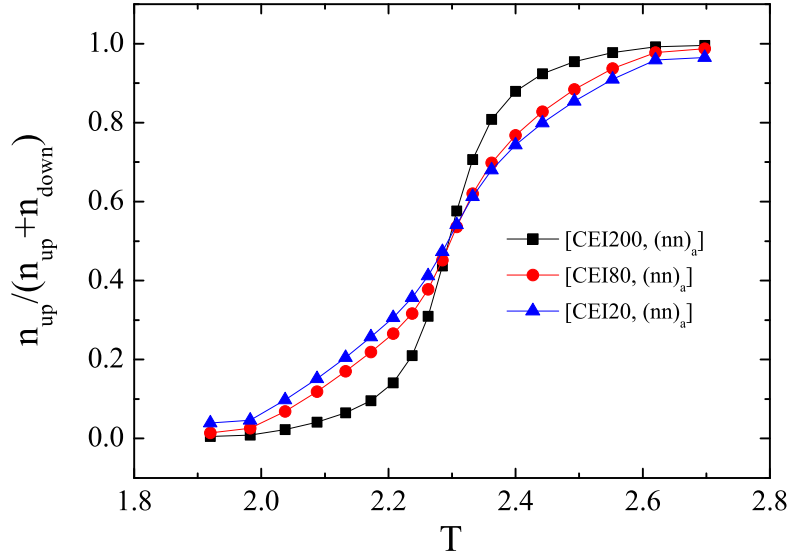
Σχήμα 2.3: Χαρακτηριστικά διάδοσης σχημάτων PT. Το κλάσμα $n_{up}(T_i)/(n_{up}(T_i) + n_{down}(T_i))$ έχει οριστεί στο κείμενο. Τα τέσσερα PT πρωτόκολλα είναι τα αυτά του σχήματος 2.2.

κρασιακή ακολουθία CAE. Ενισχύεται περαιτέρω η παρατήρηση ότι η επιλογή κατάλληλου τοπικού χρόνου βελτιώνει δραματικά την απόδοση του σχήματος.

Εναλλακτική ποσότητα για την απόδοση ενός σχήματος PT είναι ο μέσος αριθμός PTS που χρειάζεται για να μεταφερθεί ένα αντίγραφο από τη μέγιστη θερμοκρασία στην ελάχιστη u (ή το αντίστροφο d). Επειδή υπάρχει μεγάλη διακύμανση των u_j, d_j στο σύνολο των M αντιγράφων και των ανεξάρτητων δοκιμών ($j = 1, 2, \dots, N_r$) παρατίθενται οι κινούμενοι αθροιστικοί μέσοι:

$$[(u + d)/2]_k = \sum_{j=1}^k ((u_j + d_j)/2)/k, \quad (2.39)$$

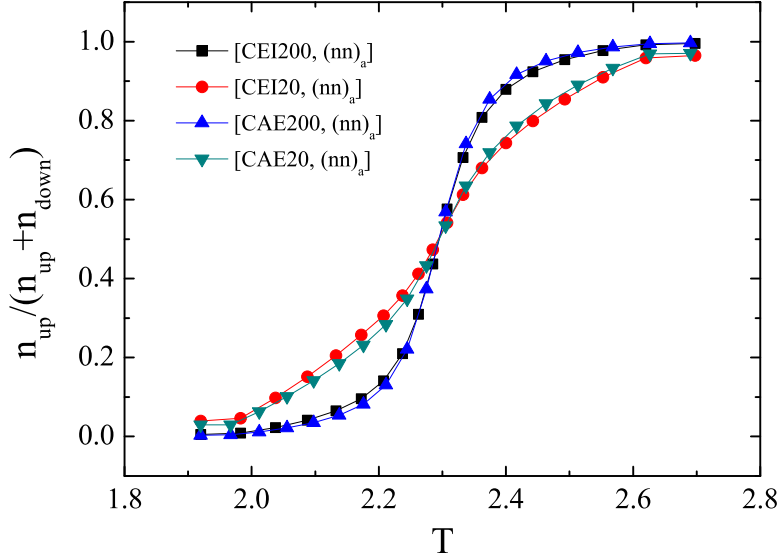
όπου $k = 1, 2, \dots, N_r$ αναφέρονται επίσης στους κινούμενους αθροιστικούς μέσους $[u]_k/[d]_k$. Το σχήμα 2.6 δείχνει καθαρά ότι υπάρχει, όπως έχει επισημανθεί και προηγουμένως, ισχυρή επίδραση του χρόνου τοπικών κινήσεων και επιβεβαιώνεται ότι πρέπει να ακολουθεί τον κανονικό χρόνο συσχέτισης. Επίσης φαίνεται για ακόμα μια φορά ότι η μέθοδος



Σχήμα 2.4: Το σχήμα δείχνει τη μεταβολή στο κλάσμα διάδοσης την οποία προκαλεί η προσαρμογή στους τοπικούς χρόνους όπως προτείνει οι Bittner κ.ά. [21]. Τα τρία πρωτόκολλα χρησιμοποίησαν την μέθοδο CEI και αντιστοιχούν σε χρόνους $N_{local}(T) = N$, $N_{local}(T) = 0.25\tau(T)N$ και $N_{local}(T) = \tau(T)N$ και οι αντίστοιχοι αριθμοί ανεξάρτητων δοκιμών είναι $N_r = 200, 80, 20$.

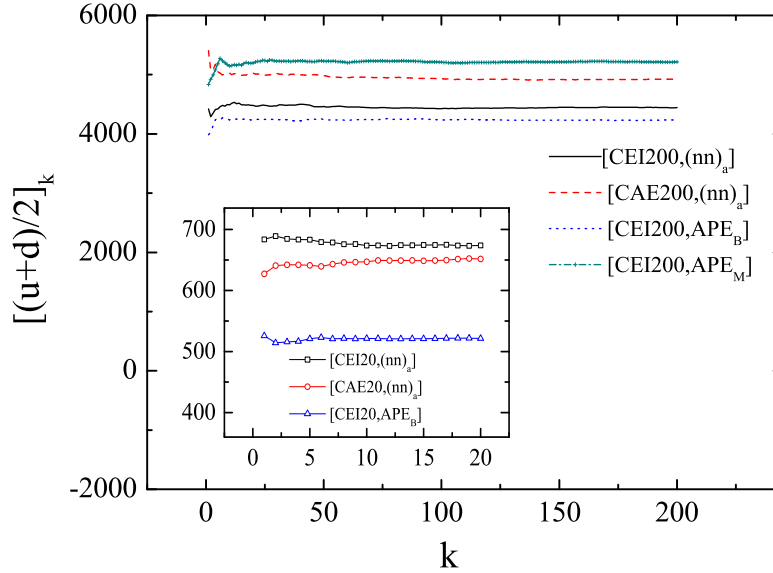
επιλογής θερμοκρασιών είναι μικρής σημασίας. Δεδομένου ότι η μέθοδος APE_B είχε μεγάλα σφάλματα στην ειδική θερμότητα (σχ. 2.2), η μικρή υπεροχή που επιδεικνύει εδώ δεν μπορεί να ανατρέψει την εικόνα της. Παρατηρήθηκε επίσης ότι ο λόγος $[u]/[d]$ δεν τείνει στη μονάδα δηλαδή, εξαρτάται από τις παραμέτρους υλοποίησης και κυρίως από την επιλογή των ακραίων θερμοκρασιών. Τα παραπάνω ευρήματα εγείρουν την ερώτηση σχετικά με τη σημασία του αλγόριθμου για την επίτευξη τοπικών κινήσεων. Για τον λόγο αυτό εξετάζουμε στη συνέχεια δύο αλγόριθμους τοπικών κινήσεων εκτός του Metropolis. Ο ένας είναι ο cluster αλγόριθμος Wolff [128,174] (**W**), ο οποίος ως γνωστό έχει μικρό δυναμικό εκθέτη. Ο επόμενος είναι ο BKL ή n-fold way (§ 2.3.2).

Αφού έχει καταστεί σαφές ότι οι αλγόριθμοι επιλογής θερμοκρασιών είναι ισοδύναμοι, από δω και στο εξής χρησιμοποιούμε μόνο τον CAE και τον παραλείπουμε στην σημειογραφία. Έτσι τα σχήματα που εξετάζονται στη συνέχεια είναι τα $[BKL, NN_a]$, $[BKL, APE_B]$, $[W, NN_a]$



Σχήμα 2.5: Οι πρώτες δύο μέθοδοι CEI είναι οι ίδιες με αυτές του σχήματος 2.4, ενώ οι άλλες δύο είναι οι αντίστοιχες χρησιμοποιώντας το πρωτόκολλο CAE.

και $[W, APE_B]$. Στο σχήμα 2.7 παρουσιάζονται τα σφάλματα ειδικής θερμότητας των σχημάτων PT. Συγκρίνοντας τα δύο APE_B με τα αντίστοιχα του σχήματος 2.2 όπου χρησιμοποιήθηκε ο Metropolis, βλέπουμε καθαρά ότι υπάρχει σαφής βελτίωση ειδικά για το $[W, APE_B]$. Οι επιμέρους παράμετροι των σχημάτων είναι: $N_r = 200$ για όλες τις περιπτώσεις, για $[BKL, NN_a]$ και $[BKL, APE_B]$, $t_{eq} = 3N$, $t_{av} = 15N$, και $N_{local}(T) = (M - 1)n(T) = 0.216N$, ο οποίος αντιστοιχεί σε $n(T) = 30$ BKL αντιστροφές σπιν πριν κάθε κίνηση ανταλλαγής. Αυτή η επιλογή για τα πρωτόκολλα BKL καθιστά συγκρίσιμους τους υπολογιστικούς χρόνους με τα αντίστοιχα πρωτόκολλα με Metropolis. Όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως, η διαδικασία APE_B αναλώνεται αρκετά στον υπολογισμό των πιθανοτήτων (2.33) και (2.34) πριν από κάθε κίνηση ανταλλαγής αντιγράφου. Παρ' όλα αυτά είμαστε σε θέση να πετύχουμε συγκρίσιμους χρόνους με τις μεθόδους NN αγνοώντας ζεύγη ανταλλαγής με απόσταση μεγαλύτερη τέταρτων γειτόνων (4^{th} τάξης). Σημειώνουμε ότι το άθροισμα των πιθανοτήτων για τις τάξεις 5 – 8 είναι μόλις 0.074% και ανταλλαγές υψηλότερης τάξης δεν συμβαίνουν ποτέ. Οι πιθανότητες για τις τάξεις 1, 2, 3, 4 είναι 71.01%, 23.17%, 5.03%, και 0.72%

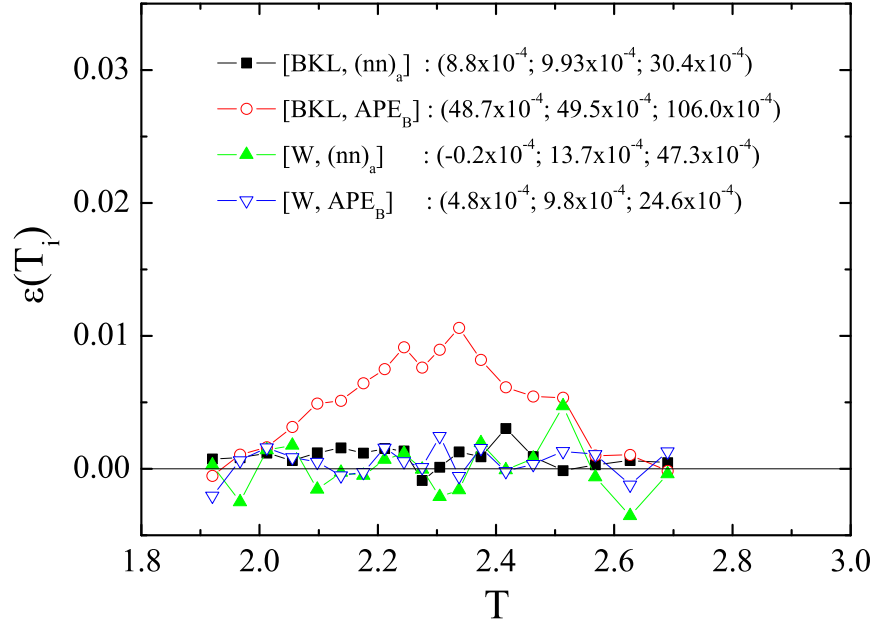


Σχήμα 2.6: Παρουσίαση της απόδοσης των σχημάτων PT χρησιμοποιώντας το μέτρο που ορίστηκε στην εξ. (2.39). Τα τέσσερα πρωτόκολλα του κύριου σχήματος έχουν τοπικούς χρόνους $N_{local}(T) = N$, ενώ τα τρία PT πρωτόκολλα του ένθετου σχήματος έχουν $N_{local}(T) = \tau(T)N$.

αντίστοιχα. Ο περιορισμός δεν επηρεάζει σχεδόν καθόλου την ακρίβεια της διαδικασίας, ενώ μειώνει αισθητά τον υπολογιστικό χρόνο. Για τις περιπτώσεις με τον αλγόριθμο BKL είχαμε $t_{eq} = 3N/50$, $t_{av} = N$ και $N_{local}(T) = (M - 1)n(T) = 0.0216N$, ο οποίος αντιστοιχεί σε $n(T) = 3$ αντιστροφές Wolff cluster μετά από κάθε απόπειρα ανταλλαγής αντιγράφου. Το αποτέλεσμα αυτό επιβεβαιώνει τον πολύ μικρό δυναμικό εκθέτη της μεθόδου Wolff σε σχέση με τις μεθόδους αντιστροφής ενός σπιν, Metropolis και BKL, δεδομένου ότι οι χρόνοι προσομοίωσης για όλες τις περιπτώσεις είναι παρόμοιοι.

Στο σχήμα 2.8 παρουσιάζουμε τη συμπεριφορά του λόγου διάδοσης για τα τέσσερα σχήματα PT. Ενώ τα πρωτόκολλα BKL παρουσιάζουν πολύ παρόμοια συμπεριφορά με τα πρωτόκολλα του σχήματος 2.3, τα σχήματα Wolff έχουν κοινή εικόνα με τα σχήματα Metropolis, όπου όμως οι τοπικοί χρόνοι σέβονταν τους αντίστοιχους κανονικούς χρόνους συσχέτισης, σχήματα 2.4 και 2.5. Σημειώνουμε επίσης τη θεαματική βελτίωση της διάδοσης με την χρήση του αλγόριθμου Wolff.

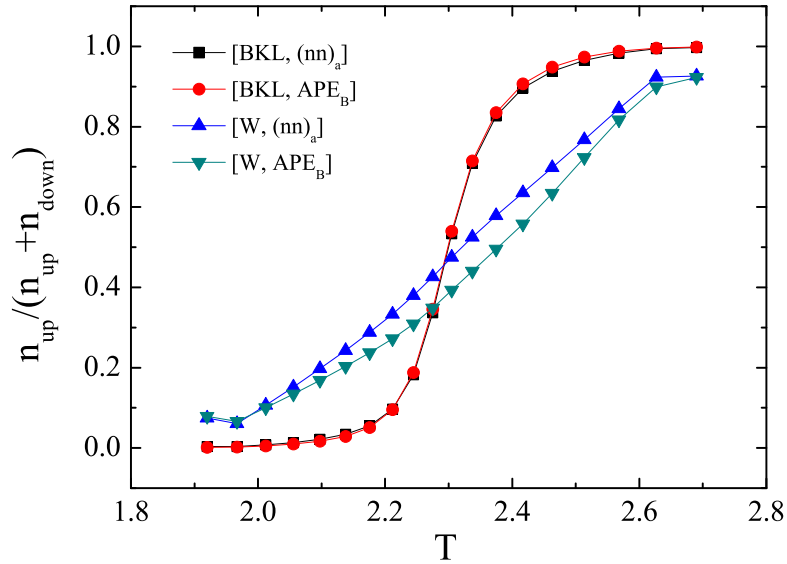
Το σχήμα PT όπου συνδυάστηκε η APE_B με την Wolff είναι εμφανώς



Σχήμα 2.7: Σφάλμα ειδικής θερμότητας για τα PT σχήματα του υπομονήματος. Οι θερμοκρασίες είναι οι CAE τιμές του πίνακα 2.1 Λεπτομέρειες περιέχονται στο κείμενο.

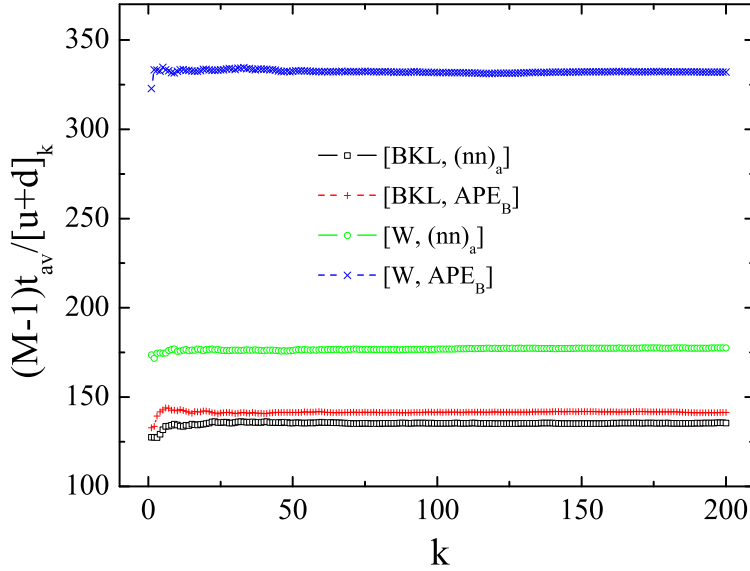
το καλύτερο, όπως φαίνεται καθαρά στο σχήμα 2.9. Λόγω του ότι οι χρόνοι t_{av} είναι διαφορετικοί για τα πρωτόκολλα BKL και Wolff σχεδιάστηκε στην 2.9 ο κινούμενος μέσος της ποσότητας $(M-1)t_{av}/[u+d]_k$, η οποία δίνει τον μέσο αριθμό περιηγήσεων (round-trip) ενός αντιγράφου και είναι μεγαλύτερη για τις αποδοτικότερες μεθόδους.

Φαίνεται λοιπόν ότι η APE_B μπορεί να ξεπεράσει τα προβλήματα που οδηγούσαν σε μεγάλα σφάλματα στην ειδική θερμότητα σχ.2.2. Αυτό αποτελεί πιθανή επιβεβαίωση της υπόθεσης του Calvo [28] ότι οι ανταλλαγές αντιγράφων μπορούν να θεωρηθούν σαν επιπλέον τοπικές κινήσεις οι οποίες όμως δεν καταγράφονται. Τα προβλήματα δηλαδή της APE_B προέρχονταν από την ανάγκη ισορρόπησης ειδικά μετά από μακρινές ανταλλαγές, την οποία η Wolff μπορεί να καλύψει πολύ γρήγορα λόγω του μικρού δυναμικού εκθέτη. Μικρότερη βελτίωση προσέφερε και η BKL μέθοδος στην APE_B λόγω της υπακοής στους κανονικούς χρόνους συσχέτισης (§2.3.2), οι οποίοι επιβάλουν καλύτερη οικονομία στους χρόνους μεταξύ των θερμοκρασιών και άρα ισορροπούν καλύτερα



Σχήμα 2.8: Κλάσμα διάδοσης για τα διάφορα σχήματα PT. Οι θερμοκρασίες επιλέχθηκαν από την ακολουθία CAE του πίνακα 2.1.

οι θερμοκρασίες που το χρειάζονται περισσότερο. Οι δοκιμές στο απλό τετραγωνικό μοντέλο Ising ανέδειξαν τα πλεονεκτήματα και τα ελαττώματα των διαφόρων συστατικών ενός σχήματος PT και έδειξαν το πώς πρέπει αυτά να συνδυάζονται. Απαιτητικότερη αλλά και ουσιαστικότερη πρόκληση είναι να εξεταστεί η επίδοσή τους σε δύσκολα προβλήματα στα οποία σπάνια γεγονότα επηρεάζουν σημαντικά τη στατιστική (π.χ. προβλήματα υαλώδους φάσης), στα οποία η κλασική δειγματοληψία MC αποτυγχάνει.



Σχήμα 2.9: Παρουσίαση του λόγου $(M - 1)t_{av}/[u + d]_k$, όπου $[u + d]_k$ είναι ο κινούμενος μέσος χρόνος περιήγησης (moving average round-trip time) ενός αντιγράφου στο πλήθος των k ανεξάρτητων δοκιμών. Οι μεγαλύτερες τιμές αντιστοιχούν στο εμφανώς καλύτερο PT σχήμα $[W, APE_B]$.

2.5.6 Θεμελιώδεις καταστάσεις στο 3d πρότυπο ΕΑ

Στη συνέχεια παρουσιάζεται η συγκριτική μελέτη μεθόδων PT που έγιναν στο κυβικό ισοτροπικό δίτιμο μοντέλο ΕΑ § 4 μεγέθους πλευράς $L = 6$. Πρέπει να τονιστεί ότι η θεμελιώδης κατάσταση του μοντέλου είναι πολύ δύσκολο να προσεγγιστεί και ότι απαιτεί μεγάλο αριθμό διαμορφώσεων (δειγμάτων). Για την καταγραφή θεμελιωδών καταστάσεων (GS) του μοντέλου αυτού οι Roma κ.ά. [153] έθεσαν το δίλημμα μεταξύ χρόνου άθροισης (t_{av}) και αριθμό ανεξάρτητων δοκιμών (N_r) για την επίτευξη θεμελιώδους κατάστασης. Αν και έχει οριστεί διαφορετικά το PTS στην [153], η σύγκριση είναι εύκολη και χρησιμοποιείται επίσης ο συμβολισμός N_s για τον αριθμό των διαφορετικών δειγμάτων. Σύμφωνα με το σχήμα 2b της [153] φαίνεται από τη συσσώρευση δεδομένων ότι η επίδραση του t_{av} είναι ίδια με αυτή των N_r . Επίσης δείχνει ότι η παραγωγή θεμελιώδους κατάστασης (GS) εξαρτάται από το γινόμενο $N_r t_{av}$. Ελέγχουμε το παραπάνω χρησιμοποιώντας δύο δοκιμές με $N_r = 1000$ και $N_r = 100$ και προσαρμόζοντας τους t_{av} κατάλληλα. Για τις τοπικές

κινήσεις χρησιμοποιείται ο Metropolis λόγω του ότι η χρήση cluster αλγόριθμου δεν αυξάνει την απόδοση λόγω της δυσκολίας σχηματισμού cluster στις χαμηλές θερμοκρασίες. Αρχικά θέλουμε να παρατηρήσουμε τη σχετική απόδοση των τοπικών αλγόριθμων, των αλγόριθμων ανταλλαγής αλλά και της μεθόδου θερμοκρασιακής ακολουθίας.

Πίνακας 2.2: Θερμοκρασιακές ακολουθίες CAE και CEI από την άθροιση $N_s = 50$ δειγμάτων. Οι επιμέρους ακολουθίες κάθε δείγματος πάθησαν από μικρές δοκιμές όπως περιγράφεται στο κείμενο. Υπάρχουν δύο ακολουθίες CAE για δύο διαφορετικές τιμές αποδοχής $r = 0.1; 0.5$ και οι αντίστοιχες CEI.

$CAE(r = 0.1) : M = 5$		$CEI : M = 5$		$CAE(r = 0.5) : M = 11$		$CEI : M = 11$	
T	r	T	r	T	r	T	r
0.5000	0.097	0.5000	0.033	0.5000	0.481	0.5000	0.211
0.8868	0.103	1.0200	0.130	0.6893	0.486	0.7800	0.382
1.2269	0.112	1.3550	0.222	0.8934	0.498	0.9600	0.511
1.5940	0.105	1.6750	0.144	0.9746	0.498	1.1150	0.489
2.0235	2.0350	1.1137	0.501	1.2550	0.537
				1.2553	0.516	1.3900	0.548
				1.4018	0.501	1.5250	0.519
				1.5560	0.507	1.6600	0.637
				1.7191	0.510	1.8000	0.622
				1.8973	0.498	1.9500	0.552
				2.0950	2.1100

Στον πίνακα 2.2 δίνονται οι θερμοκρασιακές ακολουθίες οι οποίες αποτελούν τις μέσες τιμές από τις ακολουθίες 50 δειγμάτων για πλέγμα μήκους $L = 6$. Οι επιμέρους ακολουθίες παρήχθησαν από σχετικά μικρές δοκιμές μέσω της μεθόδου ιστογράμματος που περιγράφεται στην παράγραφο 2.5.2. Παρατίθενται οι ακολουθίες για δύο μεθόδους CAE με $r = 0.1$ και $r = 0.5$ οι οποίες περιέχουν $M = 5$ και $M = 11$ θερμοκρασίες αντίστοιχα και οι αντίστοιχες CEI ακολουθίες με παρόμοιο αριθμό θερμοκρασιών. Δεδομένου ότι υπάρχει μεγάλη διακύμανση στις ακολουθίες ανάλογα με το δείγμα, προτιμήθηκε να δοθεί το βάρος στη μεσοτίμηση περισσότερων ακολουθιών από την βελτίωση της ακρίβειας των επιμέρους ακολουθιών μέσω της αύξησης του t_{av} στην διαδικασία κατασκευής ιστογραμμάτων. Η διακύμανση της τιμής ανταλλαγής $r = 0.5$ στην δεύτερη ακολουθία CEI οφείλεται στην επιλογή για περιορισμό του χρόνου t_{av} .

Συμπεριλάβαμε $N_s = 1000$ στην δοκιμή της απόδοσης διαφόρων σχημάτων PT. Χρησιμοποιήθηκαν οι τοπικοί αλγόριθμοι Metropolis (M) και BKL και οι αλγόριθμοι ανταλλαγής NN_a και APE_B . Στον πίνακα 2.3

συνοψίζονται οι δοκιμές σε τρεις ομάδες ανάλογα τη θερμοκρασιακή ακολουθία: Η CAE με $r = 0.1$ στις πρώτες δύο ομάδες τεσσάρων σχημάτων PT και οι CAE $r = 0.5$ με την αντίστοιχη CEI για την τρίτη ομάδα η οποία περιέχει πέντε σχήματα PT. Κρατήθηκε ο συμβολισμός του υπόλοιπου κεφαλαίου βάζοντας πρώτα τον αλγόριθμο επιλογής θερμοκρασιών, μετά τον αλγόριθμο τοπικών κινήσεων και, τέλος, τον αλγόριθμο ανταλλαγής.

Πίνακας 2.3: Δειγματικοί μέσοι $[P]$ και ελάχιστες πιθανότητες (P_{min}) επίτευξης θεμελιώδους κατάστασης (GS) για μια σειρά από σχήματα PT.

$CAE(r = 0.1) : M = 5$	N_r	$n = N_{local}/(M - 1)$	t_{eq}	t_{av}	$[P]$	P_{min}
$[CAE, M, NN_a]$	1000	54	108	216	0.8205	0.026
$[CAE, M, APE_B]$	1000	54	108	216	0.8302	0.024
$[CAE, BKL, NN_a]$	1000	16	108	216	0.9324	0.035
$[CAE, BKL, APE_B]$	1000	16	108	216	0.9398	0.039
$CAE(r = 0.1) : M = 5$	N_r	$n = N_{local}/(M - 1)$	t_{eq}	t_{av}	$[P]$	P_{min}
$[CAE, M, NN_a]$	100	54	108	2160	0.9769	0.05
$[CAE, M, APE_B]$	100	54	108	2160	0.9787	0.04
$[CAE, BKL, NN_a]$	100	18	108	2160	0.9921	0.09
$[CAE, BKL, APE_B]$	100	18	108	2160	0.9929	0.11
$CAE(r = 0.5) : M = 11$	N_r	$n = N_{local}/(M - 1)$	t_{eq}	t_{av}	$[P]$	P_{min}
$[CAE, M, NN_a]$	100	21	64	1271	0.9856	0.12
$[CEI, M, NN_a]$	100	21	64	1271	0.9818	0.10
$[CAE, BKL, NN_a]$	100	5	64	1271	0.9936	0.15
$[CEI, BKL, NN_a]$	100	5	64	1271	0.9917	0.14
$[CEI, BKL, APE_B]$	100	5	64	1271	0.9930	0.15

Για κάθε δείγμα εκτελέστηκε μεγάλος αριθμός ανεξάρτητων δοκιμών N_r και από αυτά n_j βρίσκουν επιτυχώς GS. Έτσι η πιθανότητα να επιτευχθεί GS στο j^o δείγμα είναι $P_j = n_j/N_r$. Η πιθανότητα αυτή εξαρτάται πρώτιστα από το δείγμα το ίδιο και δευτερευόντως από τις παραμέτρους της δειγματοληψίας. Είναι γνωστό ότι τα δείγματα έχουν πολύ διαφορετική συμπεριφορά και μπορούν να χωριστούν σε εύκολα και δύσκολα (βλ. σχήμα 15 στην [153]). Τα δύσκολα δείγματα έχουν αισθητά χαμηλότερη P_j . Για τον λόγο αυτό η ελάχιστη πιθανότητα P_{min} στο σύνολο των δειγμάτων είναι δείκτης για την απόδοση, αφού αντιστοιχεί στην ικανότητα ενός σχήματος να αντιμετωπίσει το δυσκολότερο δείγμα. Αφετέρου, ο δειγματικός μέσος $[P] = \sum_{j=1}^{N_s} P_j/N_s$ αντικατοπτρίζει

τη συνολική απόδοση.

Για κάθε δείγμα j των $N_s = 1000$ υλοποιήσεων που χρησιμοποιήθηκαν για την κατασκευή του πίνακα 2.3 συμβολίζουμε την ειδική GS ενέργεια $u_{6,j}$, ο πρώτος δείκτης (6) αναφέρεται στο μήκος του πλέγματος.

Η μέση τιμή της u_6 βρέθηκε $u_6 = \sum_{j=1}^{N_s} u_{6,j}/N_s = -1.77026$. Ισχυριζόμαστε

ότι η τιμή είναι ακριβής, δηλαδή ότι βρέθηκε GS σε όλα τα δείγματα, το οποίο ελέγχθηκε επαληθεύοντας τις τιμές $u_{6,j}$ του πίνακα, συγκρίνοντάς τις με τις αντίστοιχες τετραπλάσιου χρόνου δοκιμών. Επίσης σύμφωνα με την [153], για χρόνο $t = 2 \times 10^5$ η πιθανότητα να βρεθεί GS είναι 0.999 και οι αντίστοιχοι χρόνοι $N_r t_{av}$ που χρησιμοποιήθηκαν στον πίνακα 2.3 είναι της ίδιας τάξης.

Δόθηκε προσοχή ώστε οι χρόνοι υπολογισμού στις τρεις ομάδες του πίνακα 2.3 να είναι συγκρίσιμοι, μέσω μικρών προκαταρκτικών δοκιμών. Ενώ η δεύτερη και τρίτη ομάδα έχουν σχεδόν ίδιους χρόνους, στην πρώτη ομάδα είναι κατά 1.88 μεγαλύτερος και αυτό γιατί ο χρόνος ισορρόπησης t_{eq} ορίστηκε σχεδόν ίδιος με τον χρόνο άθροισης t_{av} .

Στο πίνακα 2.3 φαίνεται καθαρά η ανωτερότητα του αλγόριθμου BKL έναντι του Metropolis. Αυτό δείχνει η μέση πιθανότητα $[P]$ σε όλες τις ομάδες, αλλά κυρίως στην πρώτη. Το ίδιο επιβεβαιώνουν και οι P_{min} που αφορούν τα δύσκολα δείγματα. Την ανωτερότητα αυτή της BKL έχουν υποδείξει στο παρελθόν μελέτες GS που έγιναν σε υαλώδη σπιν [24, 38, 64]. Η μέθοδος ανταλλαγής όλων των ζευγών APE_B όπως και η CAE (τρίτη ομάδα) δείχνουν οριακά καλύτερη συμπεριφορά. Στην πρώτη και δεύτερη ομάδα παρουσιάζονται μόνο τα αποτελέσματα της CAE. Τα αντίστοιχα CEI παραλείφθηκαν γιατί ήταν κατά πολύ υποδεέστερα λόγω του ότι είχαν πάρα πολύ μικρή τιμή ανταλλαγής r στις χαμηλές θερμοκρασίες (πίνακας 2.2) λόγω του ότι είχαμε μόνο $M = 5$ και ως γνωστό οι CEI είναι αραιές στα άκρα και πυκνές κοντά στην ψευδοκρίσιμη. Τέλος συγκρίνοντας τις πιθανότητες της πρώτης ομάδας με τις άλλες δύο βλέπουμε καθαρά την εξάρτηση της μέσης πιθανότητας $[P]$ με τον χρόνο άθροισης t_{av} όπως έχει υποδείξει οι Roma κ.ά [153].

Το συμπέρασμα που μπορούμε να αντλήσουμε είναι ότι είχαν καλύτερη απόδοση οι BKL και CAE. Ελέγχθηκε επιπλέον η επίδραση του χρόνου άθροισης στις πιθανότητες εύρεσης GS. Συγκεκριμένα, στο σχήμα $[CAE, BKL, (nn)_a]$ επαναλάβουμε τις δοκιμές με χρόνους: $(n = 4 \times 18; t_{av} = 2160)$, $(n = 2 \times 18; t_{av} = 2 \times 2160)$ και $(n = 18; t_{av} = 4 \times 2160)$. Σημειώνεται ότι χρόνοι υπολογισμού είναι περίπου ίσοι στις τρεις περιπτώσεις. Οι αντίστοιχες πιθανότητες είναι $([P] = 0.996; P_{min} = 0.14)$, $([P] = 0.997; P_{min} = 0.07)$ και $([P] = 0.997; P_{min} = 0.18)$. Φαίνεται από

τα παραπάνω ότι το γινόμενο nt_{av} επηρεάζει την ακρίβεια και ότι τελικά είναι ισοδύναμη η αύξηση ανεξάρτητων δοκιμών N_r με την αντίστοιχη αύξηση χρόνου τοπικών κινήσεων t_{av} όπως επισημαίνει και ο Roma στην [153].

Τέλος, χρησιμοποιώντας το σχήμα $[CAE, BKL, (nn)_a]$ υπολογίστηκε η ειδική ενέργεια θεμελιώδους κατάστασης για μεγάλο αριθμό δειγμάτων ($N_s = 10000$) και βρέθηκε $u_6 = \sum_{j=1}^{N_s} u_{6,j}/N_s = -1.7711(6)$, τιμή συμβατή με την αντίστοιχη τιμή των Roma κ.α. $u_6 = -1.7714(3)$ για τον ίδιο αριθμό δειγμάτων.

2.5.7 Σύνοψη και συμπεράσματα

Κατόπιν εξέτασης διαφόρων σχημάτων PT για την ακρίβεια και απόδοσή τους, οι δοκιμές στο $2d$ τετραγωνικό μοντέλο Ising έδειξαν ότι οι δύο αλγόριθμοι επιλογής θερμοκρασιακής ακολουθίας CAE και CEI είναι εξίσου ακριβείς και αποδοτικοί. Η αποδοτικότητα του σχήματος βελτιώνεται δραματικά όταν οι τοπικοί χρόνοι υπακούουν τους αντίστοιχους κανονικούς χρόνους συσχέτισης επιβεβαιώνοντας την [21]. Η καλή συμπεριφορά, άρα, του αλγορίθμου Wolff πηγάζει από το γεγονός ότι σέβεται τους χρόνους συσχέτισης. Η μέθοδος ανταλλαγής όλων των ζευγών του Brenner [26] $AP E_B$ σε συνδυασμό με την Wolff έδωσε αρκετά καλή συμπεριφορά. Όμως, όπως είναι φανερό στο σχήμα 2.2 μπορεί να προκαλέσει προβλήματα στην εκτίμηση ποσοτήτων θερμοδυναμικής ισορροπίας λόγω του ότι ενώ είναι κινητική μέθοδος MC, δεν προβλέπει την εισαγωγή κατάλληλων στατιστικών βαρών στην αθροιστική διαδικασία.

Το πρόβλημα της εύρεσης θεμελιώδους κατάστασης στο $3d$ δίτιμο μοντέλο EA έδωσε με τη σειρά του ενδιαφέροντα συμπεράσματα. Φαίνεται ότι η μέθοδος επιλογής CAE είναι ελαφρώς καλύτερη σε σχέση με την CEI. Το πιο εντυπωσιακό όμως συμπέρασμα είναι ότι ο αλγόριθμος τοπικών κινήσεων BKL (n-fold way) είναι σαφώς ανώτερος του απλού Metropolis.

Κεφάλαιο 3

Πρότυπα τύπου Ising

3.1 Εισαγωγή

Στο παρόν κεφάλαιο παρουσιάζεται η μελέτη που έγινε στα πρότυπα τύπου Ising από την οποία παρήχθησαν οι εργασίες [106–109]. Ο χαρακτηρισμός πρότυπα τύπου Ising αναφέρεται στη συμπεριφορά τους και δόθηκε για να τα αντιπαραβάλει με τα μοντέλα υαλώδους σπιν (βλ. κεφάλαιο 4). Έχουν δηλαδή κρίσιμη συμπεριφορά η οποία δεν παρουσιάζει σύγχυση (frustration). Σαν αποτέλεσμα ο χώρος των φάσεών τους δεν χαρακτηρίζεται από έντονο ανάγλυφο, με συνέπεια η δειγματοληψία τους να έχει σχετικά γρήγορη σύγκλιση.

Το κεφάλαιο ακολουθεί την εξής δομή: Αρχικά παρουσιάζεται η μελέτη του $d=2$ προτύπου Ising διαφόρων Αρχιμήδειων πλεγμάτων (§ 3.2) εξετάζοντας κατά πόσο η μεταβολή στην γεωμετρία επηρεάζει την κρίσιμη συμπεριφορά.

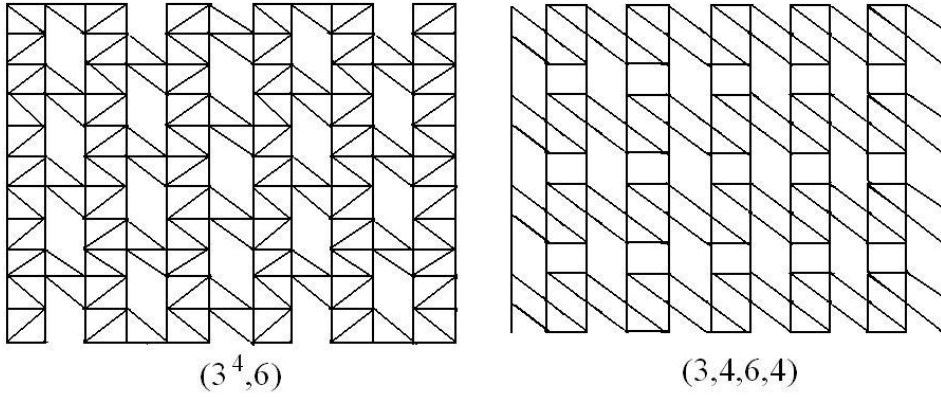
Στις επόμενες δύο ενότητες (3.3 και 3.4) εξετάζονται τα πρότυπα Blume Capel με αταξία $d = 2, 3$ ($2d, 3d$) διαστάσεων αντίστοιχα. Πιο συγκεκριμένα μας ενδιαφέρει η επίδραση της αταξίας δεσμών (bond disorder) στο διάγραμμα φάσης το οποίο αποτελείται από περιοχή πρώτης και δεύτερης τάξης μετάβασης φάσης. Η μελέτη μας τόσο στις 2 όσο και στις 3 διαστάσεις αναδεικνύει την πιθανότητα εμφάνισης νέας κλάσης οικουμενικότητας με ταυτόχρονη παραβίαση της υπόθεσης οικουμενικότητας.

3.2 Πρότυπο Ising $S=1/2$ και $S=1$ σε αρχιμήδεια πλέγματα

Το μοντέλο Ising παίζει κύριο ρόλο στην ανάπτυξη θεωρίας μεταβάσεων φάσης και της υπόθεσης οικουμενικότητας [49,55]. Σύμφωνα με τη συγκεκριμένη θεωρία, συστήματα ίδιων διαστάσεων, συμμετρίας διατεταγμένης φάσης και ίσου αριθμού παραμέτρων τάξης έχουν ίδιους κρίσιμους εκθέτες. Για το μοντέλο Ising δύο διαστάσεων υπάρχουν ακριβείς τιμές των κρίσιμων εκθετών [9, 85, 137, 184] τους οποίους αναμένεται να υπακούουν όλα τα διδιάστατα μοντέλα Ising ανεξάρτητα της δομής του πλέγματος. Αυτό έχει επιβεβαιωθεί αναλυτικά [9], αλλά και μέσω προσομοιώσεων MC [22, 47, 67, 99] εξαιρετικής ακρίβειας. Το ανάπτυγμα πεπερασμένου μεγέθους των κύριων θερμοδυναμικών εξισώσεων, ή η ακριβής προσομοίωσή τους, παρέχει την δυνατότητα βελτίωσης των εκτιμήσεων των κρίσιμων εκθετών των δειγματοληψιών MC, ειδικά σε περίπλοκες περιπτώσεις όπου χρειάζονται λογαριθμικές διορθώσεις [88] όπως στις μελέτες αναπτυγμάτων του κρίσιμου πλάτους της ειδικής θερμότητας [46, 76, 113, 155, 159, 181] ή στη μελέτη οικουμενικών και μη χαρακτηριστικών ορισμένων συνδυασμών του κρίσιμου πλάτους της παραμέτρου τάξεως [79, 156, 158, 159].

Αρχιμήδειο πλέγμα (ΑΠ) ορίζεται το περιοδικό πλέγμα πολυγώνων των οποίων όλα τα σημεία είναι ισοδύναμα και μοιράζονται τον ίδιο σύνολο πολυγώνων. Κάθε αρχιμήδειο πλέγμα ορίζεται από ένα σύνολο ακεραίων (p_1, p_2, \dots) οι οποίοι αντιστοιχούν στο είδος των πολυγώνων, σε κυκλική σειρά, τα οποία περιέχουν ένα συγκεκριμένο σημείο. Για παράδειγμα το τετραγωνικό πλέγμα ορίζεται σαν (4^4) . Υπάρχουν 11 αρχιμήδεια πλέγματα, τα αντίστροφα πλέγματα των οποίων αποτελούνται από τρία αρχιμήδεια και 8 τα οποία καλούνται πλέγματα Laves [146]. Τα όρια του κατωφλιού διήθησης δεσμών (bond percolation threshold) καθορίστηκαν για τρία τέτοια πλέγματα από τον Wierman [179]. Εξάλλου οι Suding και Ziff παρουσίασαν το ακριβές κατώφλι διήθησης θέσεων (site percolation threshold) σε οκτώ αρχιμήδεια πλέγματα [170]. Όπως έδειξαν, τα αρχιμήδεια πλέγματα μπορούν να μετατραπούν σε έναν τετραγωνικό πίνακα $N = L^2$ σημείων με συνοριακές περιοδικές συνθήκες. Τα δύο πλέγματα που εξετάσαμε είναι το $(3^4, 6)$ και $(3, 4, 6, 4)$ (σχήμα 3.1).

Σε εργασία του 2005 οι Malarz κ.α. υπολόγισαν μέσω MC τις κρίσιμες θερμοκρασίες της σιδηρομαγνητικής - παραμαγνητικής μετάβασης του μοντέλου Ising για πέντε ΑΠ [115]. Τα $(3, 4, 6, 4)$ και $(3^4, 6)$ ΑΠ του μοντέλου πλειοψηφίας με θόρυβο (majority-vote model with noise)



Σχήμα 3.1: Τα αρχιμήδεια πλέγματα $(3^4, 6)$ και $(3, 4, 6, 4)$.

μελετήθηκαν στην [101], όπου βρέθηκε μετάβαση διατεταγμένης - μη διατεταγμένης φάσης. Επίσης οι Krawczyk κ.α. μελέτησαν τις μαγνητικές ιδιότητες του $(3, 12^2)$ ΑΠ μοντέλου Ising αντισιδηρομαγνητικών αλληλεπιδράσεων [93]. Το 2010 ο Codello προσδιόρισε την ακριβή θερμοκρασία Curie για όλα τα μοντέλα Ising σε ΑΠ χρησιμοποιώντας την προσέγγιση Feynman-Vdovichenko [36]. Οι Lima κ.ά. στην [102] εξετάζοντας το μοντέλο Ising $S = 1/2$ και $S = 1$ στα $(3, 4, 6, 4)$ και $(3^4, 6)$ ΑΠ, ισχυρίζονται ότι το $S = 1$ δεν εμπίπτει στην κλάση οικουμενικότητας του μοντέλου Ising $S = 1/2$.

Τα παραπάνω δείχνουν ότι υπάρχει γενικό ενδιαφέρον στη μελέτη των ΑΠ και ότι το ερώτημα οικουμενικότητας παραμένει ανοιχτό κατά την άποψη ορισμένων ερευνητών. Όμως δεδομένου ότι το $S = 1$ αποτελεί την ειδική περίπτωση του προτύπου Blume-Capel χωρίς κρυσταλλικό πεδίο, το οποίο έχει μελετηθεί εκτεταμένα για $d = 2$ και για το οποίο έχει δειχτεί ότι η συνεχής του μετάβαση ανήκει στην οικουμενικότητα του απλού προτύπου Ising, αναμένεται το ίδιο να ισχύει για το πρότυπο $S = 1$ σε ΑΠ. Θα δείξουμε μέσω εκτεταμένης αριθμητικής μελέτης ότι ο ισχυρισμός των Lima κ.ά. δεν ισχύει και ότι τόσο το $S = 1/2$ όσο και το $S = 1$ πρότυπο Ising σε αρχιμήδεια πλέγματα ανήκουν στην κλάση οικουμενικότητας του $d = 2$ προτύπου Ising.

3.2.1 Ορισμός προτύπων και περιγραφή σχήματος MC

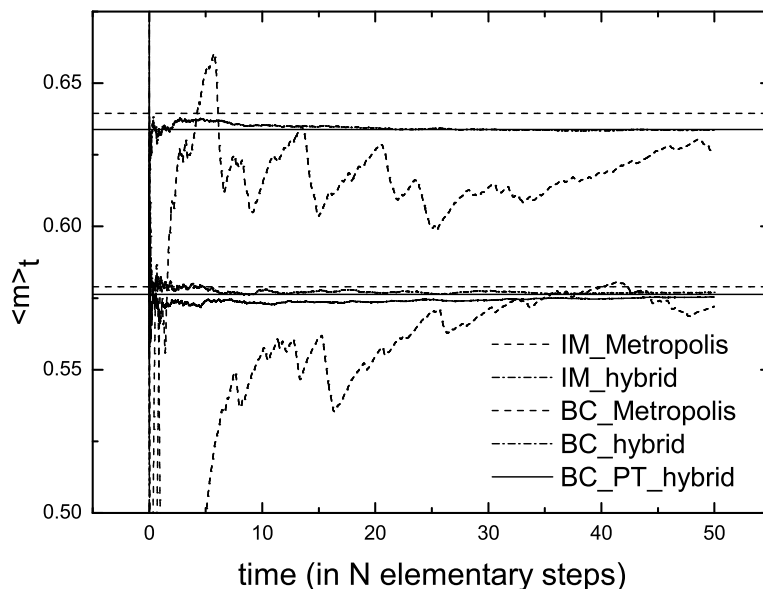
Το μοντέλο Ising χωρίς πεδίο ορίζεται από την Χαμιλτονιανή

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

όπου οι μεταβλητές σπιν παίρνουν τιμές $s = \pm 1$. Ως συνήθως $\langle ij \rangle$ συμβολίζει άθροιση πρώτων γειτόνων και $J > 0$ είναι η σιδηρομαγνητική αλληλεπίδραση ανταλλαγής. Στην $S = 1$ παραλλαγή το σπιν παίρνει τιμές $-1, 0$ ή $+1$.

Για την προσομοίωση χρησιμοποιήθηκε υβριδικός αλγόριθμος τοπικών κινήσεων ακολουθώντας την [22], στον οποίο συνδυάζεται ο Wolff με τον Metropolis με αναλογία περίπου 5 προς 1 λόγω του ότι ο Wolff δεν επιδρά στα μηδενικά σπιν. Το μοντέλο $S = 1/2$ προσομοιώθηκε στις κρίσιμες θερμοκρασίες της [36], ενώ για $S = 1$ χρησιμοποιήθηκε σχήμα PT ακολουθίας θερμοκρασιών CAE με λόγο αποδοχής ανταλλαγής $r = 0.5$ (§ 2.5.1).

Η ανωτερότητα του υβριδικού αλγόριθμου φαίνεται στο σχήμα 3.2, όπου φαίνεται ότι ο Metropolis έχει μεγάλη διακύμανση και αργή ισορρόπηση. Επίσης τα αποτελέσματά του γίνονται αξιόπιστα μέσω άθροισης αρκετών ανεξάρτητων δοκιμών (οι διακεκομμένες είναι άθροισμα 20 διαφορετικών δοκιμών). Από την άλλη, ο υβριδικός αλγόριθμος έχει πολύ γρήγορη ισορρόπηση και παράγει αξιόπιστα αποτελέσματα στην πρώτη δοκιμή.



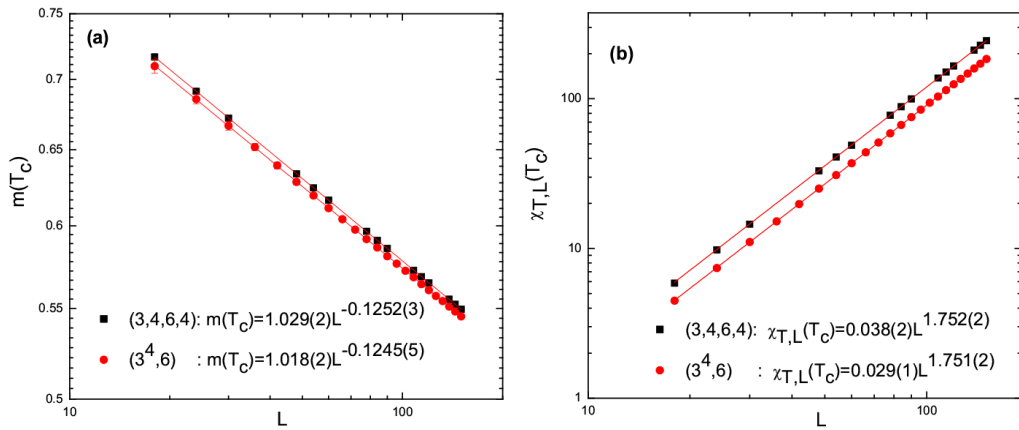
Σχήμα 3.2: Κινούμενη αθροιστική μέση τιμή της παραμέτρου τάξεως κοντά στην κρίσιμη θερμοκρασία για το μοντέλο Ising (άνω μέρος του σχήματος) και του $S = 1$ μοντέλου BC στο $(3, 4, 6, 4)$ ΑΠ μεγέθους $L = 48$. Οι συνεχείς και διακεκομμένες γραμμές δίνουν τη μέση τιμή 20 ανεξάρτητων δοκιμών του Metropolis (διακεκομμένες), υβριδικού και PT-υβριδικού.

3.2.2 Μοντέλο Ising $S = 1/2$ στα $(3, 4, 6, 4)$ και $(3^4, 6)$ ΑΠ

Η μελέτη στο μοντέλο Ising $S = 1/2$ έγινε ακριβώς πάνω στην κρίσιμη θερμοκρασία η οποία για το $(3, 4, 6, 4)$ είναι $T_c = 2.1433\dots$ [36] και στην οποία έγιναν 20 ανεξάρτητες δοκιμές για κάθε γραμμικό μέγεθος πλέγματος ($L = 18, 24, 30, 48, 54, 60, \dots, 138, 144, 150$) με υβριδικό αλγόριθμο Metropolis-Wolff. Η ίδια διαδικασία ακολουθήθηκε για το ΑΠ $(3^4, 6)$ αλλά στην κρίσιμη θερμοκρασία $T_c = 2.7858\dots$ [36] και για πιο πυκνό εύρος πλεγματικών μεγεθών $L = 18, 24, 30, 36, \dots, 150$. Ενδεικτικά αναφέρεται το πλήθος πλεγματικών σαρώσεων της διαδικασίας άθροισης για κάθε ανεξάρτητη δοκιμή έγιναν $3 \cdot 10^5$ για το πλέγμα $L = 108$ και $5 \cdot 10^5$ στο $L = 150$. Ο χρόνος ισορρόπησης είναι περίπου το ένα τρίτου του χρόνου άθροισης.

Στο σχήμα 3.3(a) παρατίθεται η ανάλυση FSS της παραμέτρου τάξεως στην κρίσιμη θερμοκρασία για τα δύο ΑΠ. Η προσαρμογή ήταν

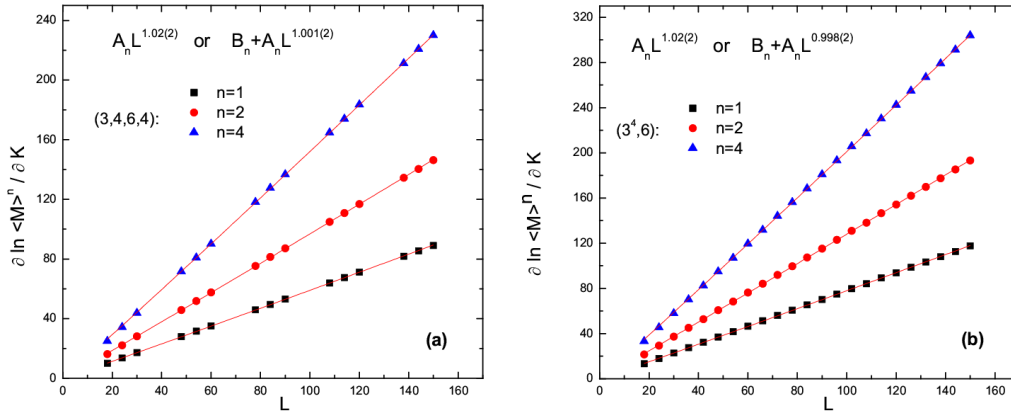
πολύ σταθερή και έδωσε $\beta/\nu = 0.125$ με ακρίβεια τρίτου δεκαδικού. Τα σφάλματα υπολογίστηκαν μέσω της μεθόδου jackknife στο σύνολο των 20 ανεξάρτητων δοκιμών. Στο σχήμα 3.3(b) παρουσιάζεται η αντίστοιχη συμπεριφορά της μαγνητικής επιδεκτικότητας η οποία και πάλι με ακρίβεια τρίτου δεκαδικού υπολογίστηκε $\gamma/\nu = 1.75$. Το σφάλματα εδώ ήταν μικρότερα από τα σύμβολα και παραλείφθηκαν.



Σχήμα 3.3: (a) FSS της μαγνήτισης στην ακριβή κρίσιμη θερμοκρασία των δύο ΑΠ με λογαριθμικούς άξονες. Το υπόμνημα δείχνει τον απλό νόμο δύναμης με την εκτίμηση του εκθέτη β/ν . (b) Οι αντίστοιχες καμπύλες της επιδεκτικότητας και η τιμή του κρίσιμου εκθέτη γ/ν .

Ο κρίσιμος εκθέτης του μήκους συσχέτισης προκύπτει από την κλιμάκωση της παραγωγού του λογαρίθμου των δυνάμεων της παραμέτρου τάξεως του αντιστρόφου της θερμοκρασίας (1.51). Για τα δύο ΑΠ οι καμπύλες των δυνάμεων $n = 1, 2, 4$ έδωσαν το σχήμα 3.4. Η ταυτόχρονη προσαρμογή σε νόμο κλιμάκωσης της μορφής $\sim L^{1/\nu}$ έδωσε $1/\nu = 1.02(2)$ και στα δύο ΑΠ. Η προσθήκη όμως σταθερού διορθωτικού όρου βελτίωσε δραματικά την προσπάθεια προσαρμογής όπως φαίνεται και στο υπόμνημα του σχήματος, δίνοντας τιμές πολύ κοντά στο 1.

Ολοκληρώνοντας την ανάλυση κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους εξετάζεται η ειδική θερμότητα. Από την εργασία των Ferdinand και Fisher [46] γνωρίζουμε τα χαρακτηριστικά αναπτύγματα της ειδικής θερμότητας για το τετραγωνικό μοντέλο Ising. Στο σχήμα 3.5 παρατίθεται η αναμενόμενη λογαριθμική απόκλιση της ειδικής θερμότητας στην κρίσιμη θερμοκρασία για τα δύο ΑΠ. Οι δοκιμές προσαρμογής περιορίστηκαν σε πρώτους όρους $C_L(T_c) = B_c + A_0 \ln(L)$, παραλείποντας όρους υψηλότερης τάξης (L^{-1}, L^{-2}, \dots) [155]. Υιοθετώντας αυτήν την πρακτική αποφεύγεται ο ανταγωνισμός μεταξύ μικρών στατιστι-



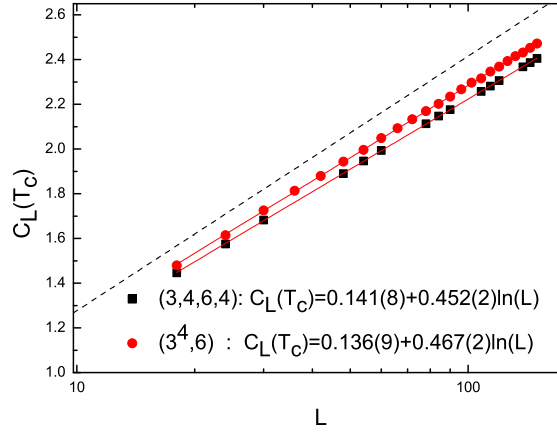
Σχήμα 3.4: (a) FSS καμπύλες της παραγώγου του λογαρίθμου των $n = 1, 2, 4$ δυνάμεων της μαγνήτισης του αντιστρόφου της θερμοκρασίας για το (3,4,6,4) ΑΠ. Στο ένθετο σχήμα αποτυπώνεται η ταυτόχρονη προσρμογή σε απλό νόμο δύναμης με σταθερό διορθωτικό όρο. Το σχήμα (b) περιέχει την αντίστοιχη ανάλυση για το (3⁴,6) ΑΠ.

κών σφαλμάτων και μικρών διορθωτικών όρων. Στο υπόμνημα του σχήματος 3.5 παρατίθεται το εκτιμώμενο πλάτος A_0 και η σταθερά B_c για τα δύο ΑΠ. Ο υπολογισμός έγινε χρησιμοποιώντας όλο το εύρος $L = 18 - 150$. Παρατηρώντας την ασυμπτωτική συμπεριφορά, τα καλύτερα αποτελέσματα για το πλάτος είναι $A_0 = 0.450(8)$ για το (3,4,6,4) και $A_0 = 0.464(8)$ για το (3⁴,6). Ο σταθερός όρος είναι πιο ευαίσθητος και εκτιμήθηκε $B_c = 0.15(3)$ και στα δύο ΑΠ. Για λόγους σύγκρισης παρατίθεται επίσης η καμπύλη $C_L(T_c) = 0.138149 \dots + 0.494538 \dots \ln(L)$ του τετραγωνικού μοντέλου Ising. Η μικρή διαφορά στα πλάτη δεν σημαίνει ότι είναι κατ' ανάγκη ίσα. Για παράδειγμα το τετραγωνικό και το τριγωνικό μοντέλο Ising έχουν $A_0 = 0.494538 \dots$ και $A_0 = 0.499069 \dots$ αντίστοιχα [181].

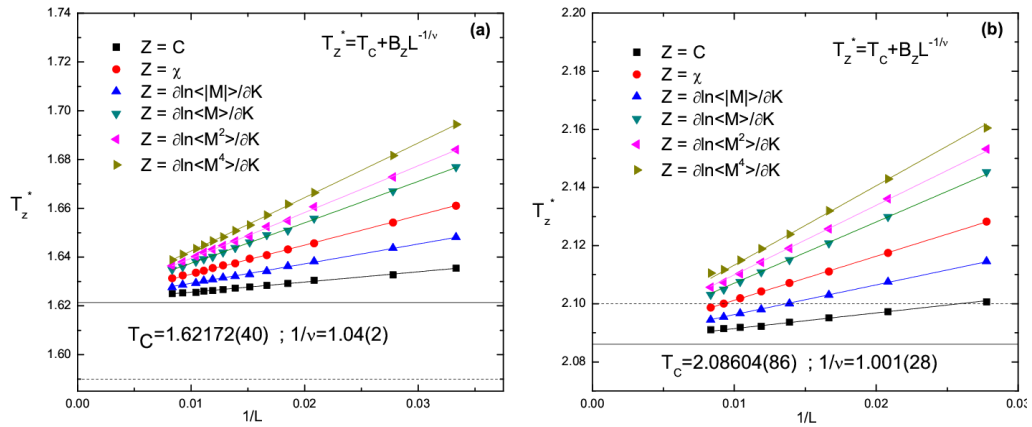
Συμπερασματικά, όλες οι κρίσιμες ιδιότητες των δύο ΑΠ υπακούουν στην κλάση οικουμενικότητας του δισδιάστατου μοντέλου Ising.

3.2.3 Μοντέλο Ising $S = 1$ στα (3, 4, 6, 4) και (3⁴, 6) ΑΠ

Όπως προαναφέρθηκε, για τη μελέτη του μοντέλου υλοποιήθηκε υβριδικό PT σχήμα με το οποίο αθροίστηκαν για κάθε πλέγμα πέντε ανεξάρτητες δοκιμές. Στην ανάλυση FSS χρησιμοποιήθηκαν πλέγματα $L = 30, 36, 48, 54, 60, 66, 72, 78, 84, 90, 96, 108, 120$ για το (3,4,6,4) και $L = 36, 48, 60, 72, 84, 96, 108, 120$ για το (3⁴,6). Το σχήμα 3.6 παρουσιάζει τη μετατόπιση των ψευδοκρίσιμων θερμοκρασιών για τα δύο ΑΠ.



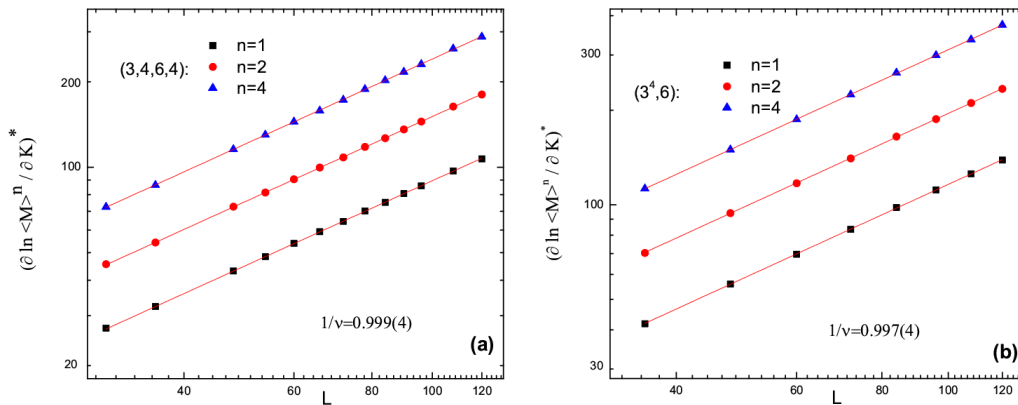
Σχήμα 3.5: Εδική θερμότητα για τα δύο ΑΠ σε ημιλογαριθμική κλίμακα. Λεπτομέρειες υπάρχουν στο κείμενο.



Σχήμα 3.6: Οι καμπύλες των έξι ψευδοκρίσιμων όπως ορίζονται στο κείμενο για τα δύο ΑΠ του μοντέλου $S = 1$. Το (a) για το $(3,4,6,4)$ και το (b) για το $(3^4,6)$. Οι αντίστοιχες κρίσιμες θερμοκρασίες και κρίσιμοι εκθέτες $1/\nu$ δίνονται στο υπόμνημα. Οι συνεχείς οριζόντιες είναι οι τελικές εκτιμήσεις για την κρίσιμη θερμοκρασία (βλ. κείμενο). Οι διακεκομμένες δίνουν τις τιμές της αναφοράς [102]

Οι ψευδοκρίσιμες αντιστοιχούν στα μέγιστα των εξής καμπυλών: ειδικής θερμότητας, μαγνητικής επιδεκτικότητας, παράγωγο λογαρίθμου δυνάμεων $(1, 2, 4)$ της μαγνήτισης του αντιστρόφου της θερμοκρασίας και παραγώγου του απολύτου της μαγνήτισης του αντιστρόφου της θερμοκρασίας (1.53). Τα δεδομένα προσαρμόστηκαν στα αντίστοιχα

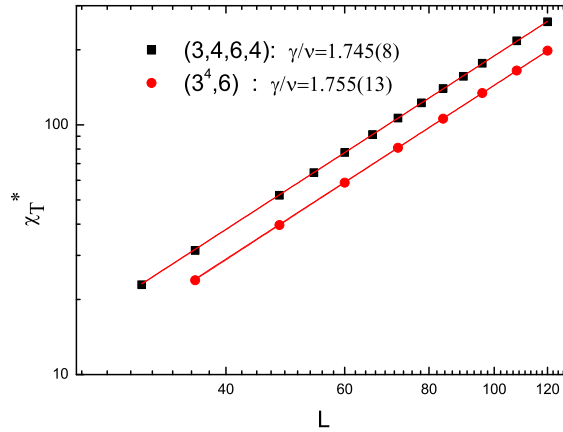
εύρη ($L = 30 - 120$ και $L = 36 - 120$) βάσει του νόμου κλιμάκωσης: $T = T_c + bL^{-1/\nu}$ και τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στο υπόμνημα. Σε κάποιο βαθμό οι εκτιμήσεις είναι ευαίσθητες στο εύρος προσαρμογής. Αντιπαραβάλλοντας όμως την θερμοκρασία τομής του αθροιστή Binder στα παραπάνω ευρήματα καταλήγουμε στις αξιόπιστες τιμές $T_c = 1.62115(55)$ για το $(3,4,6,4)$ και $T_c = 2.08605(15)$ για το $(3^4,6)$. Οι τιμές αυτές αντιστοιχούν στις συνεχείς κατακόρυφες ενώ οι διακεκομμένες στις τιμές $T_c = 1.590(3)$ και $T_c = 2.100(3)$ της αναφοράς [102]. Η υπόλοιπη ανάλυση FSS δίνεται στα σχήματα 3.7, 3.8 και 3.9 όπου εκτιμώνται οι κρίσιμοι εκθέτες $1/\nu$, γ/ν και β/ν . Εξ' αυτών γίνεται απολύτως ξεκάθαρο ότι το μοντέλο ανήκει στην κλάση οικουμενικότητας του μοντέλου Ising.



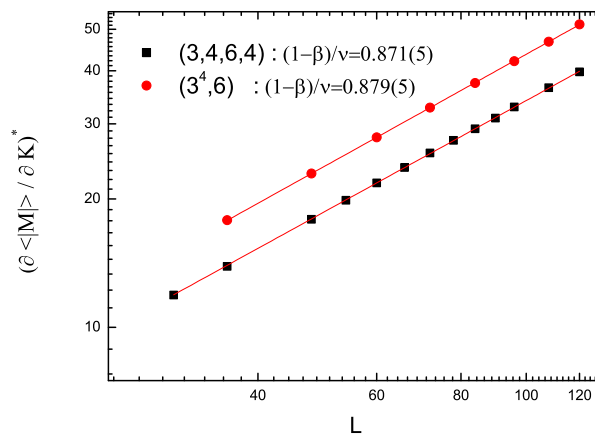
Σχήμα 3.7: FSS καμπύλες των μεγίστων της παραγώγου του λογαρίθμου των $n = 1, 2, 4$ δυνάμεων της μαγνήτισης του αντιστρόφου της θερμοκρασίας. Οι τιμές των εκθετών $1/\nu$ δίνονται στο υπόμνημα βάσει της ταυτόχρονης προσαρμογής στις καμπύλες.

Στη συνέχεια παρουσιάζεται η μελέτη του αναπτύγματος κρίσιμου πλάτους του λογαρίθμου της ειδικής θερμότητας. Στο σχήμα 3.10(a) σχεδιάστηκαν οι αναμενόμενες λογαριθμικές αποκλίσεις της ειδικής θερμότητας στις ψευδοκρίσιμες για τα δύο πλέγματα. Η προσαρμογή έγινε βάσει του νόμου $C^* = B^* + A_0 \ln(L)$. Δεδομένου ότι η κρίσιμη θερμοκρασία έχει εντοπιστεί στην τιμή $T_c = 2.08605(15)$ για το $(3^4, 6)$ με ακρίβεια τουλάχιστον πέντε δεκαδικών, έγινε ξεχωριστή δοκιμή με τον υβριδικό αλγόριθμο για το πλέγμα $L = 20$ σε αυτή τη θερμοκρασία.

Στο σχήμα 3.10(b) παρουσιάζεται η συμπεριφορά της ειδικής θερμότητας όπως προέκυψε από την δοκιμή που αναφέρθηκε στην κρίσιμη θερμοκρασία και στις ψευδοκρίσιμες. Οι τιμές του υπομνήματος προέκυψαν από ξεχωριστές προσαρμογές και είναι συμβατές μεταξύ τους. Η

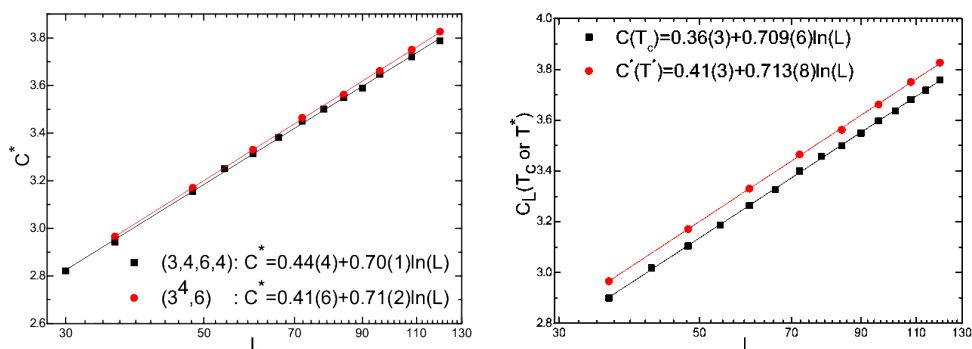


Σχήμα 3.8: Τα μέγιστα της μαγνητικής επιδεκτικότητας. Στο υπόμνημα δίνονται οι εκτιμήσεις του εκθέτη γ/ν όπως προκύπτουν από την προσαρμογή στον απλό νόμο δύναμης κλιμάκωσης.



Σχήμα 3.9: Εκτιμήσεις του μαγνητικού εκθέτη β/ν από την FSS συμπεριφορά της παραγώγου του απολύτου της μαγνήτισης.

ταυτόχρονη προσαρμογή έδωσε $A_0 = 0.7103(46)$. Η αντίστοιχη ανάλυση για το $(3,4,6,4)$ έδωσε $A_0 = 0.700(9)$.



(α') FSS συμπεριφορά της ειδικής θερμότητας στις ψευδοκρίσιμες θερμοκρασίες της ειδικής θερμότητας για τα δύο ΑΠ στο μοντέλο $S = 1$ σε ημιλογαριθμική κλίμακα.

(β') Καμπύλες ειδικής θερμότητας στις ψευδοκρίσιμες της και στην ακριβή κρίσιμη θερμοκρασία του $(3^4,6)$ ΑΠ.

Σχήμα 3.10

3.2.4 Συμπεράσματα

Μετά από μελέτη των μοντέλων Ising $S = 1/2$ και $S = 1$ σε δύο αρχιμήδεια πλέγματα χρησιμοποιώντας υβριδικό αλγόριθμο MC, επιβεβαιώθηκε με μεγάλη ακρίβεια ότι τα μοντέλα έχουν τους ίδιους εκθέτες με αυτούς του μοντέλου Ising δύο διαστάσεων. Τα αποτελέσματα αυτά είναι απολύτως σύμφωνα με την υπόθεση οικουμενικότητας βάσει της οποίας όλα τα μοντέλα πλεγμάτων 2 διαστάσεων ανήκουν στην ίδια κλάση οικουμενικότητας. Αποκλείστηκε έτσι ο ισχυρισμός της εργασίας [102] κατά την οποία το μοντέλο $S = 1$ ανήκει σε διαφορετική κλάση οικουμενικότητας.

3.3 $2d$ πρότυπο Blume-Capel αταξίας αλληλεπιδράσεων

Στο κεφάλαιο αυτό εξετάζονται οι επιδράσεις της εισαγωγής παγωμένης τυχαιότητας (quenched randomness) στις ιδιότητες ισορροπίας των μακροσκοπικών συστημάτων. Είναι γνωστό ότι η εισαγωγή παγωμένης τυχαιότητας στους δεσμούς μπορεί να αλλάξει δραστικά ορισμένα είδη μεταβάσεων φάσεων [3, 15, 45, 60, 71, 130]. Έτσι η πρώτη τάξης μετάβασης φάσης μετατρέπεται σε δεύτερης τάξης με την εισαγωγή παραμικρής τυχαιότητας δεσμών σε συστήματα διάστασης $d = 2$ [3, 71] και για τυχαιότητα δεσμών μεγαλύτερη από ένα κατώφλι για $d > 2$ [71] όπως υποδεικνύει με γενικά επιχειρήματα η εργασία [130] αλλά και αναλυτικά η εργασία [3]. Συγκεκριμένα η παρατηρούμενη άμβλυνση της μετάβασης πρώτης τάξης αποδείχτηκε καθολικά στις χαμηλές διαστάσεις ($d \leq 2$) συμπεριλαμβάνοντας μεγάλο αριθμό τύπων αταξίας σε κλασικά αλλά και κβαντικά συστήματα σπιν στην [54].

3.3.1 Απλό και τυχαίο $2d$ πρότυπο BC

Το απλό μοντέλο Blume-Capel [23, 32] ορίζεται από την Hamiltonian:

$$H_p = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j + \Delta \sum_i s_i^2, \quad (3.2)$$

όπου οι μεταβλητές σπιν s_i παίρνουν τιμές $-1, 0, +1$. Με $\langle ij \rangle$ συμβολίζεται η άθροιση στους πρώτους γείτονες και οι δεσμοί μεταξύ των θέσεων είναι σιδηρομαγνητικοί ($J > 0^1$). Η παράμετρος Δ συμβολίζει το κρυσταλλικό πεδίο. Το μοντέλο έχει μελετηθεί με θεωρία μέσου πεδίου [23, 32], ομάδα επανακανονικοποίησης πραγματικού χώρου, προσομοιώσεις MC, υπολογισμούς MC ομάδας επανακανονικοποίησης [94], αναπτύγματα ϵ ομάδων επανακανονικοποίησης [169], υπολογισμούς σειρών υψηλών και χαμηλών θερμοκρασιών [50], φαινομενολογική ανάλυση FSS γεωμετρίας λωρίδων [10, 129] και πιο πρόσφατα μέσω Wang-Landau δύο παραμέτρων δειγματοληψίας μικρών πλεγμάτων πλευράς $L \leq 16$ [161]. Όπως φαίνεται στο σχήμα 3.12 το διάγραμμα φάσης αποτελείται από ένα μέρος συνεχούς μετάβασης Ising το οποίο καταλήγει σε ένα τρικρίσιμο σημείο (Δ_t, T_t) όπου ενώνονται η μετάβαση δεύτερης τάξης με το κομμάτι μετάβασης πρώτης τάξης το οποίο τερματίζεται στο σημείο $(\Delta = 2, T = 0)$.

¹Η κλίμακα θερμοκρασίας έχει τεθεί τέτοια ώστε $J = 1$ και $k_B = 1$

Το μοντέλο με αταξία δεσμών ορίζεται από την εξής δίτιμη κατανομή:

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{2} [\delta(J_{ij} - J_1) + \delta(J_{ij} - J_2)]; \quad (3.3)$$

$$\frac{J_1 + J_2}{2} = 1; \quad J_1 > J_2 > 0; \quad r = \frac{J_2}{J_1},$$

Το r εκφράζει την ισχύ της αταξίας δεσμών. Στο παρόν εξετάστηκε μόνο η περίπτωση 50%/50% ασθενών/ισχυρών δεσμών όπως υποδεικνύει η (3.3). Η Χαμιλτονιανή (3.2) γράφεται και ως:

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} s_i s_j + \Delta \sum_i s_i^2. \quad (3.4)$$

Μία πρώτη συγκριτική μελέτη του απλού προτύπου με το πρότυπο αταξίας έχει γίνει στην εργασία [105] για δύο τιμές κρυσταλλικού πεδίου στην περιοχή δευτέρας τάξης $\Delta = 1$ και στην περιοχή μετάβασης πρώτης τάξης $\Delta = 1.975$ με την ίδια τιμή αταξίας $r = 0.75/1.25 = 0.6$.

3.3.2 Περιγραφή της υλοποίησης Wang-Landau δειγματοληψίας

Στη συνέχεια περιγράφεται το σχήμα Wang-Landau (WL). Ο αλγόριθμος WL [176, 177] που χρησιμοποιήσαμε έχει βασικό συστατικό τον κατάλληλο περιορισμό του ενεργειακού υπόχωρου. Αυτό αρχικά ονομάστηκε περιορισμός κρίσιμου ελάχιστου ενεργειακού υπόχωρου ή αλλιώς περιορισμός (CrMES) [110, 113] ο οποίος μπορεί να πραγματοποιηθεί με πολλούς τρόπους. Ο απλούστερος είναι μέσω της καταγραφής της συμπεριφοράς πεπερασμένου μεγέθους των ουρών της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας της ενέργειας (e-pdf) [110]. Λαμβάνοντας υπ' όψιν πιθανές παλινδρομήσεις της e-pdf σε συστήματα με αταξία μπορούμε να απαλείψουμε πιθανά προβλήματα. Στις εργασίες [51, 52, 105] υπάρχει μεθοδολογία για τον εντοπισμό του κατάλληλου ενεργειακού υπόχωρου (E_1, E_2) για την εντροπική δειγματοληψία κάθε δείγματος.

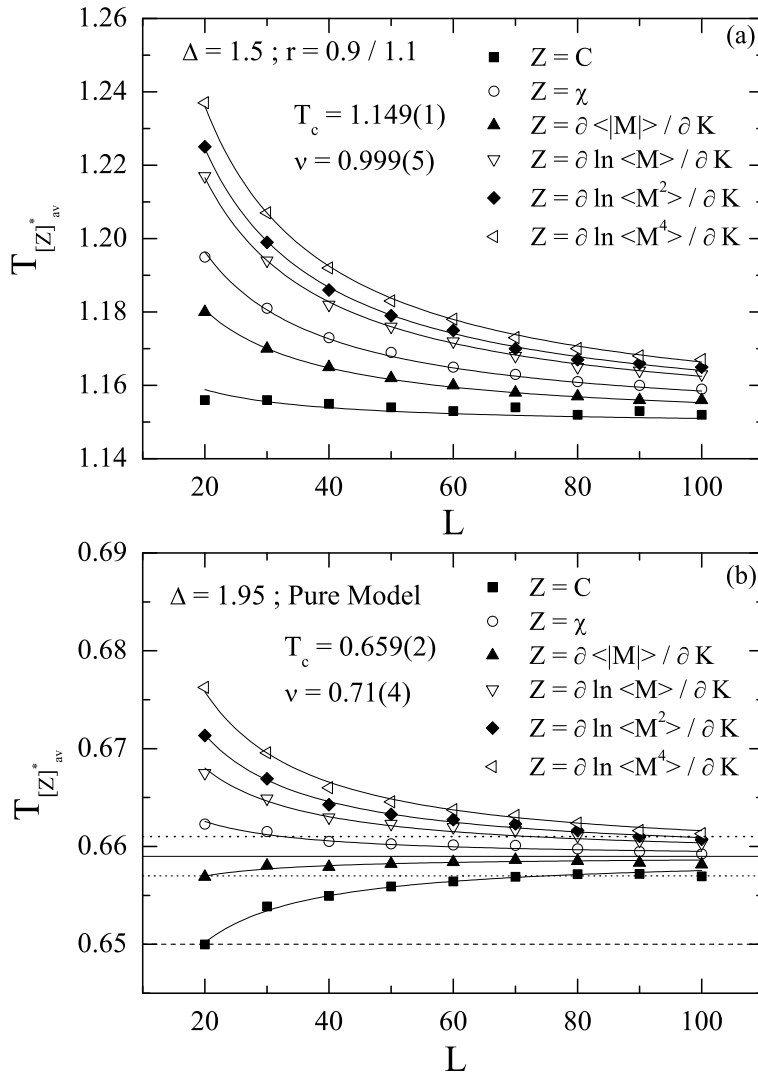
Χρησιμοποιήθηκε συνδυασμός βημάτων. Αρχικά γίνεται ένα προκαταρκτικό βήμα πολλαπλού εύρους σε πολύ ευρύ ενεργειακό χώρο. Αυτό το προκαταρκτικό βήμα γίνεται μέχρι ενός σημείου του τυχαίου περιπάτου WL. Ακολουθεί η διαδικασία στάθμισης της πυκνότητας καταστάσεων (DOS) $G(E)$ κατά την οποία $G(E) \rightarrow f * G(E)$ και μετά ακολουθεί η αναπροσαρμογή των συντελεστών $f_{j+1} = \sqrt{f_j}$ με $f_1 = e$. Το προκαταρκτικό βήμα μπορεί να αποτελείται από τα επίπεδα $j = 1, \dots, 18$ και να

επαναληφθεί αρκετές φορές για να αυξήσουμε την ακρίβεια. Εδώ χρησιμοποιήθηκαν τα επίπεδα $j = 13, \dots, 18$ μετά από την αρχική εφαρμογή, χρησιμοποιώντας σαν αρχική DOS αυτήν την οποία παρήγαγε ο πρώτος τυχαίος περίπατος στο επίπεδο $j = 12$. Από προηγούμενη εμπειρία [110, 113] δεν εφαρμόστηκε αυστηρά η συνθήκη ομαλότητας ιστογραμματος ειδικά στα αρχικά στάδια και επιβάλλοντας αυστηρό κριτήριο ομαλότητας στο επίπεδο $j = 18$. Μετά το προκαταρκτικό αυτό βήμα μπορεί να οριστεί ο κατάλληλος ενεργειακός υπόχωρος για κάθε υλοποίηση αταξίας είτε καθοδηγούμενος από μικρότερα πλέγματα ή προβλέποντας από προκαταρκτικές δοκιμές σε μικρό αριθμό υλοποιήσεων.

Η διαδικασία συνεχίζει σε επιπλέον δύο βήματα (two-stage process), χρησιμοποιώντας κυρίως υψηλά επίπεδα επανάληψης όπου ο συντελεστής προσαρμογής είναι πολύ κοντά στη μονάδα και δεν υπάρχει αξιοσημείωτη παραβίαση του λεπτομερούς ισοζυγίου. Αυτά τα δύο βήματα είναι κατάλληλα για τη συσσώρευση δεδομένων για την κατασκευή ιστογραμμάτων τα οποία μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τον ακριβή εντροπικό υπολογισμό μη θερμικών θερμοδυναμικών παραμέτρων όπως η παράμετρος τάξης και η επιδεκτικότητα της [110]. Στο πρώτο (χαμηλό) βήμα ακολουθούμε πάλι την προσέγγιση πολλαπλού εύρους επαναλαμβάνοντάς την αρκετές φορές (τυπικά $\sim 5 - 10$), η οποία όμως εκτελείται μέσα στον ορισμένο ενεργειακό υπόχωρο. Τα επίπεδα WL μπορούν να επιλεγούν $j = 18, 19, 20$ και σαν κατάλληλη αρχική DOS για το αντίστοιχο επίπεδο μπορεί να χρησιμοποιηθεί η μέση DOS του προκαταρκτικού βήματος. Τέλος εφαρμόζεται το δεύτερο (υψηλό) βήμα στα επίπεδα WL $j = j_i, \dots, j_i + 3$ (τυπικά $j_i = 21$), όπου συνήθως δοκιμάζονται αμφότερες μία πολυτμηματική και μία πολυτμηματική προσέγγιση με μεγάλα ενεργειακά διαστήματα. Στην περίπτωση της μονοτμηματικής ακολουθούνται οι βολικοί συντελεστές προσαρμογής της τροποποίησης WL των Belardinelli και Pereyra [12] $\ln f \sim t^{-1}$.

Χρησιμοποιήθηκε μεγάλος αριθμός υλοποιήσεων αταξίας δεσμών (δειγμάτων) $N_s = 100$ για πλέγματα μήκους πλευράς $L = 20 - 100$ για κάθε τιμή του κρυσταλλικού πεδίου που χρησιμοποιήθηκε εκτός από τις τιμές $\Delta = 1.5$ και $r = 0.5/1.5$, όπου υλοποιήθηκαν $N_s = 500$ δείγματα για πλέγματα μεγέθους $L = 20 - 140$. Αντίστοιχα στο απλό μοντέλο χρησιμοποιήθηκαν $N_r > 30$ ανεξάρτητες δοκιμές. Σημειώνουμε ότι τα στατιστικά σφάλματα των θερμοδυναμικών παραμέτρων είναι μικρά ακόμα και σε πλέγματα μεγάλου μεγέθους $L \geq 100$ και λόγω του ποιοτικού χαρακτήρα της μελέτης δεν περιλαμβάνονται στα σχήματα. Επίσης ακολουθώντας την υπόλοιπη σημειογραφία η μεσοτίμηση στο σύνολο των δειγμάτων συμβολίζεται $[\dots]_{av}$.

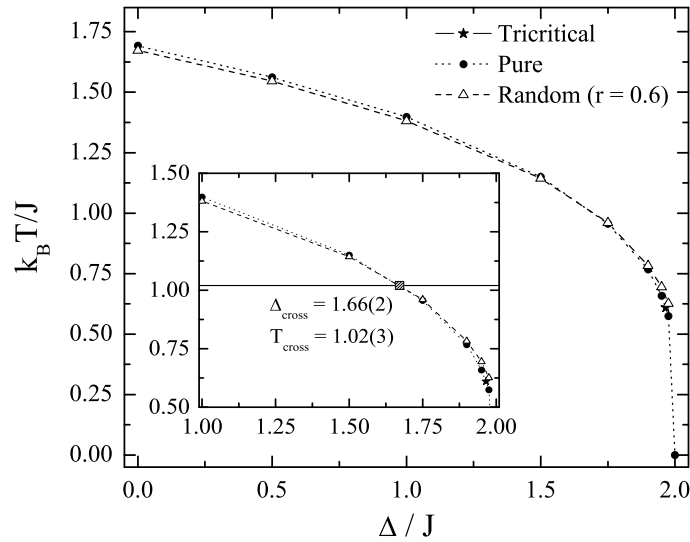
3.3.3 Διάγραμμα φάσης



Σχήμα 3.11: (a) Ταυτόχρονη προσαρμογή έξι ψευδοκρίσιμων θερμοκρασιών ορισμένων στο κείμενο για το τυχαίο μοντέλο με $\Delta = 1.5$ και $r = 0.9/1.1$. Το εύρος μεγεθών είναι $L = 20 - 100$. (b) Η ίδια προσαρμογή για το απλό μοντέλο με κρυσταλλικό πεδίο $\Delta = 1.95$. Η συνεχής γραμμή αντιστοιχεί στην εκτίμηση της κρίσιμης θερμοκρασίας $T_c = 0.659$ (Οι εστιγμένες δείχνουν το σφάλμα) και η διακεκομμένη γραμμή δίνει την τιμή της αναφοράς [10] $T_c = 0.650$

Οι ψευδοκρίσιμες θερμοκρασίες σύμφωνα με το σχήμα ανάλυσης πε-

περασμένου μεγέθους που ακολουθείται §1.2.4 κλιμακώνουν ως $T = T_c + bL^{-1/\nu}$ (1.49).



Σχήμα 3.12: Διάγραμμα φάσης του απλού μοντέλου BC δύο διαστάσεων και του αντίστοιχου τυχαίων δεσμών για $r = 0.75/1.25$. Στο ένθετο σχήμα δείχνουμε την τομή τους μαζί με την εκτίμηση των συντεταγμένων της.

Ως συνήθως χρησιμοποιούμε τις ψευδοκρίσιμες της ειδικής θερμότητας (1.47) και της μαγνητικής επιδεικτικότητας (1.48) μαζί με τις κορυφές της παραγώγου του λογαρίθμου των δυνάμεων $n = 1, 2, 4$ της παραμέτρου τάξης (1.51) αλλά και της παραγώγου του απολύτου της παραμέτρου τάξης (1.53). Έγινε ταυτόχρονη προσαρμογή στις παραπάνω ψευδοκρίσιμες στο σχήμα 3.11 στο τυχαίο μοντέλο $r = 0.9/1.1$ και $\Delta = 1.5$ και στο απλό μοντέλο για $\Delta = 1.95$ για όλο το φάσμα των πλεγματικών μεγεθών $L = 20 - 100$. Το σχήμα 3.12 δείχνει τα παραγόμενα διαγράμματα φάσης του απλού μοντέλου και του μοντέλου τυχαίων δεσμών τιμή αταξίας $r = 0.75/1.25 = 0.6$. Το τρικρίσιμο σημείο αντιστοιχεί στην τιμή που δίνει ο Beale $(\Delta_t, T_t) = (1.9655(10), 0.610(5))$ [10]. Για τιμή αταξίας $r = 0.75/1.25$ επιλέχθηκαν τιμές του κρυσταλλικού πεδίου τέτοιες ώστε να εντοπίσουμε την ενίσχυση της σιδηρομαγνητικής φάσης στην περιοχή πρώην πρώτης τάξης όπως αυτή παρατηρήθηκε στην εργασία [105] για $\Delta = 1.975$ όπου η κρίσιμη θερμοκρασία αυξήθηκε κατά $\sim 9\%$. Η μικροσκοπική εξήγηση της ενίσχυσης του σιδηρομαγνητισμού

είναι ο σχηματισμός νησίδων σπιν $s_i = \pm 1$ από τα cluster ισχυρών δεσμών [80,105]. Στο ένθετο σχήμα του σχήματος 3.12 παρουσιάζεται το σημείο τομής των διαγραμμάτων φάσης $(\Delta_{cross}, T_{cross}) = (1.66(2), 1.02(3))$ πολύ πριν δηλαδή το τρικρίσιμο. Το σημείο τομής υπολογίστηκε από την παρεμβολή τεσσάρων σημείων μεταξύ $\Delta = 1.0 - 1.9$.

Στον πίνακα 3.1 συνοψίζουμε τα σημεία του διαγράμματος φάσης που παρήχθησαν μέσω της ανάλυσης πεπερασμένου μεγέθους την οποία περιγράψαμε παραπάνω, για μοντέλα αταξίας $r = 0.9/1.1$, $r = 0.75/1.25$ και $r = 0.6/1.4$ μαζί με τα σημεία που δίνει ο Beale [10] για το απλό. Αντίστοιχο πίνακα δίνουν και οι Silva κ.α. [161]. Λόγω του ότι υπάρχει διαφωνία στην τιμή $\Delta = 1.95$ αυξήθηκε κατάλληλα το σφάλμα στο σχήμα 3.11(b).

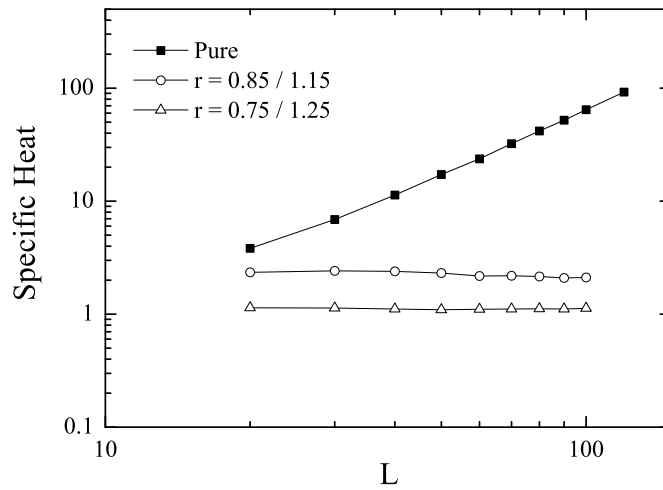
Πίνακας 3.1: Θερμοκρασίες μετάβασης για το απλό και το μοντέλο τυχαίων δεσμών του 2d μοντέλου BC. Η δεύτερη στήλη αναφέρεται στις τιμές της εργασίας [10]. Η τρίτη και οι τελευταίες καταχωρήσεις της τέταρτης και πέμπτης από την [105].

Δ/J	$k_B T/J$				
	Ref. [10]	Απλό	Τυχαίο		
			$r = 0.9/1.1$	$r = 0.75/1.25$	$r = 0.6/1.4$
0	1.695	1.693(3)		1.674(2)	
0.5	1.567	1.564(3)		1.547(2)	
1	1.398	1.398(2)		1.381(1)	
1.2					1.277(3)
1.4					1.184(3)
1.5	1.150	1.151(1)	1.149(1)	1.144(2)	1.131(2)
1.6			1.084(1)		1.071(3)
1.7			1.005(1)		
1.75		0.958(1)		0.960(2)	
1.8			0.908(1)		0.917(3)
1.9		0.769(1)	0.774(2)	0.786(4)	
1.95	0.650	0.659(2)		0.702(3)	
1.975		0.574(2)		0.626(2)	

3.3.4 Ισχυρή παραβίαση της οικουμενικότητας

Σύμφωνα με την εργασία [105] υπάρχει δραματικά διαφορετική κρίσιμη συμπεριφορά στις μεταβάσεις δεύτερης τάξης οι οποίες προέρχονται από τη μετάβαση πρώτης τάξης του απλού μοντέλου. Συγκεκριμένα υπάρχουν δύο σύνολα κρίσιμων εκθετών τα οποία περιγράφουν τις δύο περιοχές της συνεχούς γραμμής μετάβασης: της μετάβασης δηλαδή δεύτερης τάξης που προϋπήρχε στο απλό και της αντίστοιχης η οποία

προέρχεται από τη μετάβαση πρώτης τάξης του απλού. Αυτή η ισχυρή παραβίαση φαίνεται ότι προέρχεται από την άμβλυση της πρώτης τάξης την οποία προκάλεσε η εισαγωγή αταξίας. Συγκεκριμένα βρέθηκε ότι αυτή η κλάση οικουμενικότητας ισχυρής αταξίας περιγράφεται από τον εκθέτη μήκους συσχέτισης $\nu = 1.30(6) - 1.35(5)$ και $\gamma/\nu, \beta/\nu$ πολύ κοντά στις τιμές του Ising 1.75 και 0.125. Αυτή η ασθενής οικουμενικότητα [89,90,172] ισχύει πιθανότατα στις συνεχείς μεταβάσεις τύπου Ising του μοντέλου Ising τυχαίων δεσμών για μικρές τιμές Δ και συνεχείς μεταβάσεις οι οποίες ανήκουν σε κλάση ισχυρής αταξίας. Εξ άλλου η κλάση οικουμενικότητας ισχυρής αταξίας χαρακτηρίζεται από έντονο κορεσμό της ειδικής θερμότητας. Στο σχήμα 3.13 παρατίθεται ποιοτικά αυτή η συμπεριφορά. Στο σχήμα αυτό αντιπαρατίθενται οι συμπεριφορές πεπερασμένου μεγέθους της ειδικής θερμότητας στο κρυσταλλικό πεδίο $\Delta = 1.975$ (περιοχή πρώτης τάξης) για δύο μοντέλα με αταξία και το απλό.



Σχήμα 3.13: Συμπεριφορά του $2d$ μοντέλου τυχαίων δεσμών BC για $\Delta = 1.975$ της αναφοράς [105]. Φαίνονται καθαρά η απόκλιση της ειδικής θερμότητας στην περιοχή πρώτης τάξης καθώς και ο κορεσμός της και στα δύο μοντέλα τυχαίων δεσμών (ανοιχτά σημεία). Οι άξονες είναι λογαριθμικοί.

Τα παραπάνω ευρήματα είναι απολύτως συμβατά με την κατηγοριοποίηση των μεταβάσεων φάσης συστημάτων με αταξία που έχει προτείνει ο Wu [182]. Σύμφωνα με την οποία η μετάβαση ισχυρής ατα-

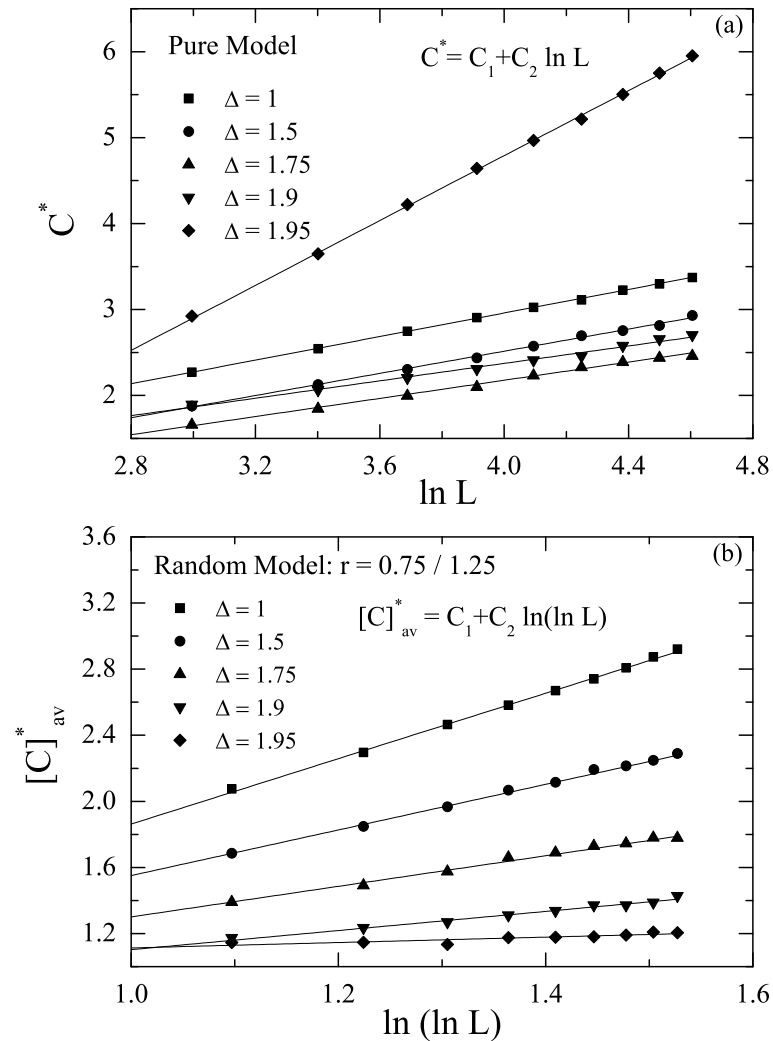
ξίας αναμένεται να είναι ανομοιογενής και διηθητική με κρίσιμο εκθέτη μήκους συσχέτισης της τάξεως του $\nu = 1.34$ [44]. Πρέπει επίσης να σημειωθεί ότι τα συστήματα ισχυρής αταξίας χαρακτηρίζονται από έλλειψη αυτοαθροιστικότητας (self-averaging) μαζί με ισχυρά φαινόμενα πεπερασμένου μεγέθους κάνοντας πολύ προβληματική την δειγματοληψία MC. Για τον λόγο αυτό επιλέχθηκαν συστήματα με μέτριες τιμές κρυσταλλικού πεδίου και αταξίας από τα οποία η κλάση ισχυρής αταξίας μπορεί να εκτιμηθεί παρατηρώντας την υποχώρηση της κλάσης του $2d$ τυχαίου μοντέλου Ising.

3.3.5 Οικουμενικότητα απλού και τυχαίων δεσμών $2d$ προτύπου BC

Ξεκινώντας από τη σύγκριση της συμπεριφοράς FSS των μεγίστων της ειδικής θερμότητας στο απλό μοντέλο και το τυχαίο με $r = 0.75/1.25$ παρουσιάζονται στο σχήμα 3.14 οι απόπειρες παρεμβολής στο ίδιο εύρος κρυσταλλικού πεδίου. Είναι αμέσως φανερό η απότομη αλλαγή στη συμπεριφορά των κορυφών της ειδικής θερμότητας όσο πλησιάζεται το τρικρίσιμο σημείο λόγω των ισχυρών φαινομένων crossover. Στα τυχαία μοντέλα δεν παρατηρείται το αντίστοιχο φαινόμενο. Η κλίση των διπλά λογαριθμικών παρεμβολών φθίνει αισθητά από την οποία θα εκτιμηθεί το όριο της περιοχής ισχυρής αταξίας.

Η επόμενη σύγκριση αφορά τα μέγιστα της μαγνητικής επιδεκτικότητας (σχήμα 3.15). Η επιρροή των εξαιρετικά μεγάλων διακυμάνσεων της παραμέτρου τάξης στο απλό μοντέλο κοντά στο τρικρίσιμο αντικατοπτρίζεται στον ενεργό εκθέτη γ/ν ο οποίος εκτιμήθηκε από τον νόμο κλιμάκωσης $\chi^* \sim L^{\gamma/\nu}$. Η μεγάλη αυτή διακύμανση έχει παρατηρηθεί και στην [10]. Η ενεργός τιμή του εκθέτη γ/ν , κόντα στο τρικρίσιμο σημείο ($\Delta = 1.95$), είναι κοντύτερα στην αντίστοιχη τιμή $\gamma/\nu = 1.5$ της [10] από ότι στην τιμή του μοντέλου Ising $\gamma/\nu = 1.75$. Για τον λόγο αυτό έγινε ξεχωριστά παρεμβολή του νόμου δύναμης για την τιμή $\Delta = 1.95$. Μπορούμε να υποστηρίξουμε ότι για μικρές τιμές του κρυσταλλικού πεδίου το μοντέλο ανήκει στην κλάση οικουμενικότητας Ising με πιθανές λογαριθμικές διορθώσεις.

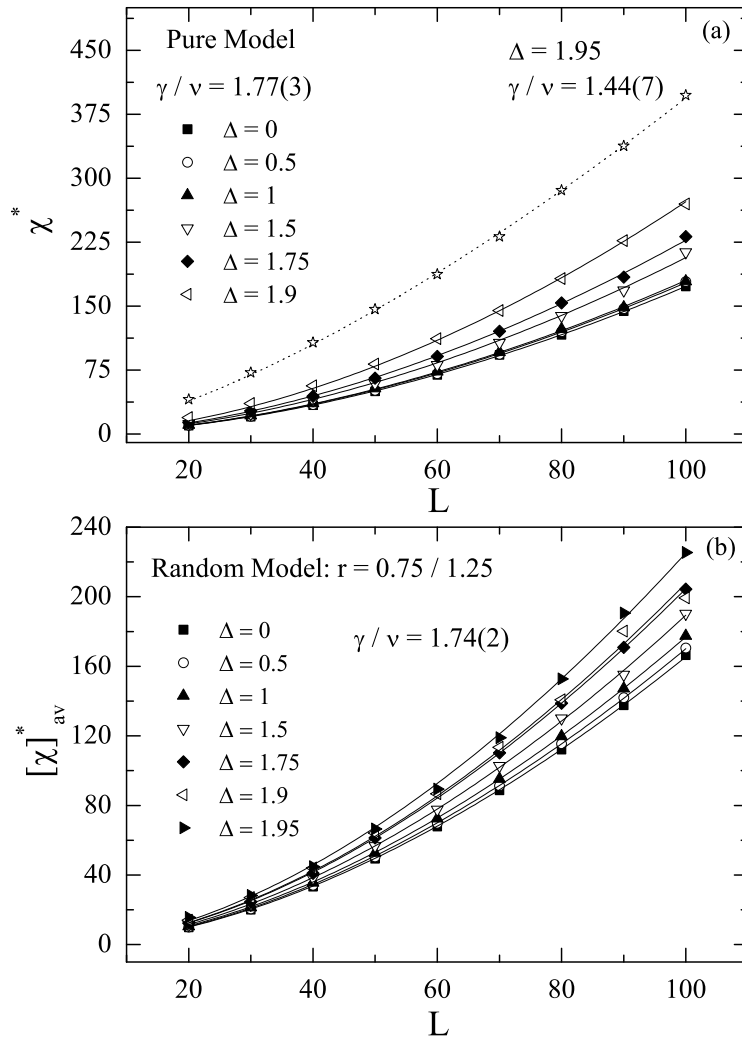
Τα σχήματα 3.16 και 3.17 δείχνουν την αντίστοιχη ανάλυση FSS των υπολοίπων ποσοτήτων και επιβεβαιώνει ότι για σχετικά μικρές τιμές της αταξίας και κρυσταλλικού πεδίου ισχύει η κλάση οικουμενικότητας του $2d$ μοντέλου Ising.



Σχήμα 3.14: FSS των μεγίστων της ειδικής θερμότητας για το απλό και το $2d$ μοντέλο τυχαίων δεσμών BC στις ίδιες τιμές Δ . (a) Απλό μοντέλο: Γραμμικές παρεμβολές υποθέτοντας την αναμενόμενη λογαριθμική απόκλιση των μοντέλων Ising. (b) Τυχαίο μοντέλο: γραμμικές προσαρμογές υποθέτοντας διπλή λογαριθμική απόκλιση. Αξιοσημείωτη είναι η σταθερή πτώση του διπλού λογαριθμικού πλάτους C_2 .

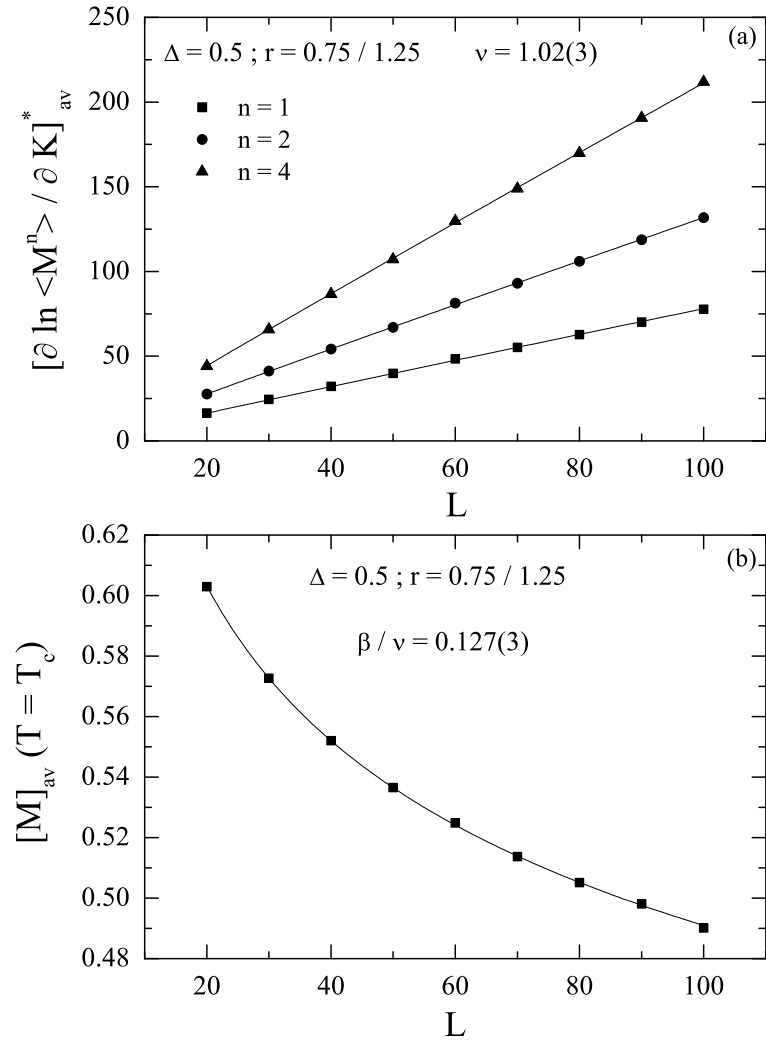
3.3.6 Εκτίμηση πολυ-κρίσιμων σημείων

Από τις τιμές του σχήματος 3.14(a), του απλού μοντέλου, αγνοώντας την $\Delta = 1.95$ για την οποία τα φαινόμενα crossover είναι πολύ ισχυρά εκτιμήθηκε η τιμή του κρυσταλλικού πεδίου στο τρικρίσιμο ση-



Σχήμα 3.15: FSS των μεγίστων της μαγνητικής επιδεκτικότητας για το απλό και το 2d μοντέλο τυχαίων δεσμών BC στις ίδιες τιμές Δ . (a) Απλό μοντέλο: ταυτόχρονη παρεμβολή απλού νόμου δύναμης στις πρώτες πέντε τιμές του κρυσταλλικού πεδίου και ξεχωριστά κοντά στο τρικρίσιμο σημείο για $\Delta = 1.95$. (b) Τυχαίο μοντέλο: ταυτόχρονη προσαρμογή των μεγίστων της μέσης τιμής της επιδεκτικότητας σε όλο το εύρος του Δ . Η πιο ομαλή συμπεριφορά του τυχαίου μοντέλου αντικατοπτρίζεται στην εκτίμηση του κρίσιμου εκθέτη γ/ν .

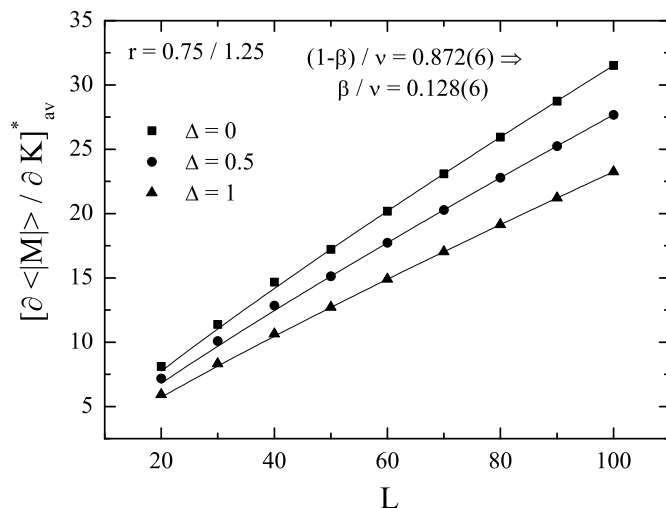
μείο προσαρμόζοντας τα φθίνοντα λογαριθμικά πλάτη C_2 σε κατάλληλο νόμο δύναμης (σχήμα 3.18). Παρά τα προβλήματα εκτίμησης της ειδικής θερμότητας καθώς τα σφάλματα των C_2 είναι μεγάλα ήταν δυνατόν



Σχήμα 3.16: (a) Ανάλυση FSS των παραγώγων του λογαρίθμου τριών δυνάμεων της παραμέτρου τάξεως ($n = 1, 2, 4$) για $\Delta = 0.5$ και τιμή αταξίας $r = 0.75/1.25$. (b) κλασική ανάλυση FSS της παραμέτρου τάξης στην εκτιμώμενη κρίσιμη θερμοκρασία.

να καταλήξουμε στην προσεγγιστική τιμή $\Delta_t \approx 1.96(1)$, η οποία είναι σύμφωνη με την αντίστοιχη τιμή της [10] $\Delta_t = 1.9655(10)$.

Από την ανάλυση των αντίστοιχων σημείων για το τυχαίο μοντέλο του σχήματος 3.14(b) $r = 0.75/1.25$, έγινε η αντίστοιχη διαδικασία για να εντοπιστεί η τιμή του κρυσταλλικού πεδίου όπου η περιοχή του $2d$ τυχαίου μοντέλου Ising συναντά την περιοχή του μοντέλου ισχυρής αταξίας. Η προσαρμογή του νόμου δύναμης έγινε στα σημεία των διπλά λο-

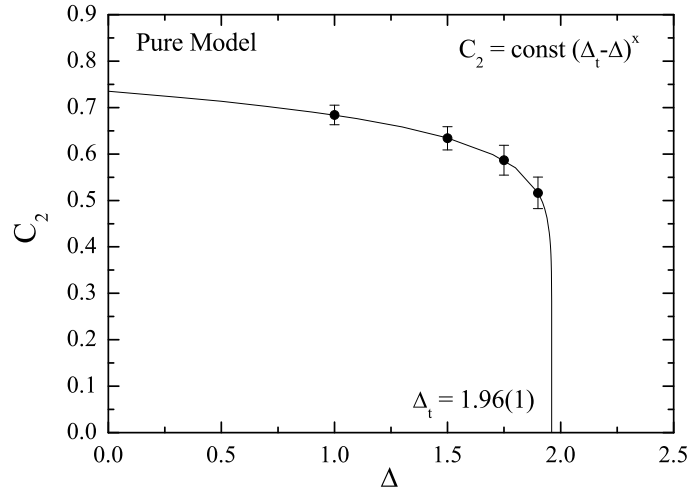


Σχήμα 3.17: Ταυτόχρονη παρεμβολή στον απλό νόμο δύναμης των κορυφών της παραγώγου του απολύτου της μαγνήτισης για τρεις τιμές κρυσταλλικού πεδίου και $r = 0.6$. Η προσαρμογή δίνει εκτίμηση για τον κρίσιμο εκθέτη $(1 - \beta)/\nu$ και β/ν υποθέτοντας $\nu = 1$.

γαριθμικών πλατών. Στο σχήμα 3.19 παρατίθεται η διαδικασία προσαρμογής για τις τρεις περιπτώσεις τυχαίων δεσμών. Τα σφάλματα είναι πολύ μικρότερα από τα αντίστοιχα του απλού μοντέλου. Φαίνεται ότι το μέτωπο της περιοχής οικουμενικότητας ισχυρής αταξίας κινείται σε χαμηλότερες τιμές του κρυσταλλικού πεδίου ($r = 0.9/1.1$, $\Delta_{sd} = 1.963(8)$), ($r = 0.75/1.25$, $\Delta_{sd} = 1.955(5)$), και ($r = 0.6/1.4$, $\Delta_{sd} = 1.879(12)$). Η συμπεριφορά είναι πιθανό αποτέλεσμα του ανταγωνισμού των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των σπιν και του κρυσταλλικού πεδίου, κάτι το οποίο επιβεβαιώνει η μελέτη στην θεμελιώδη κατάσταση § 3.3.7

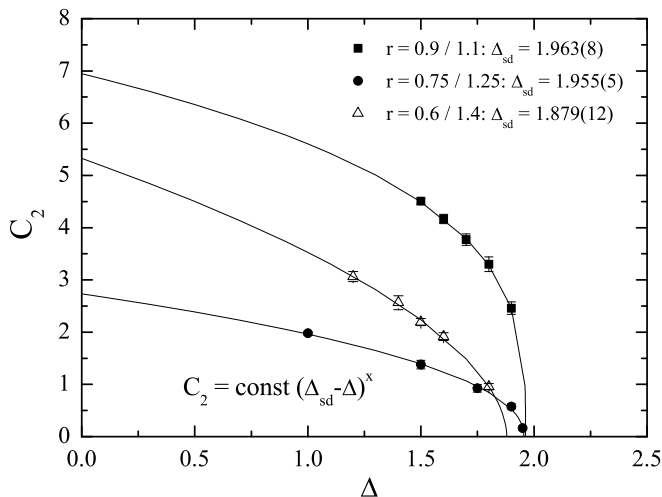
3.3.7 Θεμελιώδης κατάσταση

Παρουσία αταξίας στους δεσμούς, ο ανταγωνισμός μεταξύ σιδηρομαγνητικών αλληλεπιδράσεων και κρυσταλλικού πεδίου αποσταθεροποιεί τη σιδηρομαγνητική θεμελιώδη κατάσταση (GS). Αυτό το φαινόμενο συμβαίνει σε καθεστώς ισχυρής αταξίας και για αρκετά μεγάλες τιμές του κρυσταλλικού πεδίου, προκαλώντας μη κορεσμένη θεμελιώδη κατάσταση. Παρατηρούμε ότι υπάρχει κατά μέσο όρο για μεγάλο δείγμα υλοποιήσεων τμήμα περίπου 6.25% των σπιν του πλέγματος με ασθενείς αλληλεπιδράσεις (J_2). Έτσι σε καθεστώς ισχυρής αταξίας (μι-

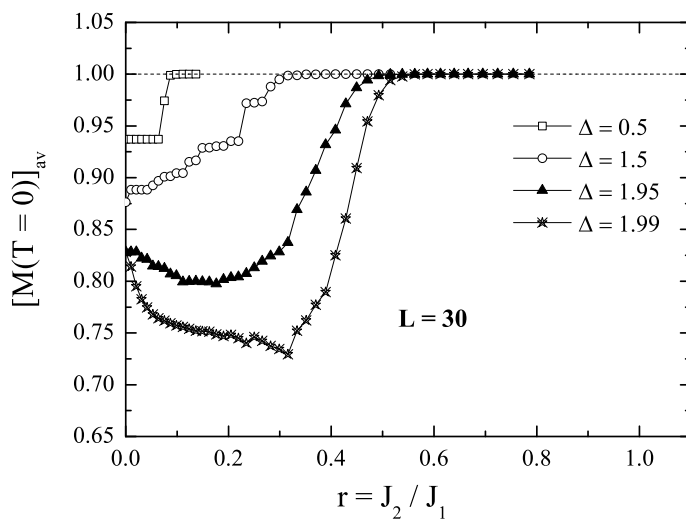


Σχήμα 3.18: Προσεγγιστική εκτίμηση της τιμής του κρυσταλλικού πεδίου στο τρικρίσιμο σημείο προσαρμόζοντας στο νόμο δύναμης που παρατίθεται στο σχήμα, τα φθίνοντα λογαριθμικά πλάτη C_2 στις κατάλληλες τιμές του κρυσταλλικού πεδίου.

κρού J_2) στις πλεγματικές θέσεις αυτές θα έχουν σπιν $s_i = 0$ στην $T = 0$ όταν ισχύει η συνθήκη $\Delta > 4J_2$. Επομένως για ισχυρή αταξία και $\Delta > 4J_2$ αρχίζουν να κατανέμονται κενές θέσεις $s_i = 0$. Ορίζουμε ασθενές συσσωμάτωμα (weak cluster) το σύνολο των σπιν με $s_i = 0$. Η δομή των ασθενών συσσωματωμάτων ενδέχεται να επηρεάζει την γενικότερη κρίσιμη συμπεριφορά του συστήματος. Για τον λόγο αυτό μελετήθηκε η θεμελιώδης κατάσταση του μοντέλου χρησιμοποιώντας αλγόριθμο μέγιστης ροής πολυωνυμικής πολυπλοκότητας [63]. Η μέση τιμή της μαγνήτισης στη θεμελιώδη κατάσταση παρατίθεται στο σχήμα 3.20.



Σχήμα 3.19: Εκτίμηση του κρυσταλλικού πεδίου του πολύ-κρίσιμου σημείου Δ_{sd} στο σημείο που η κλάση οικουμενικότητας του τυχαίου μοντέλου Ising συναντά αυτήν του μοντέλου με ισχυρή αταξία, για τα τρία $2d$ μοντέλα τυχαίων δεσμών BC.



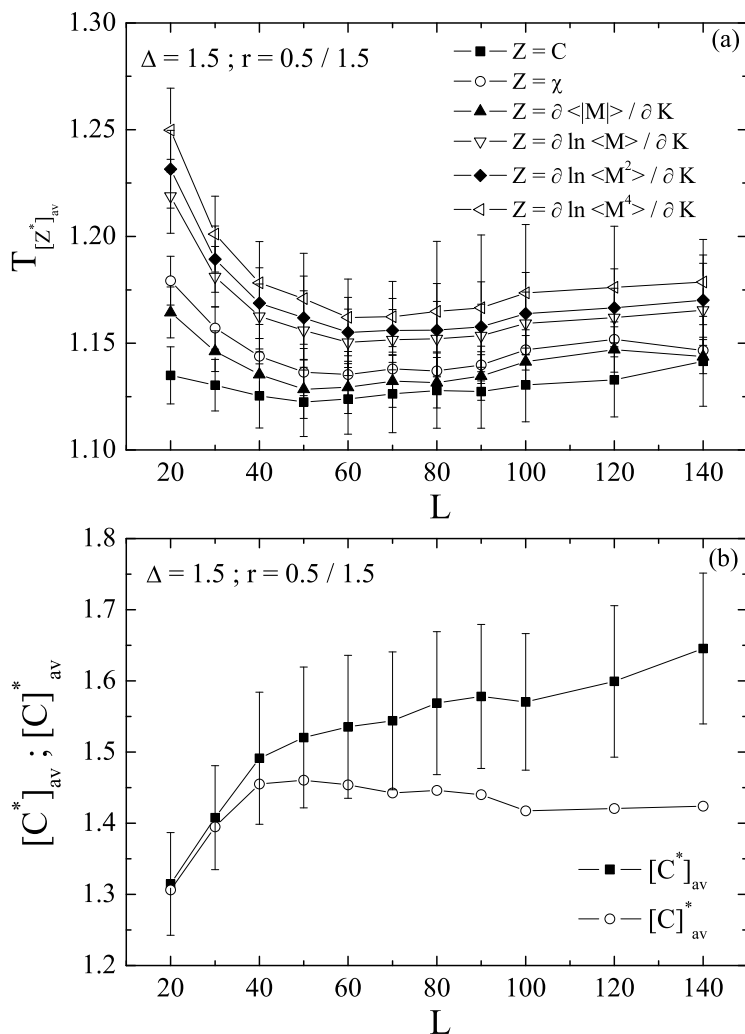
Σχήμα 3.20: Η παράμετρος τάξης στην θεμελιώδη κατάσταση του $2d$ μοντέλου BC τυχαίων δεσμών σε σχέση με την r για διάφορες τιμές $\Delta = 0.5, 1.5, 1.95$ αθροισμένη στο σύνολο 250 υλοποιήσεων.

3.3.8 Περιοχή ισχυρής αταξίας

Η περιοχή αυτή χαρακτηρίζεται από έλλειψη αυτοαθροιστικότητας και ισχυρά φαινόμενα πεπερασμένου μεγέθους, κάτι που δυσκολεύει πολύ την διαδικασία της προσομοίωσης MC. Τόσο στη μετάβαση πρώτης τάξης όσο και στη μετάβαση πρώην πρώτης και νυν δεύτερης τάξης η εργασία [105] έδειξε ότι το σύνθητες μέτρο πεπερασμένου μεγέθους [2] σχετικής διακύμανσης $R_X = V_X/[X]_{av}^2$, όπου $V_X = [X^2]_{av} - [X]_{av}^2$ με $X = \chi^*$ τα μέγιστα της επιδεκτικότητας, δείχνει έλλειψη αυτοαθροιστικότητας.

Συγκεκριμένα, για μοντέλα αταξίας $r = 0.75/1.25$ το παραπάνω μέτρο στην περιοχή πρώην πρώτης τάξης $\Delta = 1.975$ είναι περίπου 12 φορές μεγαλύτερο από αυτό της περιοχής πρώην (και νυν) δεύτερης τάξης $\Delta = 1$. Το σχήμα 3.21 καταδεικνύει δύο σημαντικά χαρακτηριστικά της συμπεριφοράς του μοντέλου για πεδίο $\Delta = 1.5$ και $r = 0.5/1.5$. Συγκεκριμένα στο 3.21(a) έχουμε την τεράστια δειγματική διακύμανση όλων των ψευδοκρίσιμων θερμοκρασιών της ανάλυσης FSS. Οι δοκιμές επεκτάθηκαν σε μεγαλύτερα πλέγματα ($L = 20 - 140$) και ο αριθμός διαφορετικών δειγμάτων που μελετήθηκε ήταν $N_s = 500$. Είναι φανερό ότι ο αριθμός των υλοποιήσεων δεν επαρκεί λόγω ισχυρών φαινομένων πεπερασμένου μεγέθους.

Στο σχήμα 3.21(b) παρουσιάζεται η διαφορά μεταξύ του μέγιστου της μέσης τιμής της ειδικής θερμότητας ($[C]_{av}^*$) και της μέσης τιμής των μεγίστων της ειδικής θερμότητας ($[C^*]_{av}$) η οποία έχει τεράστια διακύμανση. Παρόμοια συμπεριφορά στην ειδική θερμότητα παρουσιάζει το 3d πρότυπο Ising τυχαίου πεδίου [114]. Στο σχήμα 3.21(b) φαίνεται καθαρά η τάση κορεσμού και μπορούμε να υποθέσουμε ότι ισχύει και για τα δύο μέγιστα αν και η $[C^*]_{av}$ θα ισορροπήσει σε μεγάλα πλέγματα λόγω των ισχυρών φαινομένων πεπερασμένου μεγέθους. Φαίνεται ότι η περίπτωση $\Delta = 1.5$, $r = 0.5/1.5$ είναι κοντά στο σύνορο με την περιοχή ισχυρής αταξίας. Πρέπει να σημειωθεί ότι για αυτή την αταξία, η θεμελιώδης κατάσταση αρχίζει να μην είναι πλήρως σιδηρομαγνητική και να γίνεται μερικώς κορεσμένη (σχ. 3.20). Φαίνεται δηλαδή ότι η θεμελιώδης κατάσταση αντικατοπτρίζει το καθεστώς αταξίας στο οποίο βρίσκεται το σύστημα.



Σχήμα 3.21: Συμπεριφορά πεπερασμένου μεγέθους για την περίπτωση $\Delta = 1.5$ και $r = 0.5/1.5$. (a) Ψευδοκρίσιμες θερμοκρασίες για τις οποίες τα δειγματικά σφάλματα είναι πολύ μεγάλα. (b) Δύο μέγιστα της ειδικής θερμότητας $[C]_{av}^*$ και $[C]_{av}^*$ με επίσης μεγάλες δειγματικές διακυμάνσεις.

3.3.9 Συμπεράσματα

Τόσο η μελέτη του απλού 2d μοντέλου BC όσο και του αντίστοιχου τυχαίων δεσμών για τιμή αταξίας $r = 0.75/1.25$ έδειξε ότι υπάρχει ενίσχυση της σιδηρομαγνητικής φάσης με την εισαγωγή αταξίας και η τομή των δύο διαγραμμάτων φάσης είναι στο $(\Delta_{cross}, T_{cross}) =$

(1.66(2), 1.02(3)), πολύ πριν το τρικρίσιμο σημείο. Για την ίδια τιμή αταξίας και τιμές μικρού κρυσταλλικού πεδίου ισχύει το σενάριο της Οικουμενικότητας Ising με πιθανές λογαριθμικές διορθώσεις. Στην περιοχή όπου η κλάση οικουμενικότητας $2d$ τυχαίου μοντέλου Ising συναντά την περιοχή κλάσης οικουμενικότητας ισχυρής αταξίας η ειδική θερμότητα έχει διορθώσεις διπλού λογαρίθμου από την κλίση των οποίων εκτιμήθηκαν τα πολυ-κρίσιμα σημεία.

Η περίπτωση $\Delta = 1.5$, $r = 0.5/1.5$ ισχυρής αταξίας, από την μελέτη θεμελιώδους κατάστασης καθώς από τη μελέτη πεπερασμένης θερμοκρασίας φαίνεται να βρίσκεται στο σύνορο μεταξύ ασθενούς και ισχυρής αταξίας κλάσης οικουμενικότητας, όπου επικρατούν εξαιρετικά ισχυρά φαινόμενα πεπερασμένου μεγέθους και έλλειψη αυτοαθροιστικότητας.

3.4 3d πρότυπο Blume-Capel αταξίας αλληλεπιδράσεων

Σε αυτό το κεφάλαιο εξετάζεται το κυβικό πρότυπο Blume-Capel (BC) με παγωμένη τυχαιότητα αλληλεπιδράσεων. Δεδομένου ότι το διάγραμμα φάσης του απλού κυβικού BC περιλαμβάνει δεύτερης και πρώτης τάξης μεταβάση φάσης, το συγκεκριμένο πρότυπο δίνει την δυνατότητα ταυτόχρονης μελέτης της επίδρασης της αταξίας στις μεταβάσεις πρώτης και δεύτερης τάξης. Όπως είναι γνωστό, όταν εισάγεται παγωμένη τυχαιότητα οι μεταβάσεις δεύτερης τάξης αλλάζουν κλάση οικουμενικότητας βάσει του κριτηρίου Harris [15, 60]. Για $d > 2$, οι μεταβάσεις πρώτης τάξης μετατρέπονται σε δεύτερης τάξης όταν η εισηγμένη τυχαιότητα ξεπερνά ένα κατώφλι [71, 130]. Επιπλέον υπολογισμοί ομάδας επανακανονικοποίησης στα συστήματα τρικρίσιμων σημείων φαίνεται να υποστηρίζουν ότι όχι μόνο οι μεταβάσεις πρώτης τάξης γίνονται δεύτερης, αλλά και ότι αυτές ανήκουν σε διαφορετικό ισχυρής σύζευξης σταθερό σημείο [45], το θέμα όμως παραμένει ανοιχτό.

Η δεύτερης τάξης μετάβαση φάσης του απλού κυβικού προτύπου BC, ανήκει στην οικουμενικότητα του απλού κυβικού προτύπου Ising για το οποίο έχει μελετηθεί εκτεταμένα η επίδραση παγωμένης τυχαιότητας. Σύμφωνα με πρόσφατες αριθμητικές μελέτες [5, 13, 65, 69, 175], η επικρατούσα άποψη για την κρίσιμη συμπεριφορά του απλού κυβικού προτύπου Ising με παγωμένη τυχαιότητα είναι ότι ελέγχεται από ένα νέο σταθερό σημείο, το οποίο είναι ανεξάρτητο από την ισχύ της τυχαιότητας αλλά και τον τρόπο υλοποίησής της. Έτσι, στην κλάση οικουμενικότητας του τυχαίου προτύπου Ising (random Ising model - RIM) ανήκουν τα αραιά πρότυπα θέσης και δεσμού [5, 13, 65], τα πρότυπα με τυχαιότητα στο μέτρο ενέργειας ανταλλαγής [175] καθώς και το πρότυπο ύαλου σπιν Edwards-Anderson [69, 142, 143].

Σχετική μελέτη προτύπου αταξίας τριών διαστάσεων είναι αυτή του $q = 3$ προτύπου Potts με τυχαιότητα στις θέσεις των Ballesteros κ.ά. [6], η καθαρή του εκδοχή του οποίου, παρουσιάζει ασθενή πρώτης τάξης μετάβαση φάσης. Η μελέτη έδειξε καθαρά μετατροπή της μετάβασης σε δεύτερης τάξης. Εξ άλλου αντίστοιχη μελέτη του τριών διαστάσεων $q = 4$ προτύπου Potts με τυχαιότητα στις θέσεις [35], έδειξε ότι η ισχυρή πρώτης τάξης μετάβαση φάσης γίνεται και αυτή δεύτερης τάξης.

3.4.1 Απλό και τυχαίο 3d πρότυπο BC

Το απλό κυβικό μοντέλο BC [23,32] ορίζεται από την εξής Χαμιλτονιανή:

$$H_p = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j + \Delta \sum_i s_i^2, \quad (3.5)$$

όπου οι μεταβλητές s_i παίρνουν τιμές $\pm 1, 0$. Το $\langle ij \rangle$ συμβολίζει την άθροιση στο σύνολο των γειτονικών ζευγαριών, $J > 0$ είναι η σιδηρομαγνητική αλληλεπίδραση ανταλλαγής και η παράμετρος Δ είναι το κρυσταλλικό πεδίο ².

Το μοντέλο έχει μεγάλη θεωρητική σημασία στη μελέτη των μεταβάσεων φάσης και κρίσιμων φαινομένων και έχει μελετηθεί επισταμένα [10,22,23,32,33,40,41,50,77,94,95,105,129,161,169]. Το διάγραμμα φάσης του μοντέλου αποτελείται από ένα μέρος συνεχούς μετάβασης τύπου Ising στις υψηλές θερμοκρασίες και χαμηλές τιμές του κρυσταλλικού πεδίου το οποίο καταλήγει στο τρικρίσιμο σημείο (Δ_t, T_t) όπου συναντώνται οι δεύτερης τάξης με την πρώτη τάξης μετάβαση η οποία καταλήγει στο σημείο $(\Delta = 3, T = 0)$. Το τρικρίσιμο σημείο έχει εκτιμηθεί από τον Deserno [41] μέσω μικροκανικής προσέγγισης MC στο σημείο $[\Delta_t, T_t] = [2.84479(30), 1.4182(55)]$ και η ακριβέστερη μεταγενέστερη εργασία των Deng και Blöte [40] έδωσε $[\Delta_t, T_t] = [2.8478(9), 1.4019(2)]$.

Η εκδοχή του μοντέλου αταξίας τυχαίων δεσμών που μελετήσαμε ακολουθεί την δίτιμη κατανομή:

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{2} [\delta(J_{ij} - J_1) + \delta(J_{ij} - J_2)]; \quad (3.6)$$

$$\frac{J_1 + J_2}{2} = 1; \quad J_1 > J_2 > 0; \quad r = \frac{J_2}{J_1},$$

όπου η παράμετρος r αντιστοιχεί στην ισχύ της αταξίας ενώ ο λόγος του πλήθους ισχυρών προς ασθενών δεσμών είναι ίσος με 1. Η Χαμιλτονιανή που περιγράφει το μοντέλο γίνεται:

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} s_i s_j + \Delta \sum_i s_i^2. \quad (3.7)$$

3.4.2 Διαδικασία προσομοίωσης

Σκοπός μας είναι να μελετηθούν οι επιδράσεις της αταξίας τόσο στην περιοχή συνεχούς μετάβασης όσο και στην περιοχή πρώτης τάξης. Η τιμή $\Delta = 2.9$ εξασφαλίζει ότι βρισκόμαστε στην περιοχή πρώτης τάξης.

²Η κλίμακα θερμοκρασίας έχει τεθεί τέτοια ώστε $J = 1$ και $k_B = 1$

Επίσης, επιλέχθηκε η τιμή $r = 0.5/1.5 = 1/3$, η οποία εκτιμήθηκε ότι είναι αρκετά ισχυρή ώστε να μπορεί να μεταβάλλει την πρώτη τάξης μετάβαση σε δεύτερης τάξης. Για την περιοχή πρώην δεύτερης τάξης επιλέξαμε το σημείο $(\Delta, r) = (1, 1/3)$.

Για την προσομοίωση του μοντέλου χρησιμοποιήθηκε μέθοδος PT § 2.5 με χρήση υβριδικού αλγόριθμου τοπικών κινήσεων Wolff [96, 128, 174] - Metropolis [122], όπως έχει προταθεί στην εργασία [22]. Η ανάγκη ανάμειξης του αλγόριθμου Wolff έγκειται στο ότι ο Wolff δεν επιδρά σε σπιν $s = 0$. Σε αυτό το υβριδικό σχήμα, πραγματοποιούνται περίπου πέντε κινήσεις Wolff για κάθε μία σάρωση πλέγματος Metropolis. Σχετικές δοκιμές που πραγματοποιήσαμε έδειξαν την ανωτερότητα του υβριδικού αλγορίθμου έναντι του απλού αλγορίθμου Metropolis [107].

Όσον αφορά στη διαδικασία επιλογής θερμοκρασιών της διαδικασίας PT επιλέξαμε τον αλγόριθμο CAE § 2.5.2, με ρυθμό ανταλλαγής $r = 0.5$ ο οποίος έδωσε από 3 έως 5 θερμοκρασίες.

Η δειγματοληψία σε κάθε σημείο έγινε σε εύρος γραμμικού μεγέθους $L = 8 - 44$ πραγματοποιώντας περίπου 100 υλοποιήσεις τυχαιότητας για κάθε πλέγμα. Τόσο οι χρόνοι δειγματοληψίας όπως και το πλήθος υλοποιήσεων ελέγχθηκαν με κατάλληλες δοκιμές. Ενδεικτικά, για πλέγμα $L = 16$ οι δειγματικοί μέσοι 150 διαφορετικών υλοποιήσεων όλων των θερμοδυναμικών ποσοτήτων ήταν πανομοιότυποι ανεξαρτήτως του τοπικού αλγορίθμου που χρησιμοποιήθηκε. Να σημειωθεί ότι οι διακυμάνσεις στις υλοποιήσεις είναι πολύ μεγαλύτερες από τις θερμικές διακυμάνσεις.

3.4.3 Περιοχή πρώην δεύτερης τάξης: Κλάση οικουμενικότητας RIM

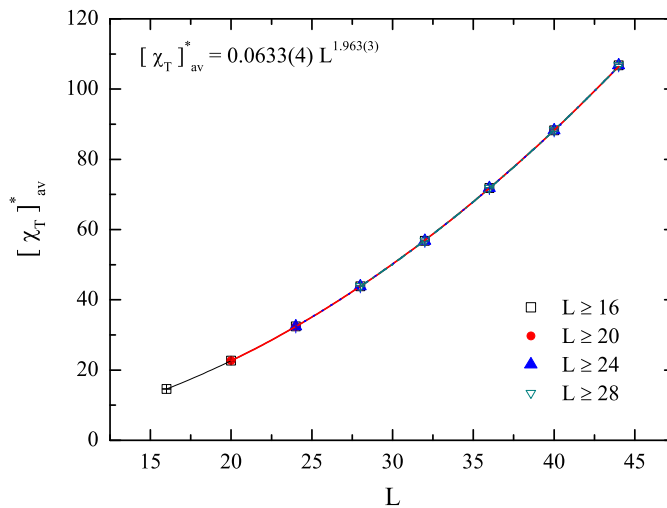
Η περιοχή πρώην δεύτερης τάξης του απλού προτύπου μελετήθηκε στην περίπτωση $(\Delta, r) = (1, 1/3)$ για εύρος πλεγματοικών μεγεθών $L = 8 - 44$. Η υπόθεση οικουμενικότητας υποδεικνύει ότι το απλό κυβικό μοντέλο στο $\Delta = 1$ ανήκει στην κλάση οικουμενικότητας του κυβικού προτύπου Ising. Επομένως, η κρίσιμη συμπεριφορά της συγκεκριμένης περίπτωσης αταξίας αναμένεται να ανήκει στην οικουμενικότητα του κυβικού τυχαίου προτύπου Ising (RIM) § 1.3.2, στην οποία ανήκει πληθώρα συστημάτων [5, 13, 53, 69].

Η ταυτοποίηση της κλάσης του RIM παρουσιάζει συχνά σημαντικές δυσκολίες λόγω των ισχυρών φαινομένων crossover όπως υποδεικνύει η εργασία των Berche κ.ά. [13]. Για τη συγκέντρωση μαγνητικών δεσμών $p = 0.7$ την οποία μελέτησαν βρήκαν ενεργό εκθέτη μήκους συσχέτισης $(1/\nu)_{eff} = 1.52(2)$. Αντίστοιχα για $p = 0.55$ βρήκαν $(1/\nu)_{eff} = 1.46(2)$. Η

μεγάλη διαφοροποίηση είναι ένδειξη της ανάγκης διορθώσεων (confluent corrections) και ίσως όρων crossover [13]. Δεχόμενοι ότι στην $p = 0.55$ οι διορθώσεις είναι μικρές τα αποτελέσματα συμφωνούν με αυτά των Ballesteros κ.ά. [5].

Το πρόβλημα αργά φθινουσών διορθώσεων κλιμάκωσης έχει λεπτομερώς μελετηθεί σε συστήματα με τυχαιότητα θέσης αλλά και δεσμών από τους Hasenbusch κ.α. [65]. Για τα τελευταία προτάθηκε ότι στην τιμή $p = 0.54(2)$ οι πρώτοι διορθωτικοί όροι κλιμάκωσης εξαφανίζονται.

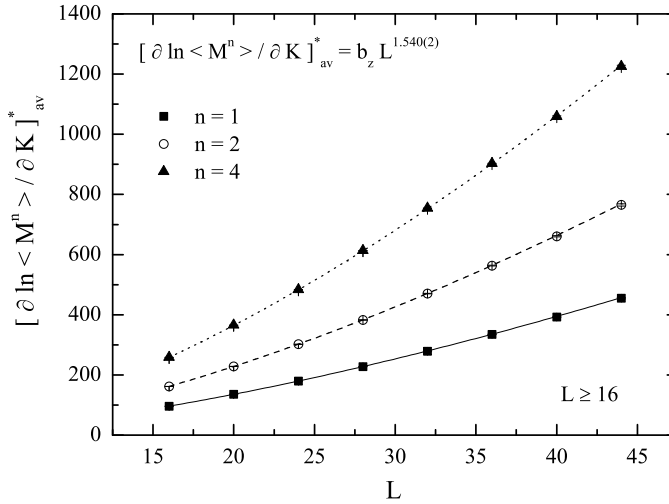
Ξεκινάμε την εκτίμηση του κρίσιμου εκθέτη της επιδεκτικότητας από τον νόμο κλιμάκωσης (1.48). Οι προσπάθειες προσαρμογής είχαν καλό αποτέλεσμα και έγιναν στα εύρη μεγεθών $L = 8-44, 12-44, \dots, 28-44$ από όπου εξάγεται εκθέτης γ/ν . Οι συντελεστές $\gamma/\nu = 1.962 - 1.967$ έχουν καλή σύγκλιση, όσο μεγαλώνει το L_{min} από $L_{min} = 8$ σε $L_{min} = 28$. Μπορεί να εξαχθεί η μέση τιμή των εκτιμήσεων για κάθε εύρος κάνοντας ταυτόχρονη προσαρμογή, το οποίο και επιχειρήσαμε στα εύρη $L = 16-44, 20-44, 24-44$ και $L = 28-44$ και παρουσιάζουμε στο σχήμα 3.22. Η τιμή που προέκυψε είναι $\gamma/\nu = 1.963(3)$, σε πλήρη συμφωνία με τους Ballesteros κ.α. [5] και Berche κ.α. [13]. Παρατηρώντας την τάση της παραπάνω ταυτόχρονης προσαρμογής βρέθηκε $\gamma/\nu = 1.964(4)$ ταυτόσημη δηλαδή με την τιμή $\gamma/\nu = 1.965(10)$ την οποία έδωσε ο Berche κ.α. [13] για την περίπτωση $p = 0.7$.



Σχήμα 3.22: Απόκλιση των μέγιστων της επιδεκτικότητας και ταυτόχρονη προσαρμογή των δεδομένων διαφόρων μεγεθών.

Παρόμοια ανάλυση έγινε στα μέγιστα της παραγωγού του απολύτου της παραμέτρου τάξης §1.53 και έδωσε $(1 - \beta)/\nu = 1.022(5)$. Συνδυάζοντας τα παραπάνω και δεχόμενοι συνθήκη υπερκλιμάκωσης της μορφής $2/\nu = 2(1 - \beta)/\nu + (d - \gamma/\nu)$ βρίσκουμε $1/\nu = 1.54(1)$.

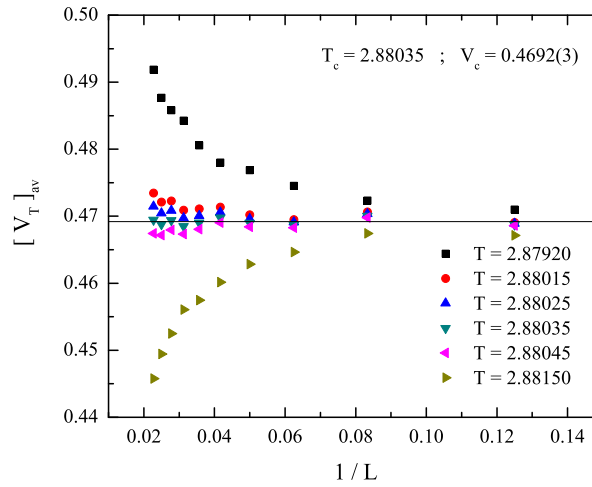
Σύμφωνα με το σύνηθες σχήμα ανάλυσης FSS §1.2.4 συνεχίζουμε με την εκτίμηση του εκθέτη μήκους συσχέτισης από τη συμπεριφορά των μεγίστων των παραγωγών του λογαρίθμου δυνάμεων της παραμέτρου τάξης §1.51 για δυνάμεις $n = 1, 2$ και $n = 4$. Οι προσπάθειες προσαρμογής ήταν επιτυχείς και έδωσαν όλες τιμή κοντά στην $1/\nu = 1.54$. Στο σχήμα 3.23 παρουσιάζεται μία τέτοια ταυτόχρονη προσαρμογή. Η ανάλυση φαίνεται να υπακούει στην υπερκλιμάκωση.



Σχήμα 3.23: Συμπεριφορά FSS των μεγίστων των παραγωγών του λογαρίθμου δυνάμεων $n = 1, 2$ και $n = 4$ της παραμέτρου τάξης του αντιστρόφου της θερμοκρασίας. Η εκτίμηση για τον κρίσιμο εκθέτη $1/\nu$ παρατίθεται στο υπόμνημα εφαρμόζοντας ταυτόχρονη προσαρμογή του απλού νόμου δύναμης για το πλεγματοεικό εύρος $L = 16 - 44$.

Ακολουθεί η ανάλυση FSS που έγινε στις ψευδοκρίσιμες θερμοκρασίες βάσει του νόμου κλιμάκωσης $T_{[Z]_{av}^*} = T_c + b_Z \cdot L^{-1/\nu}$ (1.49) από την οποία εξαγονται ο κρίσιμος εκθέτης του μήκους συσχέτισης και η κρίσιμη θερμοκρασία. Η προσαρμογή έγινε στα εύρη από $L = 8 - 44$ έως $L = 28 - 44$. Με εξαίρεση την προσαρμογή στο εύρος $L = 8 - 44$ η οποία έδωσε $1/\nu = 1.465(1)$ όλες οι άλλες εκτιμήσεις ($1/\nu = 1.52 - 1.54$) συμφωνούν με τα προηγούμενα ευρήματα. Παρατηρήθηκε εξάλλου ισχυρή

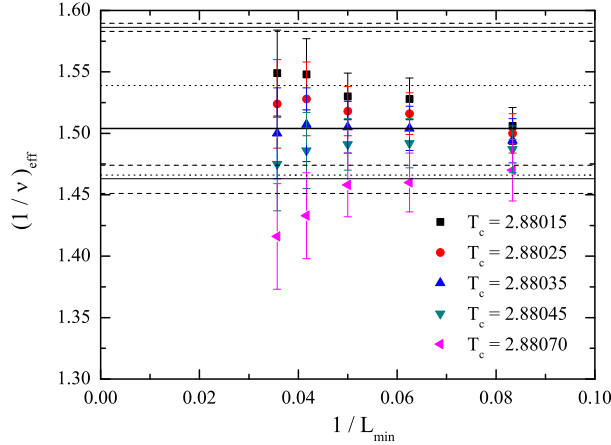
μετατόπιση στην τιμή της κρίσιμης θερμοκρασίας από $T_c = 2.8798$ ως $T_c = 2.88015$ μεταβάλλοντας το L_{min} από $L_{min} = 8$ σε $L_{min} = 28$. Από την εξέταση του αθροιστή Binder τέταρτης τάξης §1.2.4, (σχήμα 3.24) η κρίσιμη θερμοκρασία φαίνεται να βρίσκεται σε υψηλότερη τιμή στο εύρος $T_c = 2.88015 - 2.88045$. Προτείνεται η τιμή $T_c = 2.88035$ στην οποία ο αθροιστής Binder είναι ανεξάρτητος του L .



Σχήμα 3.24: Ασυμπτωτική συμπεριφορά του αθροιστή Binder της παραμέτρου τάξης.

Ο νόμος δύναμης των ψευδοκρίσιμων $T_L^* = T_c + bL^{-1/\nu}$ (1.49) μπορεί να δώσει εκτίμηση για τον κρίσιμο εκθέτη $1/\nu$ παγώνοντας την τιμή της κρίσιμης θερμοκρασίας. Έτσι χρησιμοποιήθηκαν 5 κρίσιμες θερμοκρασίες ($T_c = \{2.88015, 2.88025, 2.88035, 2.88045, 2.88070\}$). Σε κάθε μία έγινε ανάλυση FSS μεταβάλλοντας όπως και πριν το L_{min} από $L_{min} = 12$ σε $L_{min} = 28$ και παράγοντας μέσω ταυτόχρονης παρεμβολής τις αντίστοιχες εκτιμήσεις για τον εκθέτη (σχήμα 3.25). Από το σχήμα 3.25 φαίνεται καθαρά ότι το αποτέλεσμα είναι πολύ ευαίσθητο στην επιλογή κρίσιμης θερμοκρασίας. Επιπλέον πραγματοποιώντας γραμμική παρεμβολή στους επιμέρους ενεργούς εκθέτες για $L \geq 16$ και $T_c = 2.88035$ λάβαμε $1/\nu = 1.504$ η οποία αποτελεί την κύρια εκτίμηση. Η ανάλογη διαδικασία για $T_c = 2.88025$ έδωσε $1/\nu = 1.539$ ενώ η $T_c = 2.88045$, $1/\nu = 1.466$. Οι παραπάνω τιμές χρησιμοποιούνται σαν τις ακραίες τιμές του σφάλματος και συμβολίζονται με εστιγμένες. Στο σχήμα 3.25 περιλαμβάνονται επίσης οι τιμές του απλού μοντέλου Ising $3d \nu = 0.6304(13)$ [56], καθώς και η τιμή του RIM $\nu = 0.6837(53)$ [5].

Η τιμή του εκθέτη της για το 3d Ising $\nu = 0.6304(13)$ [56] χαρακτηρίζεται από αρκετά μεγάλο σφάλμα ενώ η μεταγενέστερη τιμή $\nu = 0.63002(10)$ του Hasenbusch [67] είναι ακριβέστερη.



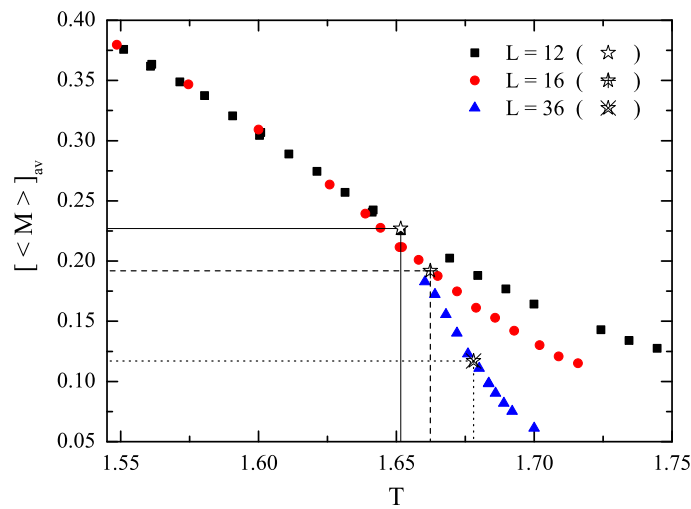
Σχήμα 3.25: Συνολική εικόνα των εκτιμήσεων των ενεργών εκθετών $(1/\nu)_{eff}$. Η συνεχής γραμμή κοντά στην $1/\nu = 1.586$ μαζί με τις διακεκομμένες δείχνουν την τιμή του κρίσιμου εκθέτη του 3d μοντέλου Ising. Η αντίστοιχη τιμή για το RIM 3d παρατίθεται στην $1/\nu = 1.463$. Το εύρος $1/\nu = 1.466 - 1.539$ γύρω από την παχιά συνεχή $1/\nu = 1.504$ είναι οι τιμές όπως προέκυψαν από την FSS ανάλυση που περιγράφεται στο κείμενο.

Ακολουθώντας την αντίστροφη διαδικασία, παγώνοντας δηλαδή την τιμή του κρίσιμου εκθέτη $1/\nu = 1.463$ που προτείνει η [5], βρέθηκε ότι η κρίσιμη θερμοκρασία τείνει στην $T_c = 2.88035(10)$ η οποία φαίνεται και από τον αθροιστή Binder ότι είναι η κρίσιμη. Λόγω του ότι η μαγνήτιση κλιμακώνεται $\sim L^{-\beta/\nu}$ (1.44) στην κρίσιμη θερμοκρασία υπολογίστηκε η τιμή του εκθέτη για τις τέσσερις κρίσιμες θερμοκρασίες $T_c = \{2.88015, 2.88025, 2.88035, 2.88045\}$, οι οποίες έδωσαν $\beta/\nu = 0.51(1) - 0.52(1)$ οι οποίες μαζί με την τιμή $\gamma/\nu = 1.964(4)$ υπακούουν τη συνθήκη υπερκλιμάκωσης.

3.4.4 Περιοχή πρώην πρώτης τάξης

Στη συνέχεια εξετάζεται η επίδραση της τυχαιότητας δεσμών στο τμήμα της μετάβασης πρώτης τάξης του απλού μοντέλου. Στην τιμή $\Delta = 2.9$, για την οποία το σύστημα είναι βαθιά μέσα στην περιοχή

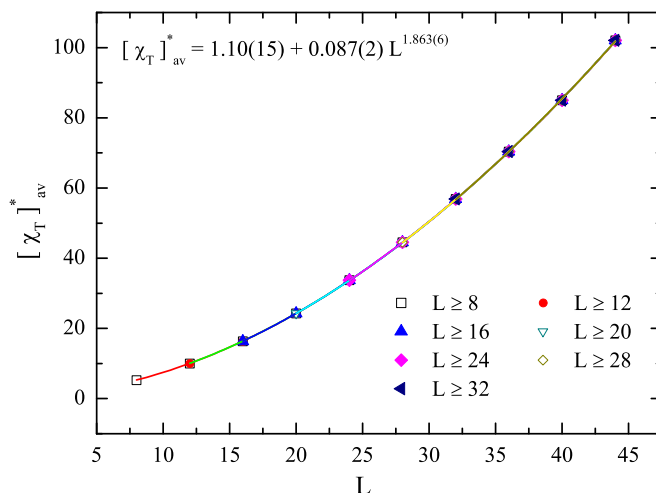
μετάβασης πρώτης τάξης, επιβεβαιώθηκε αριθμητικά ότι για $r = 1/3$ η περιοχή μετατρέπεται σε αυθεντική δεύτερης τάξης, όπως αποδεικνύει και το σχήμα 3.26. Στο σχήμα αυτό φαίνεται καθαρά ότι η παράμετρος τάξης είναι ομαλή στην περιοχή της ψευδοκρίσιμης θερμοκρασίας (της επιδεικτικότητας - κατακόρυφες γραμμές) και στα τρία μεγέθη $L = 12$, 16 και $L = 36$. Η έλλειψη ασυνέχειας στη μαγνήτιση είναι απόδειξη ότι για $(\Delta, r) = (2.9, 1/3)$ η μετάβαση είναι δεύτερης τάξης, την κρίσιμη συμπεριφορά της οποίας εξετάζουμε στη συνέχεια.



Σχήμα 3.26: Εικόνα της συνεχούς συμπεριφοράς της παραμέτρου τάξης για το κυβικό μοντέλο BC τυχαίων δεσμών για $(\Delta, r) = (2.9, 1/3)$. Στα τρία πλεγματικά μεγέθη $L = 12$, 16 και $L = 36$ η μαγνήτιση στα ψευδοκρίσιμα σημεία της επιδεικτικότητας (κατακόρυφες) δεν παρουσιάζει ασυνέχεια.

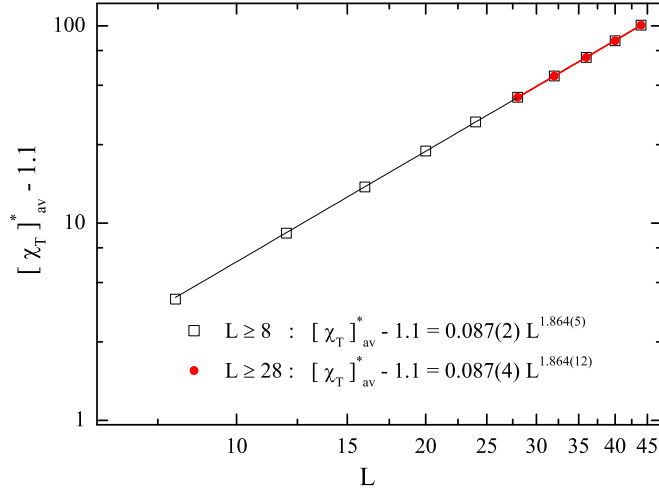
Ξεκινάμε την ανάλυση FSS από τις κορυφές της μαγνητικής επιδεικτικότητας. Δεχόμενοι ότι ο νόμος κλιμάκωσης είναι της μορφής: $[\chi_T]_{av}^* = b \cdot L^{\gamma/\nu}$ διαπιστώθηκε ότι η ανάλυση ήταν πολύ ασταθής σε σχέση με τα διαστήματα προσαρμογής $L = 8 - 44$, $12 - 44$, ... και υπήρχε ισχυρός ανταγωνισμός μεταξύ του συντελεστή b και του εκθέτη γ/ν . Αυτό έκανε φανερή την ανάγκη εισαγωγής διορθωτικού όρου στον νόμο κλιμάκωσης και βρέθηκε ότι η προσθήκη σταθερού όρου ήταν ο πιο αποδοτικός τρόπος απαλοιφής της αστάθειας. Ο νόμος κλιμάκωσης δηλαδή $[\chi_T]_{av}^* = a + b \cdot L^{\gamma/\nu}$ παρήγαγε αρκετά σταθερά αποτελέσματα ειδικά παγώνοντας τον σταθερό όρο μεταξύ $a = 1.0 - 1.2$. Στο σχήμα

3.27 φαίνεται ότι οι εκτιμήσεις του σταθερού όρου για τα διαστήματα $L = 8 - 44$ και $L = 12 - 44$ αλλά και αυτή της ταυτόχρονης προσαρμογής σε διάφορα εύρη είναι πρακτικά ίδιες. Η συνολική προσαρμογή έδωσε $a = 1.10(15)$, $b = 0.087(2)$ και εκθέτη $\gamma/\nu = 1.863(6)$. Στο σχήμα 3.28 δεί-



Σχήμα 3.27: Τα μέγιστα της επιδεικτικότητας υπακούν στον νόμο κλιμάκωσης $[\chi_T]_{av}^* = a + b \cdot L^{\gamma/\nu}$. Στο υπόμνημα αναγράφονται τα εύρη τα οποία συμμετείχαν στην ταυτόχρονη προσαρμογή.

χνουμε τη σταθερότητα του σχήματος κλιμάκωσης. Κρατώντας σταθερό τον $a = 1.1$ σχεδιάστηκαν οι καμπύλες για τα δύο πιο απομακρυσμένα διαστήματα $L = 8 - 44$ και $L = 28 - 44$. Η σύμπτωσή τους δείχνει ότι ο μαγνητικός κρίσιμος εκθέτης $\gamma/\nu = 1.864(12)$ είναι ακριβής. Παρατίθενται στη συνέχεια οι λεπτομέρειες της διαδικασίας προσαρμογής. Για τον έλεγχο κάθε δοκιμής, αλλά και για τη μεταξύ τους σύγκριση, υπολογίστηκε το αντίστοιχο χ^2 καλής προσαρμογής. Εξάλλου ελέγχθηκε η σταθερότητα των αποτελεσμάτων όσον αφορά τον εύρος της προσαρμογής. Επίσης αγνοήσαμε τις δοκιμές οι οποίες παρήγαγαν μη λογικές τιμές. Αρχικά επιχειρήθηκε η προσαρμογή στην έκφραση που περιέχει μόνο ένα διορθωτικό όρο της μορφής: $[\chi_T]_{av}^* = b \cdot L^{\gamma/\nu} + b' \cdot L^{\gamma/\nu - \epsilon}$. Για $\epsilon = \gamma/\nu$ είχαμε την καλύτερη συμπεριφορά, δηλαδή απλά στην προσθήκη ενός σταθερού διορθωτικού όρου. Πρέπει να σημειώσουμε ότι δοκιμάστηκαν οι κύριες και επόμενες των κύριων διορθώσεις του 3d RIM που προτείνει η εργασία [65], οι οποίες αντιστοιχούν σε $\epsilon = \omega = 0.33(3)$, $\epsilon = 2\omega = 0.66(6)$ και $\epsilon = \omega_2 = 0.82(8)$, δίνοντας όμως πολύ ασταθή

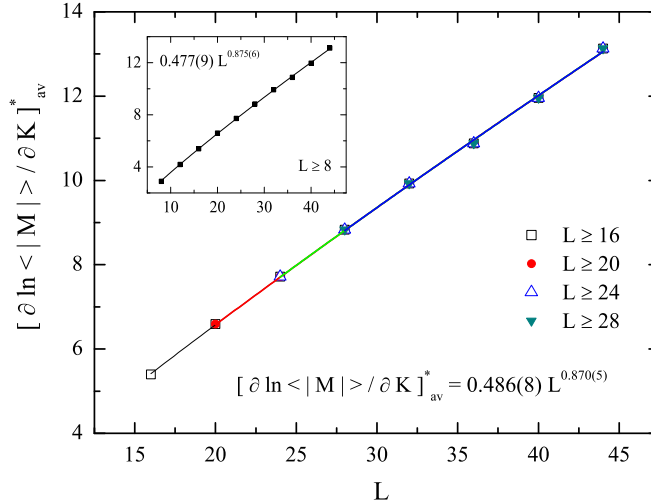


Σχήμα 3.28: Συμπληρωματικό του 3.27 σχήμα στο οποίο φαίνεται η σταθερότητα του σχήματος κλιμάκωσης που προτάθηκε από την log-log συμπεριφορά των πιο απομακρυσμένων διαστημάτων $L = 8 - 44$ και $L = 28 - 44$. Σημειώνεται ότι έχει αφαιρεθεί από τα δεδομένα ο σταθερός όρος $a = 1.1$.

αποτελέσματα. Τέλος με παγωμένο το γ/ν και ϵ είχαμε πολύ σταθερή συμπεριφορά χρησιμοποιώντας τους παραπάνω όρους και συγκεκριμένα οι νόμοι $[\chi_T]_{av}^* = 0.0494(4) \cdot L^{1.964} + 0.013(1) \cdot L^{1.964-0.66}$ και $[\chi_T]_{av}^* = 0.052(2) \cdot L^{1.964} + 0.18(2) \cdot L^{1.964-0.82}$ ήταν σχεδόν ταυτόσημοι στο εύρος $L = 8 - 44$. Η παραπάνω σύγκριση πρέπει να μας επιστήσει την προσοχή στην προσπάθεια προσαρμογής νόμων δύναμης με διορθωτικούς όρους αφού μπορεί διαφορετικοί όροι να δώσουν πολύ παρόμοια αποτελέσματα ακόμα και για μεγάλα πλέγματα.

Ο νόμος κλιμάκωσης των μεγίστων της παραγωγού του απόλυτου της παραμέτρου τάξης είναι $\sim L^{(1-\beta)/\nu}$. Οι δοκιμές προσαρμογής είχαν σταθερότητα για τα διαστήματα από $L = 8 - 44$ ως $L = 28 - 44$ χωρίς την ανάγκη εισαγωγής διορθωτικού όρου. Στο σχήμα 3.29 παρουσιάζεται η ταυτόχρονη προσαρμογή όλων των διαστημάτων και στο ένθετο σχήμα αποτυπώνεται η προσαρμογή στον νόμο κλιμάκωσης για το εύρος $L = 8 - 44$. Σαν τελική τιμή του κρίσιμου εκθέτη προτείνεται $(1 - \beta)/\nu = 0.87(1)$ η οποία ικανοποιεί όλες τις προσαρμογές.

Το σχήμα 3.30 δείχνει την ταυτόχρονη προσαρμογή στις ψευδοκρίσιμες θερμοκρασίες βάσει του νόμου: $T_{[Z]_{av}^*} = T_c + b_Z \cdot L^{-1/\nu}$ χρησιμοποιώ-

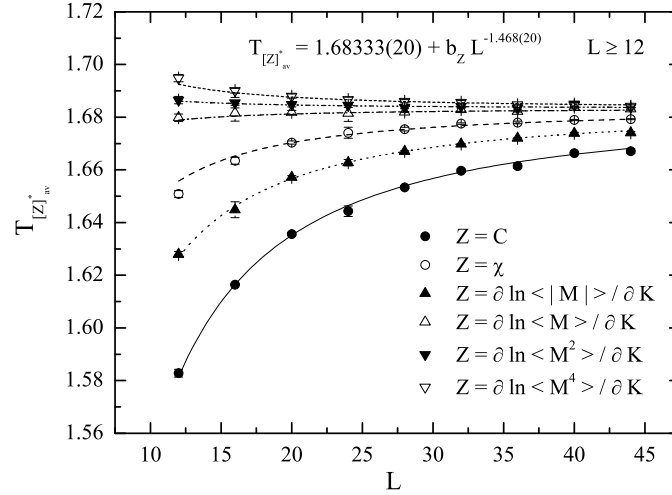


Σχήμα 3.29: Ταυτόχρονη προσαρμογή των κορυφών του μέσου όρου της παραγώγου του απολύτου της παραμέτρου τάξης του αντίστροφου της θερμοκρασίας.

ντας και τις έξι σειρές των προαναφερθέντων ψευδοκρίσιμων. Το εύρος μεγέθους με την καλύτερη συμπεριφορά ήταν $L = 12 - 44$. Αντίθετα με την κρίσιμη θερμοκρασία της οποίας οι τιμές είχαν μικρή διακύμανση ($T_c = 1.6833(2)$ ως $T_c = 1.6835(2)$), η εκτίμηση για τον κρίσιμο εκθέτη $1/\nu$ έδειξε αστάθεια στη μεταβολή του εύρους προσαρμογής από $L = 8 - 44$ σε $L = 24 - 44$ δίνοντας τιμές από $1.51(2)$ έως $1.42(2)$.

Προκειμένου να ελεγχθεί η σταθερότητα των προσαρμογών ως προς τον $1/\nu$ παγώθηκε η κρίσιμη θερμοκρασία στην τιμή $T_c = 1.6835$ από τις τομές του αθροιστή Binder τέταρτης τάξης (§1.2.4). Η αστάθεια όμως παρέμεινε, με καλύτερες προσπάθειες αυτές με εύρος $L = 12 - 44$ και $L = 16 - 44$, οι οποίες έδωσαν $1/\nu = 1.45(2)$. Από την άλλη όταν παγώσαμε την τιμή του εκθέτη $1/\nu = 1.438$ που ικανοποιεί τη συνθήκη υπερκλιμάκωσης για $\gamma/\nu = 1.864$ και $(1 - \beta)/\nu = 0.87$, όλες οι προσπάθειες έδωσαν εκτίμηση κοντά στην $T_c = 1.68345$. Η τιμή με το μικρότερο σφάλμα $T_c = 1.6835$ ήταν αυτή του εύρους $L = 12 - 44$. Οπότε προτείνονται οι $T_c = 1.6835(2)$ και $1/\nu = 1.45(2)$ σαν τελικές τιμές της προσαρμογής.

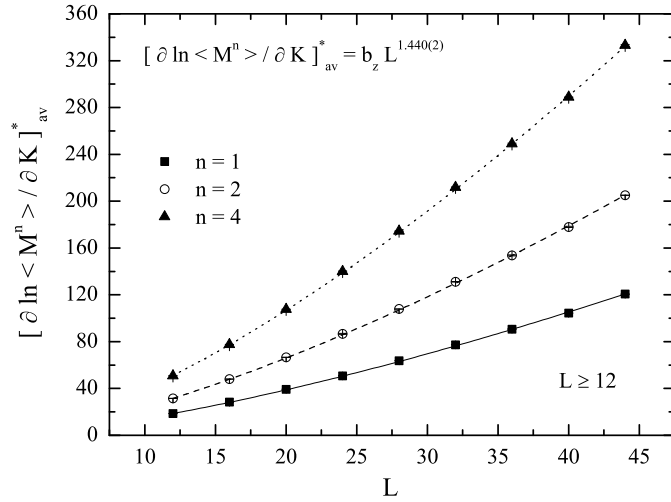
Ο κρίσιμος εκθέτης $1/\nu$ υπολογίστηκε εξάλλου από την (1.51). Οι προσπάθειες προσαρμογής έδειξαν σταθερότητα όσο μεταβάλλαμε το εύρος των σημείων δίνοντας $1/\nu = 1.445 - 1.415$. Στο σχήμα 3.31 αποτυ-



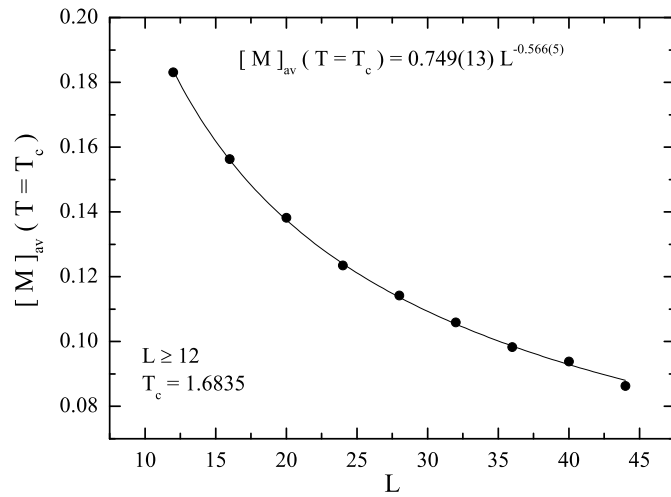
Σχήμα 3.30: Συμπεριφορά FSS των ψευδοκρίσιμων θερμοκρασιών. Οι εκτιμήσεις της κρίσιμης θερμοκρασίας και του κρίσιμου εκθέτη $1/\nu$ αναγράφονται στο υπόμνημα.

πώνεται η αντίστοιχη προσαρμογή για πλέγματα $L = 12 - 44$. Σαν τελική τιμή προτείνεται η $1/\nu = 1.440(10)$ η οποία ικανοποιεί ταυτόχρονα τη συνθήκη υπερκλιμάκωσης ($1/\nu = 1.438$, $\gamma/\nu = 1.864$, $(1 - \beta)/\nu = 0.87$).

Τέλος δίνουμε την FSS συμπεριφορά της μαγνήτισης στην τιμή της κρίσιμης θερμοκρασίας $T_c = 1.6835$ όπως αυτή προέκυψε από την προηγούμενη ανάλυση (σχήμα 3.32). Η προσαρμογή στο εύρος $L = 12 - 44$ έδωσε $\beta/\nu = 0.566(5)$, τιμή απολύτως σύμφωνη με την τιμή που δίνει η υπερκλιμάκωση $\beta/\nu = 0.568$ για $\gamma/\nu = 1.864$ και $(1 - \beta)/\nu = 0.87$. Σημειώνεται επίσης ότι η συμπεριφορά των προσαρμογών ήταν πολύ σταθερή ($\beta/\nu = 0.56(1)$ έως $\beta/\nu = 0.57(2)$).



Σχήμα 3.31: Κλιμάκωση μεγέθους στα μέγιστα της μέσης τιμής της παραγώγου του λογαρίθμου των δυνάμεων $n = 1, 2$ και $n = 4$ της παραμέτρου τάξης του αντίστροφου της θερμοκρασίας. Έγινε ταυτόχρονη προσαρμογή στις τρεις καμπύλες για πλέγματα μεγέθους $L = 12 - 44$.



Σχήμα 3.32: Κλιμάκωση μεγέθους της παραμέτρου τάξης στην εκτιμημένη κρίσιμη θερμοκρασία.

3.4.5 Σύνοψη και συμπεράσματα

Στον πίνακα 3.2 παρατίθενται τα αποτελέσματα για τις δύο περιοχές οικουμενικότητας -πρώην δεύτερης τάξης και πρώην πρώτης τάξης του μοντέλου 3 διαστάσεων τυχαίου δεσμών BC, μαζί με τιμές της βιβλιογραφίας. Από τα αποτελέσματα των δύο περιοχών είναι φανερό ότι η συνθήκη υπερκλιμάκωσης ικανοποιείται $(2\beta/\nu) + \gamma/\nu = d$. Το σημείο $(\Delta, r) = (1, 1/3)$ έδειξε κοινή συμπεριφορά με το 3d τυχαίο μοντέλο αραιών δεσμών Ising $p = 0.7$ όπως μελετήθηκε από τους Berche κ.α. [13] και έτσι επιβεβαιώνονται φαινόμενα crossover στην RIM φάση (3^η γραμμή του πίνακα) στο σημείο αυτό.

Πίνακας 3.2: Σύνοψη των κρίσιμων εκθετών με αταξία και χωρίς των 3d μοντέλων Ising, μοντέλου q -καταστάσεων Potts (PM) και των μοντέλων Blume-Capel (BC) από τις αναφορές [5, 6, 13, 35, 56, 65, 67] και την παρούσα εργασία.

Μοντέλο	$1/\nu$	ν	γ/ν	$\eta = 2 - \gamma/\nu$	β/ν	$(2\beta/\nu) + \gamma/\nu$
Πρώην δεύτερης τάξης μετάβαση φάσης						
Απλό IM [56]	1.586(3)	0.6304(13)	1.966(3)	0.034(3)	0.517(3)	3.00(9)
Απλό IM [67]		0.63002(10)		0.03627(10)		
IM Αραιών σημείων ($p = 0.8$) ¹ [5]	1.463(11)	0.6837(53)	1.963(5)	0.037(5)		
IM Αραιών σημείων ($p = 0.8$) ¹ [65]		0.683(2)		0.036(1)		
IM αραιών δεσμών ($p = 0.7$) ¹ [13]	1.520(20)	0.660(10)	1.965(10)	0.035(10)	0.515(5)	2.995(20)
IM αραιών δεσμών ($p = 0.55$) ¹ [13]	1.460(20)	0.685(10)	1.977(10)	0.023(10)	0.513(5)	3.003(20)
BC τυχαίων δεσμών($\Delta = 1$; $r = 1/3$)	1.504(19)	0.665(17)	1.964(4)	0.036(4)	0.510(10)	2.984(24)
Πρώην πρώτης τάξης μετάβαση φάσης						
$q = 3$ PM αραιών δεσμών [6]	1.449(10)	0.690(5)	1.922(4)	0.078(4)		
BC τυχαίων δεσμών ($\Delta = 2.9$; $r = 1/3$)	1.440(10)	0.694(5)	1.864(12)	0.136(12)	0.566(5)	2.996(22)
$q = 4$ PM αραιών δεσμών [35]	1.330(25)	0.752(14)	1.500(14)	0.500(14)	0.645(24)	2.790(62)

Στην περιοχή πρώην πρώτης τάξης τοποθετήθηκε το σημείο $(\Delta, r) = (2.9, 1/3)$ μετά το σημείο πρώην ασθενούς και πριν το σημείο πρώην ισχυρής πρώτης τάξης των 3d μοντέλων Potts, αφού τα αποτελέσματά μας είναι ενδιάμεσα. Ενώ φαίνεται να υπάρχει παραβίαση της οικουμενικότητας όπως και στο μοντέλο δύο διαστάσεων, αυτή δεν οφείλεται στην ύπαρξη ασθενούς οικουμενικότητας αλλά κυρίως στην διαφοροποίηση του γ/ν (σχ. 3.2). Η πρόταση ύπαρξης διαφορετικής κλάσης οικουμενικότητας στην περιοχή πρώην πρώτης τάξης υποστηρίζεται εξάλλου από την εργασία ομάδας επανακανονικοποίησης [45, 71]. Λαμβάνοντας όμως υπ' όψιν την αργή μείωση των διορθώσεων κλιμάκωσης του 3d RIM [5, 13, 65] δεν μπορούμε να υποστηρίξουμε με βεβαιότητα την παραβίαση οικουμενικότητας χωρίς να μελετηθούν αρκετά μεγάλα πλέγματα της τάξης του $L = 240$.

Κεφάλαιο 4

Υαλώδη πρότυπα σπιν

4.1 Εισαγωγή

Στο παρόν κεφάλαιο μελετάται η επιρροή της ανισοτροπίας στην κρίσιμη συμπεριφορά υάλων σπιν. Συγκρίνονται δύο εκδοχές ανισοτροπικών μοντέλων Edwards-Anderson (εγκάρσιου και κατά μήκος), με το αντίστοιχο ισοτροπικό.

Τα πρώτα υλικά τα οποία χαρακτηρίστηκαν ύαλοι σπιν ήταν αραιά μαγνητικά κράματα [57, 75, 125]. Υλικά δηλαδή με μικρή συγκέντρωση, λίγων ποσοστιαίων μονάδων, κάποιου μαγνητικού στοιχείου, συνήθως σιδήρου ή μαγγανίου, κατανεμημένων σε τυχαίες θέσεις σε μη μαγνητική μήτρα ευγενούς μετάλλου (χαλκού, άργυρου ή χρυσού). Τα υλικά αυτά είχαν ιδιαίζουσα συμπεριφορά σε χαμηλή θερμοκρασία, πιο συγκεκριμένα αντί για συνεχή πτώση της ηλεκτρικής τους αντίστασης κατά την ψύξη τους παρουσίαζαν μικρή αύξηση σε συγκεκριμένη θερμοκρασία. Περαιτέρω μελέτη τους έδειξε την ύπαρξη μετάβασης σε θερμοκρασία T_f από παραμαγνητική σε μία καινούργια φάση με τα εξής κοινά χαρακτηριστικά. Απόκλιση της μαγνητικής επιδεκτικότητας στην T_f . Κάτω από την T_f πάγωμα των σπιν αλλά με ταυτόχρονη έλλειψη τάξης μακράς εμβέλειας. Ο όρος **ύαλοι σπιν** (spin glasses) δόθηκε λόγω του ότι τα σπιν σε αυτή την φάση έχουν συμπεριφορά ανάλογη των "κανονικών" υάλων τα οποία είναι άμορφα και χωρικά παγωμένα.

Οι Edwards και Anderson προκειμένου να μοντελοποιήσουν σπιν υαλώδη υλικά εισήγαγαν την παρακάτω παραλλαγή του προτύπου Ising.

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - h \sum_i S_i \quad (4.1)$$

Οι τιμές σπιν ως συνήθως είναι δίτιμες $S_i = \pm 1$ αλλά και οι αλληλε-

πιδράσεις είναι κοντινότερων γειτόνων. Η ιδιαιτερότητα της Χαμιλτονιανής είναι ότι η τυχειότητα στις αλληλεπιδράσεις ορίζεται από κατάλληλη κατανομή (συνήθως κανονική ή δίτιμη) τέτοια ώστε να επιτρέπονται σιδηρομαγνητικές και αντισιδηρομαγνητικές αλληλεπιδράσεις. Οι Edwards και Anderson παράλληλα πρότειναν την εξής παράμετρο τάξης για την υαλώδη φάση.

$$q_{EA} = \frac{1}{N} \sum_i^N \langle S_i \rangle^2 \quad (4.2)$$

Η q_{EA} από 0 παίρνει πεπερασμένη τιμή σε διατεταγμένη φάση όπως η υαλώδης αλλά και η σιδηρομαγνητική - αντισιδηρομαγνητική και έτσι είναι ικανή να εντοπίζει το "πάγωμα" των σπιν.

Οι Sherrington και Kirkpatrick εφάρμοσαν τεχνικές μέσου πεδίου παραλλάσσοντας το μοντέλο EA επιβάλλοντας αλληλεπιδράσεις άπειρης εμβέλειας. Στο μοντέλο SK δηλαδή κάθε σπιν αλληλεπιδρά με τα υπόλοιπα. Η εργασία τους αποδείχτηκε ρηξικέλευθη στο πεδίο των κρίσιμων φαινομένων, κυρίως λόγω της μεθόδου αντιγράφων (replica) την οποία εισήγαγαν. Κατά τη μέθοδο αντιγράφων εξετάζεται η θερμοδυναμική συμπεριφορά πολλών ανεξάρτητων αντιγράφων του συστήματος. Έδειξαν ότι υπάρχει υαλώδης φάση κάτω από κρίσιμη θερμοκρασία T_c . Την αδυναμία όμως της προσέγγισής τους έκανε εμφανή η ύπαρξη αρνητικής εντροπίας σε χαμηλές θερμοκρασίες.

4.1.1 Ρήξη συμμετρίας αντιγράφου

Το πρότυπο SK κατάφερε να επιλύσει ο Parisi [144] το 1979, εισάγοντας την έννοια της "ρήξης συμμετρίας αντιγράφου" (Replica Symmetry Breaking RSB). Η RSB αποτελεί το απόλυτο θεμέλιο στην κατανόησή μας των υαλώδων υλικών και εν γένει των πολύπλοκων συστημάτων. Για να προχωρήσουμε στην περιγραφή της RSB είναι χρήσιμος ο ορισμός της θερμοδυναμικής κατάστασης ενός συστήματος σπιν ως τη συνάρτηση μέτρου πιθανότητας της κατανομής των σπιν. Παραδείγματός χάριν το σύστημα που βρίσκεται στην κατάσταση α , χαρακτηρίζεται από άνυσμα βαρών $\mathbf{W}_\alpha \equiv \{W_\alpha(1), W_\alpha(2), \dots, W_\alpha(N)\}$, τέτοιο ώστε η μαγνήτιση της κατάστασης α δίνεται από την:

$$m_\alpha = \frac{1}{N} \sum_i^N W_\alpha(i)(+1) + (1 - W_\alpha(i))(-1) \quad (4.3)$$

Μια τυχαία κατάσταση μπορεί να περιγραφεί σαν γραμμικός συνδυασμός των καθαρών καταστάσεων (pure state) του συστήματος. Σε αδρές

γραμμές, καθαρή κατάσταση είναι αυτή κατά την οποία η συσχέτιση δύο τυχαίων σπιν μεταβλητών τείνει στο μηδέν όσο μεγαλώνει η απόσταση μεταξύ τους. Στα σιδηρομαγνητικά συστήματα οι δύο σιδηρομαγνητικές $\alpha, \tilde{\alpha}$ με $W_\alpha(i) = 1$ και $W_{\tilde{\alpha}}(i) = -1$ οι οποίες έχουν συμμετρία αντιστροφής σπιν αποτελούν τις καθαρές καταστάσεις του συστήματος. Όταν το σύστημα περνάει κάτω από την T_C , η ρήξη συμμετρίας αναγκάζει το σύστημα να επιλέξει μεταξύ των $\alpha, \tilde{\alpha}$.

Η διορατική παρατήρηση του Parisi είναι ότι ενώ στα απλά συστήματα όπως η σιδηρομαγνητική φάση υπάρχει μία καθαρή κατάσταση με τις συμμετρικές της, στα πολύπλοκα συστήματα οι καθαρές καταστάσεις είναι περισσότερες, για παράδειγμα άπειρες στην περίπτωση του προτύπου SK. Έτσι στην υαλώδη φάση το σύστημα μπορεί να βρίσκεται στην περιοχή του χώρου των φάσεων μίας εξ' αυτών των καθαρών καταστάσεων έστω β . Η πιθανότητα να μεταβεί το σύστημα από την κατάσταση β σε μια άλλη καθαρή κατάσταση (γ) με τοπικές κινήσεις τείνει στο μηδέν στο θερμοδυναμικό όριο $P(\beta \rightarrow \gamma) \rightarrow 0, N \rightarrow \infty$ [104, 165]. Το φαινόμενο αυτό απαντάται ως "ρήξη εργοδικότητας".

Υπενθυμίζουμε ότι οι καθαρές αυτές καταστάσεις των υάλων σπιν εν γένει δεν έχουν κάποιου είδους απλή συμμετρία (μεταφορική, περιστροφική, κλπ). Ρήξη συμμετρίας αντιγράφου (*RSB*) είναι ακριβώς αυτό το φαινόμενο της επιλογής του συστήματος μίας καθαρής κατάστασης.

Ο Parisi εισήγαγε το μέτρο της επικάλυψης (overlap) προκειμένου να εντοπιστεί η *RSB*. Ο ορισμός της επικάλυψης είναι:

$$q_{ab} = \frac{1}{N} \sum_{i=1, N} \langle S_i \rangle \langle T_i \rangle \quad (4.4)$$

όπου α, β είναι ανεξάρτητα αντίγραφα μιας διαμόρφωσης αλληλεπιδράσεων J με S_i, T_i τις σπιν τιμές τους αντίστοιχα.

Η κατανομή της επικάλυψης δεδομένης κατανομής J είναι

$$P_J(q) = \sum_{\alpha, \beta} w_\alpha w_\beta \delta(q - q_{\alpha\beta}) \quad (4.5)$$

με $w_\alpha \propto \exp(-\beta \mathcal{F}_\alpha)$ όπου \mathcal{F}_α είναι η ελεύθερη ενέργεια της κατάστασης α [123, 145].

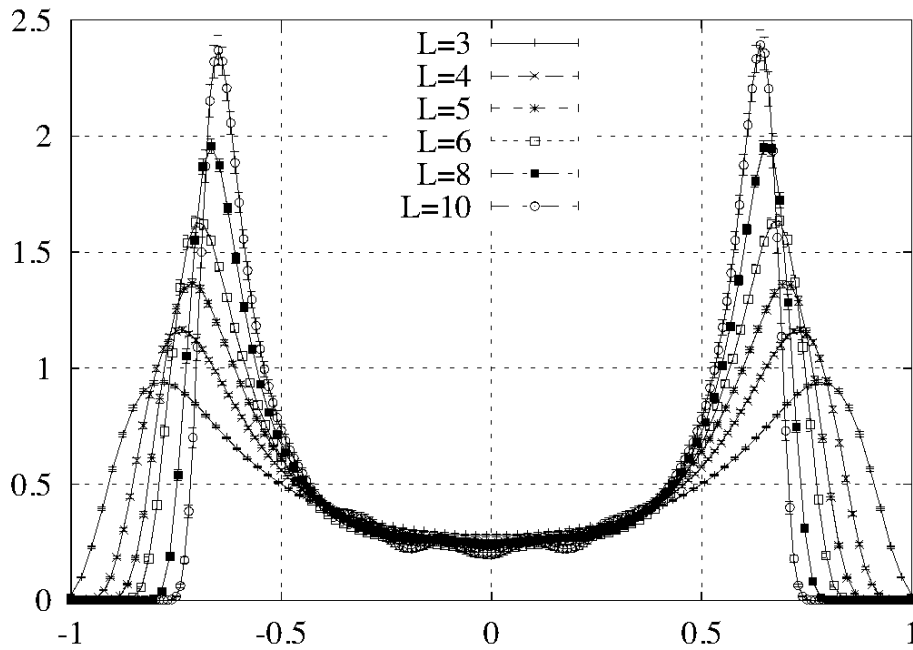
Αν τώρα υπάρχει πάνω από μία καθαρή κατάσταση η $P_J(q)$ δεν είναι μια συνάρτηση δέλτα δηλαδή:

$$P_J(q) \neq \delta(q - q_{EA}) \quad (4.6)$$

τα δύο αντίγραφα μπορούν να βρίσκονται σε διαφορετικές καταστάσεις και άρα υπάρχει ρήξη συμμετρίας αντιγράφου.

Η μέση τιμή της $P_J(q)$ στο σύνολο των υλοποιήσεων J καλείται παράμετρος τάξης Parisi

$$P(q) = [P_J(q)]_J \quad (4.7)$$



Σχήμα 4.1: Η συνάρτηση $P(q) = [P_J(q)]_J$ μετά από άθροιση πολλών δειγμάτων για $d = 4$, $L = \{3 \dots 10\}$. [145].

Για λόγους πληρότητας αναφέρονται τα σημαντικότερα συμπεράσματα της *RSB* για το μοντέλο SK^1 .

- Η υαλώδης φάση αποτελείται από άπειρα ζεύγη καθαρών καταστάσεων.
- Για την περιγραφή της υαλώδους φάσης απαιτείται άπειρος αριθμός παραμέτρων τάξης οι οποίες χαρακτηρίζουν την επικάλυψη κάθε ζεύγους καθαρών καταστάσεων².
- Η επικάλυψη επιδεικνύει μη αυτο-αθροιστικότητα.

¹βλέπε §5.6.4 "Spin Glasses and Complexity" [168]

²Κάθε ζεύγος χαρακτηρίζεται από ξεχωριστή τιμή επικάλυψης, οπότε χρειάζονται άπειρες τιμές επικάλυψης ώστε να περιγραφούν τα άπειρα ζεύγη

- Οι αποστάσεις μεταξύ των καθαρών καταστάσεων έχουν υπερμετρική (ultrametric) δομή³, δηλαδή ικανοποιούν την ισχυρή τριγωνική ανισότητα $d(\alpha, \gamma) \leq \max(d(\alpha, \beta), d(\beta, \gamma))$.

Πρέπει να σημειωθεί ότι ο Parisi ορίζει σαν πολύπλοκο σύστημα αυτό το οποίο για δεδομένο σύνολο μακροσκοπικών παραμέτρων έχει μεγάλο (άπειρο) αριθμό καταστάσεων. Η σημασία των σπιν υάλων και η συνεισφορά τους στη στατιστική μηχανική αλλά και στη μελέτη της πολυπλοκότητας συνοψίζεται στον παρακάτω τίτλο ομιλίας του Philip Anderson [149]. "Οι υάλτοι σπιν αποτελούν την γέφυρα μεταξύ βιολογίας, στατιστικής μηχανικής και επιστήμης υπολογιστών".

4.1.2 Πρότυπο μικρή εμβέλειας EA

Το απλό πρότυπο περιγράφεται από την Χαμιλτονιανή:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j \quad (4.8)$$

, όπου οι αλληλεπιδράσεις είναι μεταξύ κοντινότερων γειτόνων με $J_{ij} = \pm 1$. Το πρότυπο EA παρουσιάζει σημαντικές διαφορές από το SK οι οποίες εμποδίζουν την προσέγγιση του μέσω θεωριών μέσου πεδίου. Έτσι ενώ έχει αποδειχτεί ότι για $d = 1$ δεν υπάρχει μετάβαση για $d = 2$ χωρίς αυστηρή απόδειξη η κοινή άποψη είναι ότι ούτε εκεί υπάρχει μετάβαση σε πεπερασμένη θερμοκρασία. Για $d \geq 3$ αριθμητικές μελέτες υποδεικνύουν ύπαρξη μη τετριμμένων καθαρών καταστάσεων σε χαμηλές θερμοκρασίες, τα αποτελέσματα όμως ακόμα δεν υποστηρίζονται από αναλυτικά ευρήματα. Αντίστοιχη συζήτηση υπάρχει για το πλήθος των θεμελιωδών καταστάσεων για $d \geq 2$ όπου ακόμα δεν υπάρχει σύγκλιση απόψεων.

Σύγχυση - frustration

Χαρακτηριστικό όλων των υαλωδών συστημάτων είναι η ύπαρξη σύγχυσης (frustration) εκδήλωση της οποίας είναι το πάγωμα των σπιν και η εκθετική αύξηση του χρόνου αποκατάστασης. Ένας βρόχος c_f βρίσκεται σε κατάσταση σύγχυσης όταν

$$\prod_{ij \in c_f} J_{ij} < 0 \quad (4.9)$$

Η ύπαρξη σύγχυσης συνεπάγεται την αδυναμία ταυτόχρονης ικανοποίησης ($S_i S_j J_{ij} > 0$) για $J_{ij} \in c_f$.

³Ιεραρχικές δομές όπως οι δένδροειδής αποτελούν υπερμετρικές δομές.

Σαν μέτρο της σύγχυσης ορίζουμε τον λόγο των μη ικανοποιήσιμων στοιχειωδών βρόχων c_f , οι οποίοι στο απλό κυβικό πλέγμα το οποίο μελετήσαμε είναι τετράγωνα, προς το σύνολό τους ($3N$).

$$f = \frac{|c_f|}{3N} \quad (4.10)$$

Με $|c_f|$ συμβολίζεται το πλήθος των μη ικανοποιήσιμων στοιχειωδών τετραγώνων.

Ορισμός ανισότροπων προτύπων

Στην παρούσα διατριβή μελετήθηκε το κυβικό πρότυπο EA εξετάζοντας την κρίσιμη συμπεριφορά του ισοτροπικού και δύο ανισοτροπικών συστημάτων, ενός εγκάρσια και ενός κατά μήκος ανισοτροπικού συστήματος. Στη συνέχεια προχωράμε στην περιγραφή των μοντέλων και του διαγράμματος φάσης τους.

Η Χαμιλτονιανή που περιγράφει και τα τρία πρότυπα είναι κοινή:

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j \quad (4.11)$$

Όπου η αλληλεπίδραση είναι κοντινότερων γειτόνων.

Η διαφορά τους έγκειται στην κατανομή της αλληλεπίδρασης J :

$$P(J_{ij}^u) = p_u \delta(J_{ij}^u + 1) + (1 - p_u) \delta(J_{ij}^u - 1) \quad (4.12)$$

καθώς το $u = z, xy$ διαχωρίζει την πιθανότητα ύπαρξης αντισιδηρομαγνητικής αλληλεπίδρασης p_u (σιδηρομαγνητικής $(1 - p_u)$) στα επίπεδα xy από τον άξονα z . Έτσι στο ισοτροπικό μοντέλο $p_z = p_{xy} = p$, στο εγκάρσιο $p_z = 0; p_{xy} \equiv p; p \geq 0$ και στο κατά μήκος $p_z \equiv p; p \geq 0; p_{xy} = 0$.

Στη συνέχεια δίνουμε τη σύγχυση όπως ορίζεται από την (4.10). Η σύγχυση του κυβικού ισοτροπικού προτύπου EA ως προς την πιθανότητα p είναι:

$$f(p) = 4(p^3(1 - p) + p(1 - p)^3) \quad (4.13)$$

Για το εγκάρσια ανισοτροπικό η σύγχυση ως προς p_{xy} είναι:

$$f_z(p_{xy}) = 4/3 ((p_{xy}^3(1 - p_{xy}) + p_{xy}(1 - p_{xy})^3) + p_{xy}(1 - p_{xy})) \quad (4.14)$$

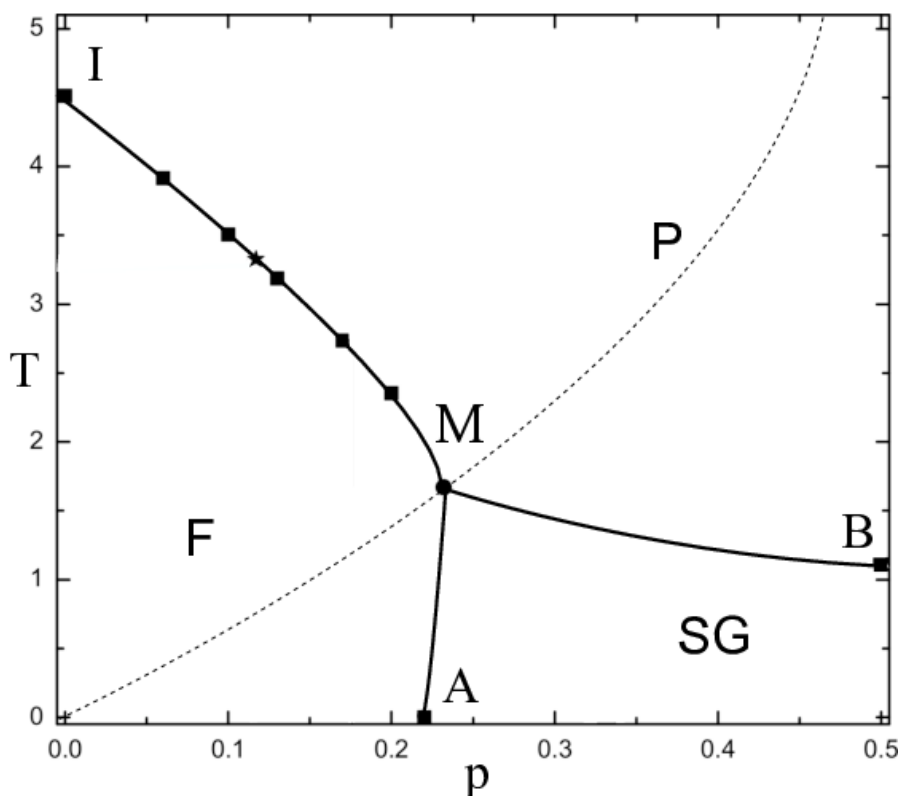
και για το κατά μήκος ισούται με:

$$f_{xy}(p_z) = 4/3 p_z^3 (1 - p_z) \quad (4.15)$$

4.2 Ισοτροπικό κυβικό πρότυπο Edwards-Anderson

Το ισοτροπικό μοντέλο έχει μελετηθεί διεξοδικά τα τελευταία 40 χρόνια [4, 14, 16, 17, 29, 30, 82, 87, 116–118, 126, 135, 136, 141, 150, 163]. Η κατανομή αλληλεπιδράσεων J_{ij} δίνεται:

$$P(J_{ij}) = p\delta(J_{ij} + 1) + (1 - p)\delta(J_{ij} - 1) \quad (4.16)$$



Σχήμα 4.2: Διάγραμμα φάσης κυβικού προτύπου EA . Οι συνεχείς γραμμές διαχωρίζουν τις τρεις φάσεις: σιδηρομαγνητική (F), παραμαγνητική (P) και υαλώδη (SG). Η διακεκομμένη καμπύλη αντιστοιχεί στην γραμμή Nishimori.

Στο διάγραμμα φάσης σχ. 4.2 υπάρχουν τρεις ξεχωριστές φάσεις: Σιδηρομαγνητική F , υαλώδης SG και παραμαγνητική P . Οι μεταβάσεις μεταξύ των φάσεων είναι δεύτερης τάξης οι οποίες ανήκουν σε διαφορετικές κλάσεις οικουμενικότητας. Το πολυ-κρίσιμο σημείο (multicritical point) M μεταξύ των φάσεων βρίσκεται πάνω στη γραμμή Nishimori⁴

⁴Στη γραμμή Nishimori η οποία συνδέει τη θερμοκρασία με την πυκνότητα αλληλε-

[66, 97, 98, 131–134, 138, 139, 162] για την οποία ισχύει:

$$p = \frac{\tanh J/T + 1}{2} \quad (4.17)$$

Η πιο πρόσφατη εκτίμηση του M έχει γίνει από τους Hasenbusch κ.ά. [66] και δίνει $T_M = 1.6692(3)$, $p_M = 0.23180(4)$, με εκθέτη μήκους συσχέτισης $\nu = 1.64(5)$.

4.2.1 Σιδηρομαγνητική-παραμαγνητική μετάβαση FP

Η μετάβαση FP ξεκινάει για $p = 0$ από το απλό κυβικό μοντέλο Ising I σχ. 4.2 για το οποίο η πιο πρόσφατη και ακριβής εκτίμηση του εκθέτη για το μήκος συσχέτισης είναι $\nu = 0.63002(10)$ [22, 27, 31, 39, 56, 67]. Όπως έχει δείξει ο Hasenbusch κ.ά. [69] η εισαγωγή αντισιδηρομαγνητισμού αλλάζει την κλάση οικουμενικότητας κατά μήκος της μετάβασης IM σε αυτή του αραιού με αταξία θέσεων μοντέλου Ising (randomly diluted Ising - RDI) [69, 73, 86]. Στην κλάση του RDI ανήκει πλειάδα μοντέλων σπιν όπως το μοντέλο Ising τυχαίων δεσμών και τυχαία αραιωμένων δεσμών [5, 13, 65, 147, 175], καθώς και το μοντέλο Blume-Capel τυχαίων δεσμών [107]. Η παραπάνω κλάση οικουμενικότητας αναφέρεται και ως κλάση τυχαίου μοντέλου Ising - RIM . ο αντίστοιχος εκθέτης μήκους συσχέτισης σύμφωνα με την πρόσφατη μελέτη του Ballesteros κ.ά. [5] είναι $\nu = 0.6837(53)$.

4.2.2 Σιδηρομαγνητική-υαλώδης μετάβαση FG

Η κλίση την γραμμής MA για την μετάβαση FG είναι ανοιχτό ζήτημα. Ο Nishimori έχει δείξει [131, 132, 134] ότι η σιδηρομαγνητική φάση δεν μπορεί να περνάει την κατακόρυφη $p = p_M$ δηλαδή να είναι πρόσθια (forward) η μετάβαση FG , το οποίο έχει επιβεβαιωθεί επίσης μέσω υπολογισμών ομάδας επανακανονικοποίησης [58, 70, 124]. Ο ίδιος με επιχειρήματα που αφορούν τις συναρτήσεις συσχέτισης αλλά και την εντροπία της σύγχυσης ισχυρίζεται ότι η μετάβαση πρέπει να είναι κατακόρυφη [133, 134]. Προσομοιώσεις όμως που έχουν γίνει τόσο στη θεμελιώδη κατάσταση από τον Hartmann [62] αλλά και πιο πρόσφατα σε πεπερασμένη θερμοκρασία $T \in \{0.5, 1\}$ από τους Ceccareli κ.ά. [34] βρίσκουν την FG ελαφρώς επανεισδύουσα (reentrant) με τον εκθέτη του μήκους συσχέτισης να είναι $\nu = 0.96(2)$.

πιδράσεων p , το αποκλίνον μέρος της ενέργειας μηδενίζεται και έτσι μπορεί να εκφραστεί αναλυτικά ακόμα και στα σημεία μεταβάσεων φάσης. Επιπλέον χαρακτηριστικό της συμμετρίας Nishimori είναι ότι υπάρχει ένα μόνο ζεύγος καθαρών καταστάσεων καθώς επίσης φαίνεται να τέμνει πάντα πολυ-κρίσιμο σημείο.

4.2.3 Υαλώδης-παραμαγνητική μετάβαση GP

Σχεδόν όλο το βάρος της μετάβασης GP έχει δοθεί στη συμμετρική πιθανότητα $p = \frac{1}{2}$. Πρέπει να σημειωθεί ότι το $p = \frac{1}{2}$ παρουσιάζει τη μεγαλύτερη δυσκολία στην προσωμοίωσή του και αυτό γιατί οι χρόνοι ισορροπίας αποκλίνουν εκθετικά όσο πλησιάζει το σύστημα τη θεμελιώδη κατάσταση. Η δυσκολία αυτή γίνεται πιο έντονη στο $p = 1/2$, όπου η σύγκυση είναι μέγιστη.

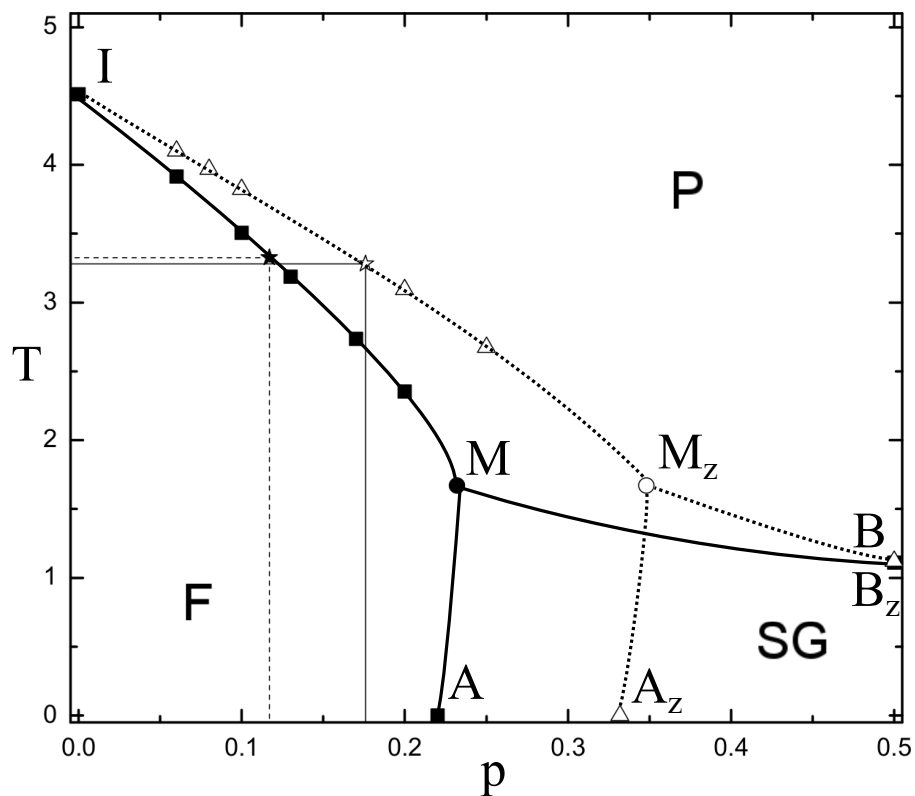
Αρκετά διαφωτιστική βιβλιογραφική ανασκόπηση υπάρχει στην εργασία των Katzgraber κ.ά. [82]. Η πιο πρόσφατη και αξιόπιστη εκτίμηση για το σημείο T_B είναι αυτή των Hasenbusch Pelissetto και Vicari [68] η οποία δίνει $T_C = 1.109(10)$ με $\nu = 2.45(15)$. Ενδεικτικά αναφέρονται μερικές βιβλιογραφικές τιμές για τον εκθέτη ν : 2.72(8) [30], 2.15(15) [4], 2.22(15) [78], 2.39(5) [82]. Η σχετικά μεγάλη διασπορά στις εκτιμήσεις αυτές, αναδεικνύει τη δυσκολία του προβλήματος όπως επισημάνθηκε νωρίτερα.

Η ενέργεια θεμελιώδους κατάστασης η εύρεση της οποίας είναι ένα από τα πιο απαιτητικά προβλήματα των σπιν συστημάτων με πολυπλοκότητα $NP - hard$ [8], έχει βρεθεί από τους Roma κ.ά. [153] $e = -1.7867(2)$.

4.3 Εγκάρσια ανισοτροπικό πρότυπο ΕΑ

Στο κεφάλαιο αυτό το οποίο αναφέρεται στην εργασία [142] μελετήθηκε το κυβικό μοντέλο ΕΑ στο οποίο όμως η δίτιμη κατανομή της αλληλεπίδρασης είναι ανισότροπη λόγω του ότι η αλληλεπίδραση στον άξονα z είναι μόνο σιδηρομαγνητική, ενώ στα επίπεδα xy η αλληλεπίδραση είναι τυχαία $J^{xy} = \pm 1$ δηλαδή στη σχέση 4.12 τίθενται $p_z = 0; p_{xy} \geq 0$.

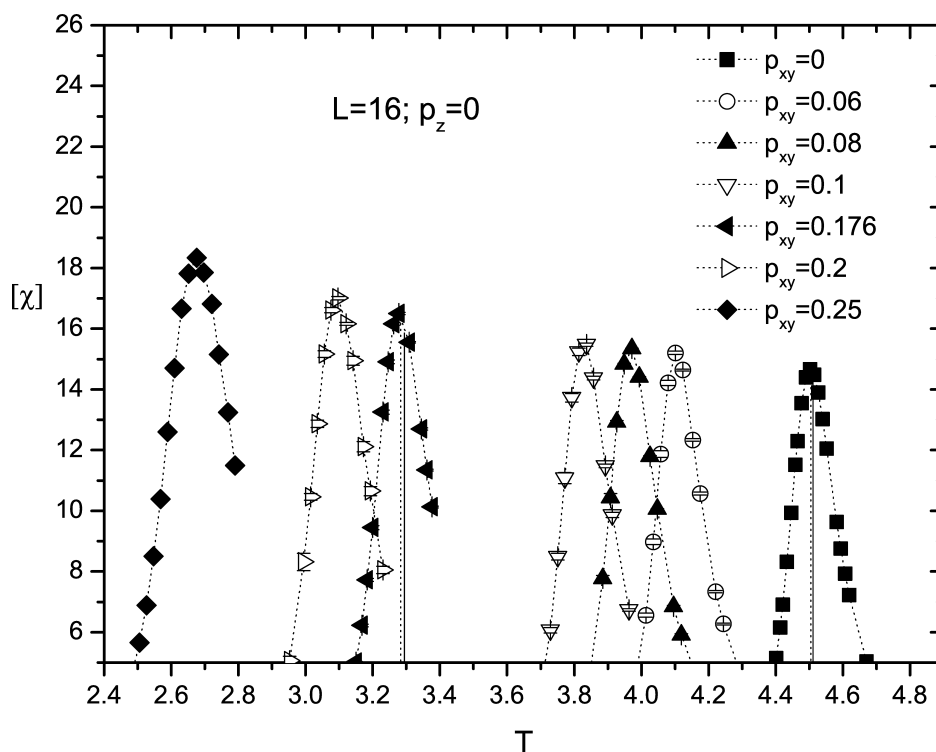
4.3.1 Σιδηρομαγνητική-παραμαγνητική μετάβαση FP



Σχήμα 4.3: Διάγραμμα φάσης εγκάρσια ανισοτροπικού κυβικού προτύπου EA (διακεκομμένες) μαζί με το αντίστοιχο ισότροπικό (συνεχείς γραμμές). Οι γραμμές διαχωρίζουν τις τρεις φάσεις: σιδηρομαγνητική (F), παραμαγνητική (P) και υαλώδη (SG).

Όπως φαίνεται στο συνολικό διάγραμμα φάσης σχ. 4.3 η μετάβαση ξεκινάει από το απλό μοντέλο Ising σημείο I καταλήγοντας στο πολυκρίσιμο σημείο M_z . Τα σημεία του διαγράμματος 4.3 που συμβολίζονται

με άδεια τρίγωνα στην διακεκομμένη γραμμή, αντιστοιχούν σε προσομοιώσεις που έγιναν στις πιθανότητες: $p_{xy} = 0.06; 0.08; 0.01; 0.2; 0.25$ και δείχνουν τα μέγιστα της μαγνητικής επιδεκτικότητας χ για το πλέγμα μήκους $L = 16$ (σχήμα 4.4). Όπως φαίνεται και στο σχήμα 4.4 η απόκλιση των ψευδοκρίσιμων τιμών από τις ασυμπτωτικές είναι εντός των σφαλμάτων και έτσι μπορούν να χρησιμοποιηθούν σαν οδηγός για την χάραξη της γραμμής IM_Z .



Σχήμα 4.4: Κορυφές της μαγνητικής επιδεκτικότητας σε διάφορες πιθανότητες p_{xy} για $L = 16$. Οι κατακόρυφες γραμμές δείχνουν την διαφορά των ασυμπτωτικών (συνεχείς γραμμές) τιμών από τις ψευδοκρίσιμες (διακεκομμένες γραμμές) για τις τιμές $p_{xy} = 0$ και $p_{xy} = 0.176$.

Κοντά στο σημείο I στο διάγραμμα φάσης σχ. 4.3, ακολουθείται γραμμική συμπεριφορά $T_c(p) = T_c(0) - bp$. Σύμφωνα με τον Hasenbusch [69] $b_i \approx 2.2T_C \approx 9.9$, όπου b_i είναι ο συντελεστής για το ιστροπικό μοντέλο. Ο παραπάνω συντελεστής προέκυψε από τα κρίσιμα σημεία της IM για πιθανότητες $p = 0; 0.06; 0.1$ [69]. Με γραμμική προσαρμογή στις ίδιες πιθανότητες αλλά από τα ψευδοκρίσιμα σημεία της μαγνητικής επιδεκτικότητας ο γραμμικός συντελεστής βρέθηκε $b_i^* \approx 10.1$, το οποίο δίνει μετατόπιση περίπου 2%. Λόγω της μικρής απόκλισης

από την ασυμπτωτική τιμή του γραμμικού συντελεστή ακολουθήθηκε η διαδικασία με τις ψευδοκρίσιμες της επιδεκτικότητας για το εγκάρσια ανισοτροπικό μοντέλο. Από τα αντίστοιχα σημεία $p_{xy} = 0; 0.06; 0, 1$ ο συντελεστής βρέθηκε $b_a^* \approx 6.7$. Ο λόγος μεταξύ τους είναι $b_i^*/b_a^* \approx 1.5$. Η σύγκριση αυτή των κλίσεων της FP οδηγεί στο συμπέρασμα ότι η μετάβαση αυτή γίνεται στην ίδια θερμοκρασία στα δύο μοντέλα όταν $p_{xy} \approx \frac{3}{2}p$ δηλαδή

$$T_z(p_{xy}) = T\left(\frac{3}{2}p\right) \quad (4.18)$$

όπου T_z είναι η θερμοκρασία του εγκάρσιου μοντέλου και T του ισοτροπικού. Όταν ισχύει η παραπάνω σχέση στις πιθανότητες ο λόγος σιδηρομαγνητικών - αντισιδηρομαγνητικών δεσμών είναι ίδιος για τα δύο μοντέλα. Στη συνέχεια θα δείξουμε ότι για μικρά p, p_{xy} η σύγκριση του ισοτροπικού $f(p)$ ισούται με την αντίστοιχη του εγκάρσια ανισοτροπικού $f_z(p_{xy})$ για $p_{xy} = \frac{3}{2}p$.

Η σύγκριση συναρτήσεϊ του p για το ισοτροπικό EA είναι:

$$f(p) = 4(p^3(1-p) + p(1-p)^3) = 4p(1-3p+4p^2-2p^3) \quad (4.19)$$

Για το εγκάρσια ανισοτροπικό η σύγκριση ως προς p_{xy} είναι:

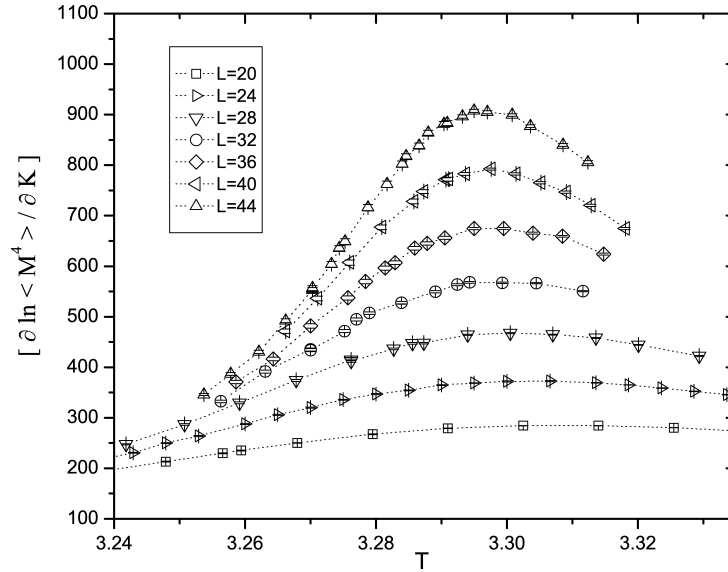
$$\begin{aligned} f_z(p_{xy}) &= 4/3 \left((p_{xy}^3(1-p_{xy}) + p_{xy}(1-p_{xy})^3) + p_{xy}(1-p_{xy}) \right) \\ &= (8/3)p_{xy}(1-2p_{xy}+2p_{xy}^2-p_{xy}^3) \end{aligned} \quad (4.20)$$

Έτσι κρατώντας μόνο τον γραμμικό παίρνουμε $f(p) = 4p$ και $f_z(p_{xy}) = (8/3)p_{xy}$. Οπότε οι δύο συγκρίσεις είναι ίσες όταν: $f(p) = f_z(p_{xy}) \Rightarrow 4p = (8/3)p_{xy} \Rightarrow \frac{p_{xy}}{p} = \frac{4}{8/3} = \frac{3}{2}$. Άρα δείξαμε ότι για μικρές τιμές των p και p_{xy} η σύγκριση των δύο προτύπων είναι ίδια όταν $p_{xy} = \frac{3}{2}p$.

Κρίσιμος εκθέτης μήκους συσχέτισης - $1/\nu$

Σύμφωνα με τον Hasenbusch για $p^* = 0.117$ τα σφάλματα κλιμάκωσης είναι ελάχιστα [69]. Για τον λόγο αυτό επιλέχθηκε στην $p_{xy}^* = 0.176 \sim 1.5p^*$, να γίνει η ανάλυση πεπερασμένου μεγέθους FSS . Περιγραφή του σχήματος FSS υπάρχει στο κεφάλαιο 1.2.4.

Αναλύοντας τις ανωμαλίες πεπερασμένου μεγέθους των παραγώγων του λογαρίθμου των δυνάμεων των δειγματικών μέσων των δυνάμεων (1, 2, 4) της παραμέτρου τάξης ως προς το αντίστροφο της θερμοκρασίας (1.51). Στο σχήμα 4.5 παρουσιάζονται τα μέγιστα των καμπυλών Z^* για την τέταρτη δύναμη της παραγώγου του λογαρίθμου για τα πλέγματα $L \in \{20 - 44\}$. Η καλή ποιότητα των δεδομένων της προσομοίωσης καταδεικνύεται από την ομαλή μορφή των καμπυλών.



Σχήμα 4.5: Οι κορυφές για την 4^η δύναμη της παραγώγου του λογαρίθμου της μαγνητικής ροπής, από τα MC δεδομένα των πλεγμάτων $L = 20 - 44$.

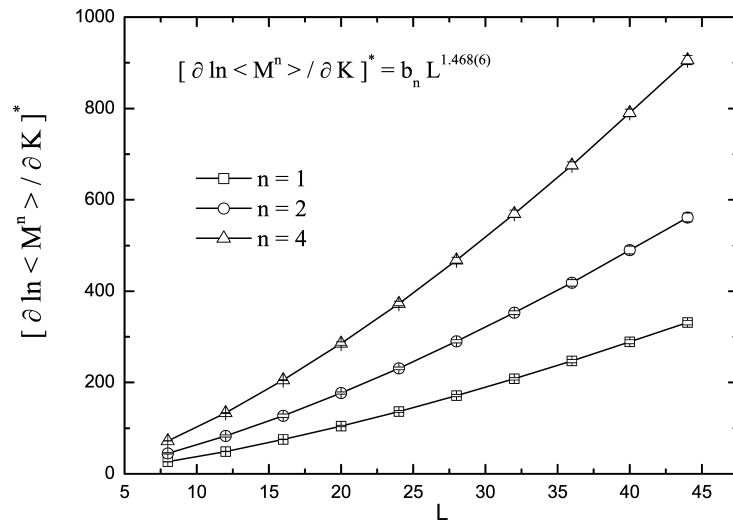
Μεταβάλλοντας το $L_{min} = \{8 - 24\}$ στις άνωθεν προσαρμογές προκύπτει μια σειρά ενεργών εκθετών (effective exponents) σχήμα 4.7. Όπως φαίνεται και στο σχήμα 4.7 οι ενεργοί εκθέτες έχουν καλή γραμμική συμπεριφορά, η οποία δίνει $1/\nu = 1.463(3) \Rightarrow \nu = 0.6835(25)$.

Η τιμή $\nu = 0.6835(25)$, που βρέθηκε από την FSS ανάλυσή μας, συμφωνεί πολύ καλά με την αντίστοιχη των Hasenbusch κ.ά. για το ιστροπικό μοντέλο ΕΑ, $\nu = 0.683(3)$ [69], όπως και με αυτή των Ballesteros κ.ά. για το τυχαία αραιό μοντέλο Ising είναι $\nu = 0.6837(53)$ [5] επιβεβαιώνοντας ότι το μοντέλο στην περιοχή της μετάβασης FP ανήκει στην κλάση οικουμενικότητας του τυχαίου προτύπου Ising.

Δεδομένου ότι οι ανωμαλίες Z^* των παραγώγων του λογαρίθμου των δυνάμεων των δειγματικών μέσων των δυνάμεων (1, 2, 4) της παραμέτρου τάξης ως προς το αντίστροφο της θερμοκρασίας κλιμακώνουν ως προς το $\sim L^{1/\nu}$ με το μέγεθος L , έγινε ταυτόχρονη προσαρμογή στις καμπύλες για τις τρεις δυνάμεις (σχήμα 4.6) στο εύρος $L = \{8-44\}$.

Κρίσιμος εκθέτης επιδεικτικότητας - γ/ν

Ακολουθεί ο υπολογισμός του κρίσιμου εκθέτη γ/ν από τα μέγιστα του δειγματικού μέσου της επιδεικτικότητας ($[\chi]^*$). Όπως φαίνεται και στο σχήμα 4.8(α) η μορφή των καμπύλων δείχνει την καλή ποιότητα

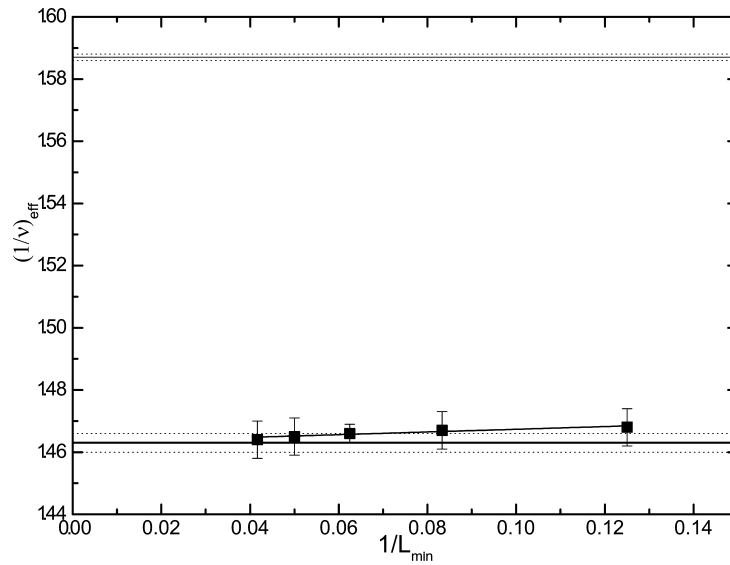


Σχήμα 4.6: Συμπεριφορά FSS των κορυφών της παραγώγου του λογαρίθμου των $n = 1, 2, 4$ δυνάμεων της παραμέτρου τάξης ως προς το αντίστροφο της θερμοκρασίας. Η τιμή για τον εκθέτη ($1/\nu = 1.468(6)$) προέκυψε από ταυτόχρονη προσαρμογή που έγινε για ολόκληρο το φάσμα πλεγματικού μεγέθους της προσομοίωσης ($L = \{8 - 44\}$).

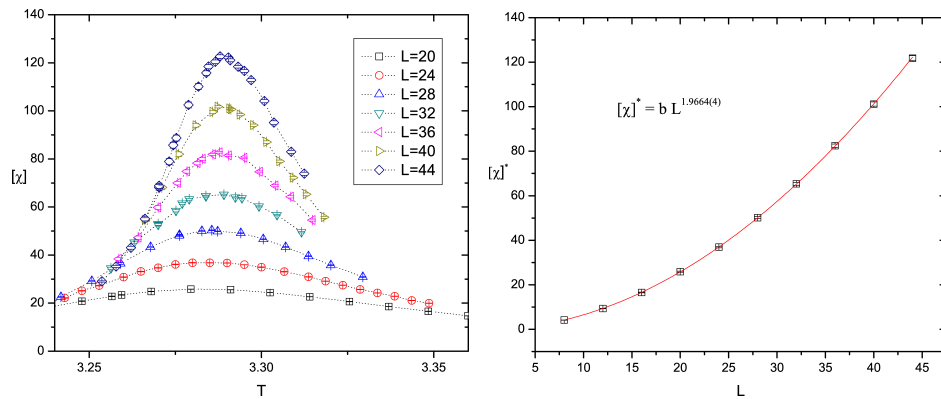
των δεδομένων της προσομοίωσης MC. Δεδομένου ότι οι κορυφές της επιδεικτικότητας ακολουθούν τον νόμο δύναμης $[\chi]^* = b \cdot L^{\gamma/\nu}$ εφαρμόστηκε το παραπάνω σχήμα κλιμάκωσης εφαρμόζοντας προσαρμογές του νόμου δύναμης σε διαφορετικά πλεγματικά εύρη μεταβάλλοντας το $L_{min} = \{8 - 24\}$ και κατόπιν έγινε γραμμική προσαρμογή στους ενεργούς εκθέτες που προέκυψαν 4.8(β). Παρατίθεται η προσαρμογή που έγινε για το πλήρες εύρος $L = \{8 - 44\}$ στο σχήμα 4.8(γ).

Οι αποκλίσεις στου ενεργούς εκθέτες που παρατηρούνται στο σχήμα 4.8(γ) είναι ένδειξη ότι οι αρχικές διορθώσεις κλιμάκωσης ενδεχομένως δεν μηδενίζονται στο εγκάρσια ανισοτροπικό μοντέλο.

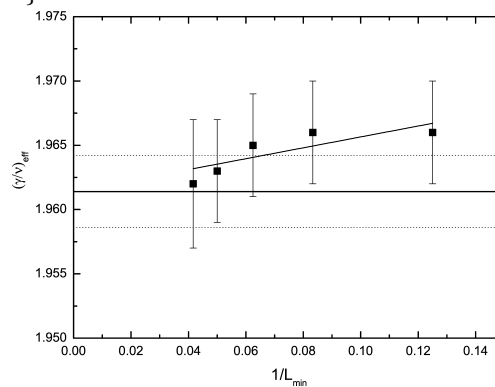
Η τελική τιμή που βρέθηκε από την γραμμική προσαρμογή είναι $\gamma/\nu = 1.9614(28)$. Η τιμή του εκθέτη είναι συμβατή με αυτή των Hasenbusch κ.ά. για τη μετάβαση FP του ιστροπικού (1.964(2) [69]). Επίσης συμφωνεί με τον εκθέτη για το τυχαία αραιό μοντέλο Ising των Ballesteros κ.ά. $\gamma/\nu = 1.963(5)$ [5], αλλά και των Hasenbusch κ.ά. 1.964(1) [65].



Σχήμα 4.7: Συμπεριφορά των ενεργών εκθετών $(1/\nu)_{\text{eff}}$ σε σχέση με το πλεγματικό εύρος της προσαρμογής της παραγωγού του λογαρίθμου των δυνάμεων της παραμέτρου τάξεως ως προς το αντίστροφο της θερμοκρασίας. Η τιμή της γραμμικής προσαρμογής για τα σημεία του διαγράμματος (συνεχής γραμμή) $1/\nu = 1.463(3)$ συμφωνεί απόλυτα με τη βιβλιογραφία για τον εκθέτη τυχαίου μοντέλου Ising. Οι διακεκομμένες δείχνουν το σφάλμα της παρεμβολής. Στο πάνω μέρος του σχήματος παρατίθεται ο αντίστοιχος εκθέτης του απλού κυβικού μοντέλου Ising $1/\nu = 1.587(1)$ [67].



(α') Καμπύλες του δειγματικού μέ- (β') Προσαρμογή του νόμου δύνα-
σου της μαγνητικής επιδεκτικότη-
της των $[\chi]^*$. Ο $\gamma/\nu = 1.966(4)$ για
τας για πλέγματα γραμμικού μή-
το εύρους $L = \{8 - 44\}$.
κούς $L = \{20 - 44\}$.

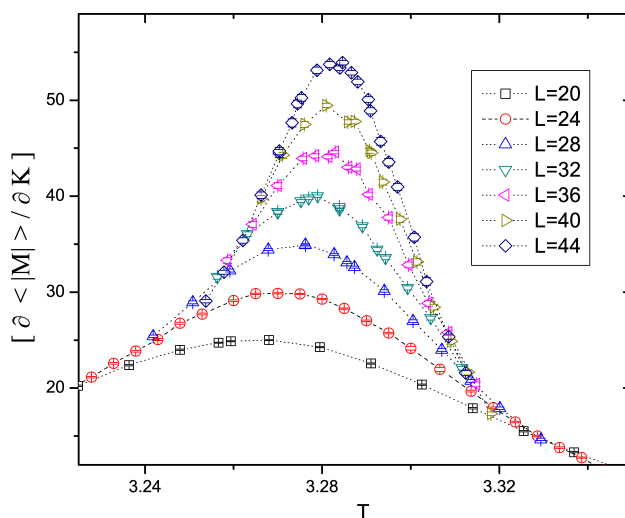


(γ) Ενεργοί εκθέτες γ/ν ως προς το L_{min} του εύρους από το οποίο προέ-
κυψαν. Οι οριζόντιες γραμμές δείχνουν τη γραμμική προσαρμογή που έγινε
μεταξύ των σημείων (συνεχής γραμμή) με το σφάλμα της (διακεκομμένες).
Η τιμή για τον εκθέτη βρέθηκε $\gamma/\nu = 1.9614(28)$.

Σχήμα 4.8: FSS ψευδοκρίσιμων μαγνητικής επιδεκτικότητας.

Κρίσιμος εκθέτης β/ν

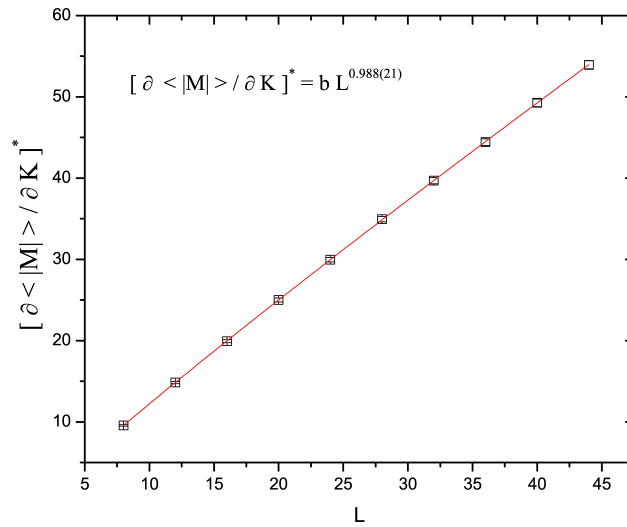
Ακολουθώντας το σχήμα FSS της (§1.2.4) ο κρίσιμος εκθέτης β/ν δίνεται από την κλιμάκωση των μεγίστων της παραγώγου του απολύτου της παραμέτρου τάξης ως προς το αντίστροφο της θερμοκρασίας: $[\partial\langle|M|\rangle/\partial K]^* = b \cdot L^{(1-\beta)/\nu}$. Στο σχήμα 4.9 παρατίθενται οι καμπύλες με τα μέγιστα. Στη συνέχεια όπως και προηγουμένως υπολογίζονται οι ενεργοί εκθέτες που προκύπτουν για τα διαφορετικά πλεγματοειδή εύρη μεταβάλλοντας το L_{min} από 8 έως 24.



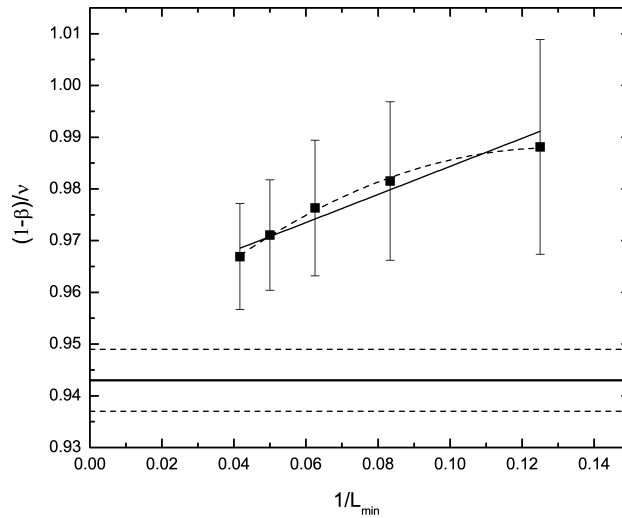
Σχήμα 4.9: Τα MC σημεία για την παράγωγο του απολύτου της μαγνήτισης ως προς το αντίστροφο της θερμοκρασίας για πλέγματα μεγέθους $L = 20 - 44$.

Στο σχήμα 4.10 παρουσιάζεται η παρεμβολή του νόμου κλιμάκωσης που έγινε για ολόκληρο το εύρος. Η γραμμική παρεμβολή που έγινε σε όλο το εύρος των ενεργών εκθετών, δίνει $(1 - \beta)/\nu = 0.9572(54)$. Χρησιμοποιώντας την τιμή που βρέθηκε προηγουμένως από την ανάλυση για το $1/\nu = 1.463(3)$, ο κρίσιμος εκθέτης της παραμέτρου τάξης γίνεται $\beta/\nu = 0.5058(84)$. Η σχέση υπερκλιμάκωσης για τις τρεις διαστάσεις ($\frac{\gamma}{\nu} + 2\frac{\beta}{\nu} = 3$), δίνει $\beta/\nu \sim 0.518$ χρησιμοποιώντας το τυπικό από την βιβλιογραφία $\gamma/\nu \sim 1.964$.

Η απόκλιση από την τιμή της υπερκλιμάκωσης, βελτιώνεται όταν η παρεμβολή γίνει στα τρία πρώτα σημεία του 4.11 ($L_{min} = 16, 20, 24$): $(1 - \beta)/\nu = 0.948(3) \Rightarrow \beta/\nu = 0.515(6)$. Η καλύτερη όμως προσέγγιση δίνεται από πολυωνυμική παρεμβολή δευτέρου βαθμού και στα πέντε σημεία του 4.11: $(1 - \beta)/\nu = 0.943(6) \Rightarrow \beta/\nu = 0.520(9)$.



Σχήμα 4.10: Τα μέγιστα των καμπυλών της παραγώγου του απόλυτου της μαγνήτισης (βλ. 4.9) για $L = 8-44$. Η παρεμβολή του νόμου δύναμης έδωσε $(1 - \beta)/\nu = 0.988(21)$.

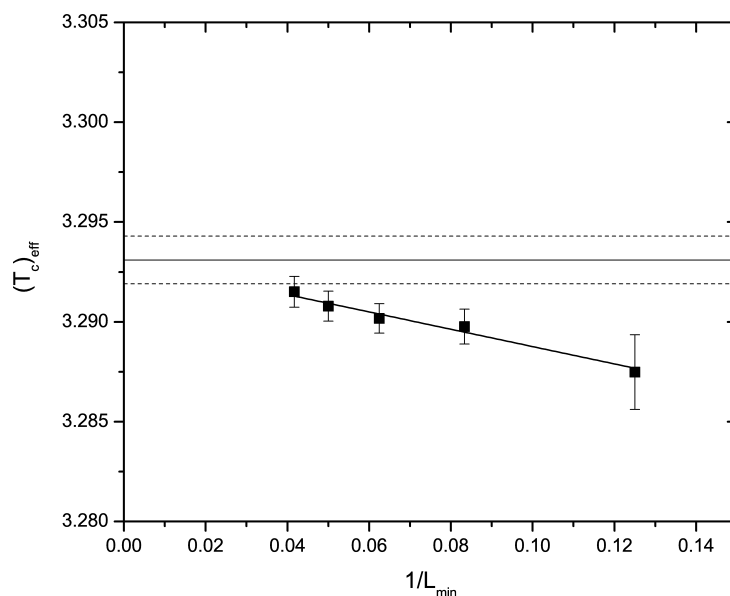


Σχήμα 4.11: Συμπεριφορά των ενεργών εκθετών $(1 - \beta)/\nu$. Η συνεχής γραμμή δείχνει την γραμμική ενώ η διακεκομμένη την πολυωνυμική δεύτερης τάξης παρεμβολή. Η συνεχής και οι διακεκομμένες οριζόντιες αντιστοιχούν στην τιμή της πολυωνυμικής παρεμβολής $(1 - \beta)/\nu = 0.943(6)$.

Κρίσιμη θερμοκρασία στην $p_{xy} = 0.176$

Η κρίσιμη θερμοκρασία αρχικά εκτιμήθηκε μέσω ταυτόχρονης προσαρμογής στις ψευδοκρίσιμες θερμοκρασίες των μεγεθών που χρησιμο-

ποιήθηκαν για την ανάλυση πεπερασμένου μεγέθους [105,107]. Ο νόμος δύναμης των ψευδοκρίσιμων θερμοκρασιών των έξι ποσοτήτων Z (ειδικής θερμότητας C , μαγνητικής επιδεκτικότητας χ , των παραγώγων ως προς το αντίστροφο της θερμοκρασίας του λογαρίθμου των 1, 2, 4 δυνάμεων και του απολύτου της μαγνήτισης) που έχουν μετρηθεί είναι $T_{[Z]^*} = T_c + b_Z \cdot L^{-1/\nu}$.

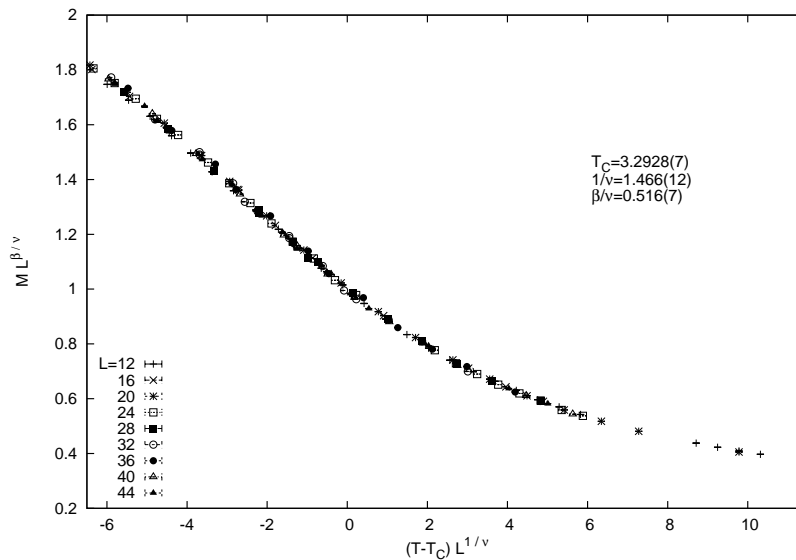


Σχήμα 4.12: Τα τετράγωνα σημεία αντιστοιχούν στις ενεργές κρίσιμες ψευδοκρίσιμες θερμοκρασίες οι οποίες παρήχθησαν από την εφαρμογή ταυτόχρονης προσαρμογής στον νόμο: $T_{[Z]^*} = T_c + b_Z L^{-1/\nu}$. Χρησιμοποιήθηκε η τιμή $1/\nu = 1.463$ για τον κρίσιμο εκθέτη μήκους συσχέτισης όπως προέκυψε από την προηγούμενη ανάλυση. Η γραμμική προσαρμογή στα σημεία παρήγαγε την τιμή $T_c = 3.2931(12)$ η οποία απεικονίζεται από την οριζόντια κάθετη και τις διακεκομμένες γραμμές.

Για τον τελικό υπολογισμό της κρίσιμης θερμοκρασίας χρησιμοποιήθηκε στον νόμο δύναμης $T_{[Z]^*} = T_c + b_Z L^{-1/\nu}$ η τιμή του κρίσιμου εκθέτη του μήκους συσχέτισης που βρέθηκε στην προηγούμενη ανάλυση $1/\nu = 1.463$. Για την ανάλυση πεπερασμένου μεγέθους μεταβάλλεται πάλι το L_{\min} στην προσαρμογή του νόμου δύναμης και έτσι παράγεται η ακολουθία ενεργών ψευδοκρίσιμων οι οποίες παρουσιάζονται στο σχήμα 4.12. Η γραμμική προσαρμογή σε όλα τα παραπάνω σημεία δίνει $T_c = 3.2931(12)$, ενώ αν περιοριστεί στα τρία τελευταία ($L_{\min} = 16, 20, 24$) $T_c = 3.2945(18)$. Η γραμμική προσαρμογή έγινε επίσης με ελεύθερο τον κρίσιμο εκθέτη $1/\nu$, από την οποία προέκυψαν οι

τιμές $T_c = 3.2934(8)$ και $T_c = 3.2940(16)$ για όλα τα σημεία και τα τρία τελευταία αντίστοιχα. Ως καταληκτική κρίσιμη θερμοκρασία η οποία ικανοποιεί τις προηγούμενες εκτιμήσεις προτείνεται η $T_c = 3.2938(9)$.

Τέλος η μέθοδος της συσσώρευσης δεδομένων δίνει την δυνατότητα να υπολογιστούν ταυτόχρονα οι κρίσιμοι εκθέτες $1/\nu$ και β/ν μαζί με την κρίσιμη θερμοκρασία T_c . Όπως φαίνεται στο αντίστοιχο σχήμα 4.13 η μέθοδος έδωσε $\beta/\nu = 0.516(7)$, $1/\nu = 1.466(12)$ και $T_c = 3.2928(7)$. Ο εκθέτης της μαγνήτισης είναι σε καλή συμφωνία με την τιμή που προβλέπει η υπερκλιμάκωση αλλά και οι υπόλοιπες τιμές είναι συνεπείς με τα προηγούμενα ευρήματα.

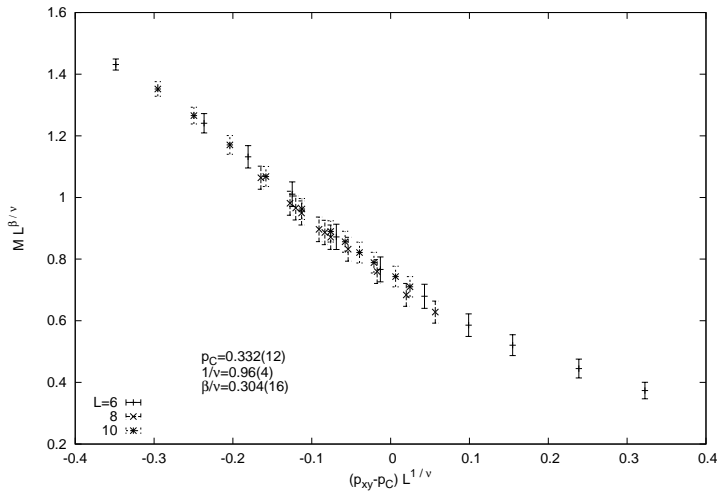


Σχήμα 4.13: Συσσώρευση των δεδομένων (data collapse) της μαγνήτισης για τα πλέγματα μεγέθους $L = 12 - 44$. Η μέθοδος έγινε σε όλο το εύρος του γραφήματος και έδωσε: $T_c = 3.2928(7)$, $1/\nu = 1.466(12)$, και $\beta/\nu = 0.516(7)$

4.3.2 Σιδηρομαγνητική-υαλώδης μετάβαση FG

Για τη μετάβαση FG έγινε μελέτη θεμελιώδους κατάστασης για τον εντοπισμό της κρίσιμης πιθανότητας, του σημείου A_z δηλαδή, του διαγράμματος φάσης 4.3. Χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος συσσώρευσης δεδομένων όπου την θέση της θερμοκρασίας όμως παίρνει η πιθανότητα p_{xy} . Για τη μελέτη χρησιμοποιήθηκαν πλέγματα μήκους $L = 6, 8, 10$. Ο νόμος δύναμης για την παράμετρο τάξης στη θεμελιώδη κατάσταση είναι:

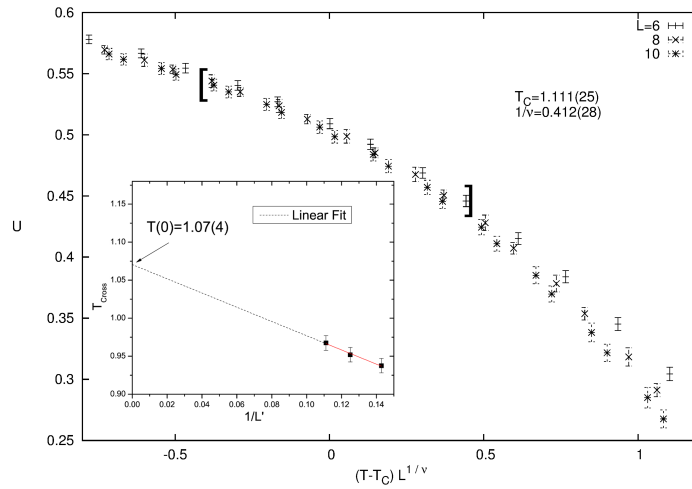
$M = L^{-\beta/\nu} f\{(p_{xy} - p_{A_z})L^{1/\nu}\}$. Το σχήμα 4.14 παρουσιάζει τα αποτελέσματα της συσσώρευσης. Αξιοσημείωτο είναι ότι η κρίσιμη πιθανότητα $p_{A_z} = 0.332(12)$ βρίσκεται κοντά στην τιμή $\frac{3}{2}p_A$ με $p = 0.222(5)$ [62]. Φαίνεται δηλαδή ότι όπως η μετάβαση FP (4.3.1), έτσι και η FG ακολουθεί προσεγγιστικά τη σχέση 4.18 $T_z(p_{xy}) = T(1.5p)$. Αν υποθέσουμε ότι ισχύει η παραπάνω σχέση για το πολυ-κρίσιμο σημείο M_z δεδομένου ότι ισχύει για τις δύο από τις τρεις μεταβάσεις οι οποίες το ορίζουν. Προκύπτει άρα $p(M_z) \approx 0.3477$; $T(M_z) \approx 1.669$ βλ. σχήμα 4.3.



Σχήμα 4.14: Συσσώρευση των δεδομένων της μαγνήτισης για τα πλέγματα μεγέθους $L = 6, 8, 10$ στη θεμελιώδη κατάσταση του εγκάρσια ανισοτροπικού μοντέλου για την FG μετάβαση. Η μέθοδος εφαρμόστηκε σε όλο το εύρος του γραφήματος και έδωσε $p_{A_z} = 0.332(12)$; $T = 0$ (σημείο A_z σχ. 4.3).

4.3.3 Υαλώδης-παραμαγνητική μετάβαση GP

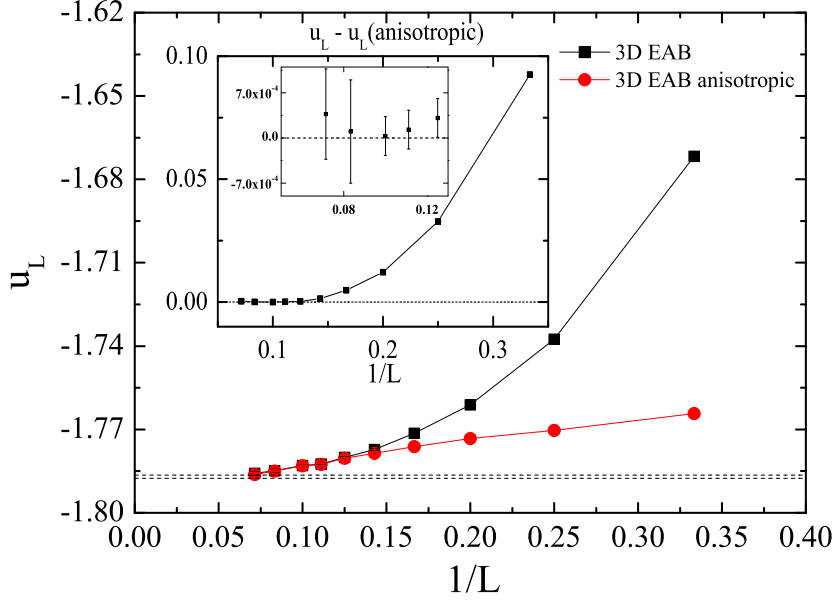
Για τη μετάβαση μελετήθηκε η συμμετρική πιθανότητα του διαγράμματος φάσης $p_{xy} = 0.5$ - σημείο B_z . Το σημείο B_z μελετήθηκε με τη μέθοδο συσσώρευσης δεδομένων για την Binder cumulant U της παραμέτρου τάξης q (σχήμα 4.15). Η μέθοδος έδωσε κρίσιμη θερμοκρασία $T_{B_z} = 1.111(25)$ πολύ κοντά σε αυτήν του ιστροπικού $T_B = 1.109(10)$ [68]. Εξ' άλλου η ανάλυση της κλιμάκωσης των τομών της U έδωσε $T_{B_z} = 1.07(4)$ (ένθετο σχήμα του σχήματος 4.15). Συμπεραίνουμε ότι τα δύο μοντέλα έχουν την ίδια κρίσιμη θερμοκρασία $T_B = T_{B_z} = 1.11$ (βλ. διάγραμμα φάσης 4.3) για την πιθανότητα $p = p_{xy} = 0.5$.



Σχήμα 4.15: Συσσώρευση δεδομένων της Binder cumulant για την εύρεση της κρίσιμης θερμοκρασίας στο $p_{xy} = 0.5$ για πλέγματα μεγέθους $L = 6, 8, 10$ - $T_C = 1.111(25)$. Στο ένθετο σχήμα παρουσιάζεται η κλιμάκωση των τομών της Binder cumulant. Μέτρο κλιμάκωσης ορίστηκε το $1/L'$ με $L' = \left\{ \frac{(L_6 + L_8)}{2}, \frac{(L_6 + L_{10})}{2}, \frac{(L_8 + L_{10})}{2} \right\}$. Η γραμμική προσαρμογή στις παραπάνω τιμές έδωσε $T_C = 1.07(4)$.

Η παραπάνω υπόθεση ενισχύεται από τα ευρήματα της θεμελιώδους κατάστασης στην ίδια πιθανότητα. Οι διαδικασίες της μελέτης περιγράφεται παρακάτω αναλυτικότερα 4.3.4. Στο σχήμα 4.16 παρουσιάζεται η συμπεριφορά πεπερασμένου μεγέθους της ενέργειας ανά σπιν στη θεμελιώδη κατάσταση στη συμμετρική πιθανότητα $p = p_{xy} = \frac{1}{2}$ του εγκάρσιου και του ιστροπικού μοντέλου ΕΑ. Από τη συμπεριφορά των καμπυλών προκύπτει με ασφάλεια το συμπέρασμα ότι στο ασυμπτωτικό όριο η ενέργειά τους συμπίπτει.

Πρέπει να σημειωθεί ότι στη συμμετρική πιθανότητα τα δύο μοντέλα έχουν την ίδια τιμή σύγχυσης $f(1/2) = f_z(1/2) = 1/2$ § 4.18.



Σχήμα 4.16: Ειδική ενέργεια θεμελιώδους κατάστασης του εγκάρσια ανισοτροπικού και ισοτροπικού μοντέλου. Στα ένθετα σχήματα παρουσιάζεται η διαφορά τους η οποία όπως φαίνεται στο εσωτερικό σχήμα γίνεται κατά πολύ μικρότερη από το σφάλμα της για $L \geq 6$ βλ. πίνακα 4.2. Οι δύο διακεκομμένες στο κεντρικό πεδίο αντιστοιχούν στις βιβλιογραφικές τιμές: $u_\infty = -1.7863(4)$ [141] και $-1.7876(3)$ [62].

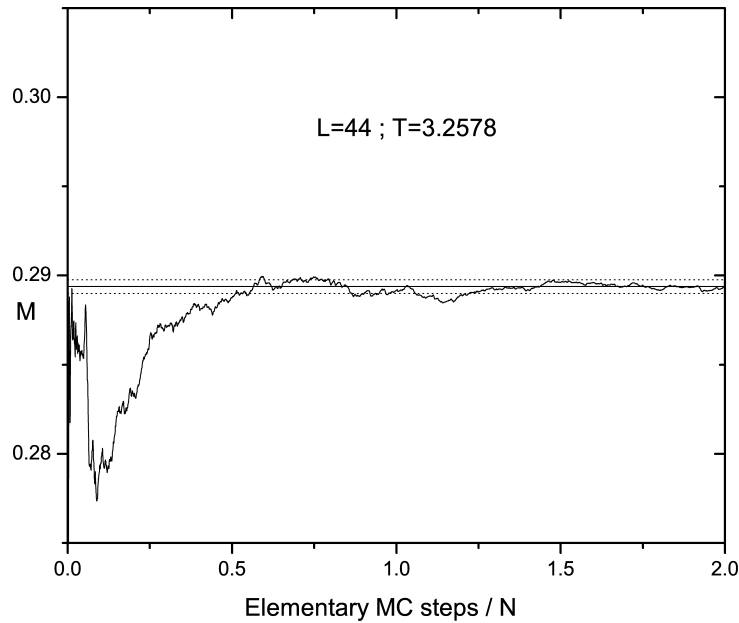
4.3.4 Περιγραφή διαδικασίας προσομοίωσης

Μετάβαση FP $p_{xy} = 0.176$

Το μεγαλύτερο μέρος της διαδικασίας προσομοίωσης για τη μετάβαση έγινε στην πιθανότητα $p_{xy} = 0.176$.

Ο χρόνος ισορρόπησης δοκιμάστηκε για κάθε L παίρνοντας μία υλοποίηση και παρατηρώντας μια θερμοκρασία κοντά στην κρίσιμη. Στο σχήμα 4.17 παρουσιάζεται ενδεικτικά για το μεγαλύτερο μέγεθος $L = 44$ η καμπύλη της μαγνήτισης στην διαδικασία ισορρόπησης. Σαν μονάδα χρόνου ή στοιχειώδες βήμα MCs ορίστηκε μία προσπάθεια ανταλλαγής PT ακολουθούμενη από μια σάρωση Metropolis η οποία αποτελείται από $N = L^3$ δοκιμές αναστροφής σπιν.

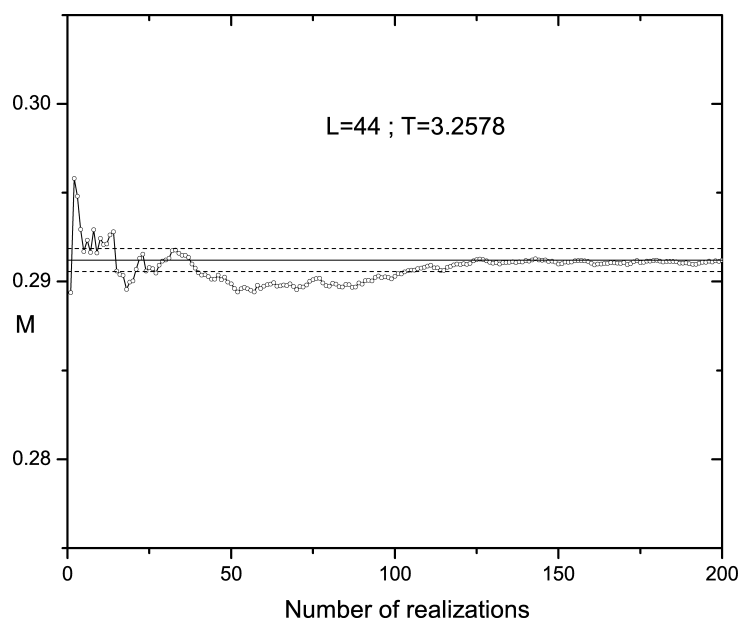
Στο σχήμα 4.18 παρουσιάζεται η αντίστοιχη καμπύλη για την άθροιση, όμως, στις υλοποιήσεις, η οποία δείχνει αν είναι επαρκές το πλήθος των



Σχήμα 4.17: Καμπύλη ισορρόπησης θερμικής δειγματοληψίας, σε μία υλοποίηση μεγέθους $L = 44$, όπου παρουσιάζεται ο αθροιστικός κινούμενος μέσος όρος της μαγνήτισης. Ο άξονας x δείχνει τα στοιχειώδη βήματα MC ανά αριθμό σπιν N .

δειγμάτων. Αφορά στο μέγεθος $L = 44$ και στην ίδια θερμοκρασία με αυτή του σχήματος 4.17. Η δειγματική διακύμανση (sample to sample fluctuation) η οποία παρουσιάζεται με διακεκομμένες στο σχ. 4.18 είναι εν γένει μεγαλύτερη από το στατιστικό σφάλμα της θερμικής άθροισης (διακεκομμένες σχ. 4.17).

Το σχήμα PT που χρησιμοποιήθηκε ήταν CAE (§2.5.2) τριών θερμοκρασιών με λόγο ανταλλαγής αντιγράφων $r = 0.5$ με τοπικές κινήσεις Metropolis. Το εύρος πλεγματικών μεγεθών ήταν $L \in \{8 - 44\}$. Ανάλογα με το μέγεθος χρησιμοποιήθηκε κατάλληλος αριθμός υλοποιήσεων (R). Για να καλυφθεί μεγαλύτερη θερμοκρασιακή περιοχή αλλά και να παραχθούν πυκνότερα σημεία έγιναν (K) ανεξάρτητες εφαρμογές της παραπάνω διαδικασίας σε ενδιάμεσες θερμοκρασίες. Με τον τρόπο αυτό η ομαλότητα των παραγόμενων καμπυλών δείχνει την γενική ποιότητα της δειγματοληψίας. Με αυτόν τον τρόπο το συνολικό πλήθος των θερμοκρασιών κάθε μεγέθους είναι $3 \cdot K$. Στον πίνακα 4.1 παρουσιάζονται οι λεπτομέρειες της διαδικασίας δειγματοληψίας. Οι χρόνοι ισορρόπησης και άθροισης, t_e και t_m αντίστοιχα μετρώνται σε στοιχειώδη βήματα MCs διαιρεμένα με το πλήθος των σπιν N .



Σχήμα 4.18: Καμπύλη ισορρόπησης δειγματικής άθροισης όπου παρουσιάζεται ο αθροιστικός κινούμενος μέσος όρος της μαγνήτισης ($M = \langle |M| \rangle$).

Πίνακας 4.1: Παράμετροι της διαδικασίας προσομοίωσης στην περιοχή της FP μετάβασης.

L	K	R	$t_e(MCs/N)$	$t_m(MCs/N)$
8, 12	10	10000	7	20
16, 20, 24	8	1000	5	15
28	8	500	3	8
32, 36, 40	5	300	2	5
44	8	200	1	2

Μετάβαση FG

Για τη θεμελιώδη κατάσταση στο σημείο A_z του διαγράμματος φάσης 4.3 έγινε μια σειρά από προσομοιώσεις PT για πάνω από 10 πυκνότητες σε 10000 υλοποιήσεις πλεγμάτων μεγέθους $L = 6, 8, 10$. Η διαδικασία PT είχε εύρος 6, 7 θερμοκρασιών για κάθε πιθανότητα και L . Η επιλογή των θερμοκρασιών έγινε με την CEI μέθοδο.

Μελέτη στην υαλώδη φάση $p_{xy} = 0.5$

Για τη μελέτη της κρίσιμης θερμοκρασίας στην οποία έγινε συσσώρευση δεδομένων της Binder cumulant τα δεδομένα παρήχθησαν από διαδικασία PT αποτελούμενη από περισσότερες από 20 θερμοκρασίες επιλεγμένες με τη μέθοδο CAE με ρυθμό ανταλλαγής 0.5. Για τα μεγέθη πλέγματος $L = 6, 8$ η άθροιση έγινε σε 10^4 υλοποιήσεις και 2000 υλοποιήσεις για $L = 10$.

Για την πολύ πιο απαιτητική περιοχή της θεμελιώδους κατάστασης ακολουθήθηκε διαδικασία παρόμοια με αυτή των Roma κ.ά. [153]. Το εύρος των πλεγματικών μεγεθών καλύπτει την περιοχή $L = \{3 - 14\}$. Χρησιμοποιήθηκε πρωτόκολλο PT με CAE § 2.5.2 μέθοδο επιλογής θερμοκρασιών, δειγματοληψία BKL 2.3.2 και NN_a ανταλλαγή θερμοκρασιών. Για κάθε δείγμα έγινε μία δοκιμή και χρόνος ισορρόπησης $t_{eq} = 2N$. Οι υπόλοιπες παράμετροι της PT περιγράφονται στον πίνακα 4.2 απ' όπου φαίνεται ότι οι χρόνοι άθροισης t_{av} είναι συγκρίσιμοι με αυτούς της εργασίας των Roma κ.ά. (πίνακας Β.3 [153]). Το εύρος θερμοκρασίας είναι $T = 0.4 - 2.0$. Ο χρόνος των τοπικών κινήσεων καθορίστηκε μέσω δοκιμών που έγιναν σε χαρακτηριστικές υλοποιήσεις, πάνω από δύο για κάθε μέγεθος και ορίστηκε ο ελάχιστος ο οποίος έδινε τη σωστή (χαμηλότερη) θεμελιώδη ενέργεια.

4.3.5 Συμπεράσματα

Από τη μελέτη του εγκάρσια ανισοτροπικού μοντέλου Edwards-Anderson προέκυψε ότι όλες οι μεταβάσεις φάσης ανήκουν στις αντίστοιχες κλάσεις οικουμενικότητας του ιστροπικού μοντέλου. Για τις μεταβάσεις από τη σιδηρομαγνητική στην παραμαγνητική αλλά και στην υαλώδη φάση (FP, FG) ισχύει ο προσεγγιστικός νόμος $T_z(p_{xy}) \approx T(\frac{3}{2}p)$ δηλαδή η θερμοκρασία μετάβασης είναι περίπου η ίδια για πιθανότητες όπου ο λόγος σιδηρομαγνητικών προς αντισιδηρομαγνητικών αλληλεπιδράσεων είναι ίδιος. Τέλος η ταύτιση της κρίσιμης θερμοκρασίας του ιστροπικού με το εγκάρσια ανισοτροπικό μοντέλο αλλά και της θεμελιώδους ενέργειας στη συμμετρική πιθανότητα 0.5, αποτελεί ισχυρή ένδειξη ότι η συμπεριφορά της υαλώδους φάσης αναδεικνύεται από τα χαρακτηριστικά της σύγχυσης.

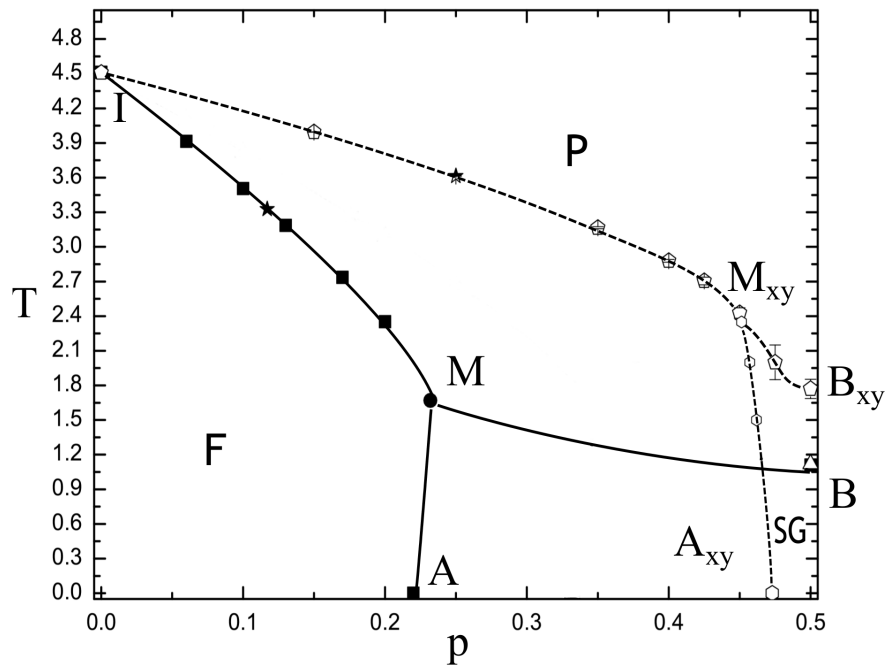
Πίνακας 4.2: Παράμετροι της διαδικασίας PT και ενέργειας ανά σωματίδιο θεμελιώδους κατάστασης για το εγκάρσια ανισοτροπικό (u_z) και το ισοτροπικό μοντέλο EA . Η δεύτερη στήλη έχει τον ρυθμό ανταλλαγής r και το πλήθος των αντιγράφων M . $n = N_{local}/(M - 1)$, N_s και t_{av} είναι ο αριθμός των τοπικών κινήσεων, ο αριθμός των υλοποιήσεων και ο χρόνος άθροισης αντίστοιχα. Η τελευταία στήλη περιέχει την διαφορά της αντίστοιχης ενέργειας με αυτή του ισοτροπικού μοντέλου όπως δίνεται στον πίνακα B.3 της εργασίας [153]. Το πρωτόκολλο που χρησιμοποιήθηκε ήταν το $[CAE, BKL, (NN)_a]$ με $t_{eq} = 2N$.

L	$(r; M)$	n	N_s	t_{av}	u_z	$u - u_z$
3	(0.5;5)	2	5×10^5	2.7×10^2	-1.7642(3)	0.0925
4	(0.35;5)	4	10^5	6.4×10^2	-1.7703(3)	0.0328
5	(0.2;5)	9	10^5	1.25×10^3	-1.7733(3)	0.0122
6	(0.1;5)	216	2×10^4	3.24×10^3	-1.7762(3)	0.0048
7	(0.15;7)	17	6×10^3	3.43×10^4	-1.7786(3)	0.0014
8	(0.1;7)	102	10^4	4.2×10^4	-1.7803(3)	0.0003
9	(0.1;9)	27	2×10^3	1.2×10^6	-1.7825(3)	0.0001
10	(0.1;11)	120	2.5×10^3	1.2×10^6	-1.7830(2)	0.0000
12	(0.1;13)	43	10^2	10^7	-1.7850(8)	0.0001
14	(0.1;13)	68	10^2	1.4×10^7	-1.7862(8)	0.0004

4.4 Κατά μήκος ανισοτροπικό μοντέλο ΕΑ

Η ανισοτροπία του μοντέλου έγκειται στο ότι μόνο κατά τον ένα άξονα (z) υπάρχει αντισιδηρομαγνητική αλληλεπίδραση. Τα επίπεδα xy όμως είναι πλήρως σιδηρομαγνητικά. Δηλαδή στη σχέση 4.12 τίθενται $p_z \geq 0; p_{xy} = 0$. Η μελέτη του παρόντος μοντέλου δημοσιεύτηκε στην εργασία [143].

Όπως και στη μελέτη του εγκάρσιου μοντέλου ερευνήθηκε όλο το διάγραμμα φάσης 4.19 προσομοιώνοντας κατάλληλες περιοχές πιθανότητας ώστε να εντοπιστούν σημεία των τριών μεταβάσεων.



Σχήμα 4.19: Διάγραμμα φάσης του κατά μήκος ανισοτροπικού κυβικού προτύπου EA (διακεκομμένες) μαζί με το αντίστοιχο ιστροπικό (συνεχείς γραμμές). Οι γραμμές διαχωρίζουν τις τρεις φάσεις: σιδηρομαγνητική (F), παραμαγνητική (P) και υαλώδη (SG).

4.4.1 Σιδηρομαγνητική-παραμαγνητική μετάβαση FP

Το κύριο ενδιαφέρον μας είναι ο προσδιορισμός της κλάσης οικουμενικότητας της μετάβασης μέσω του εντοπισμού του κρίσιμου εκθέτη του μήκους συσχέτισης ν ο οποίος έγινε αφενός μέσω της μελέτης της κλιμάκωσης της ψευδοκρίσιμης θερμοκρασίας της ειδικής θερμότητας

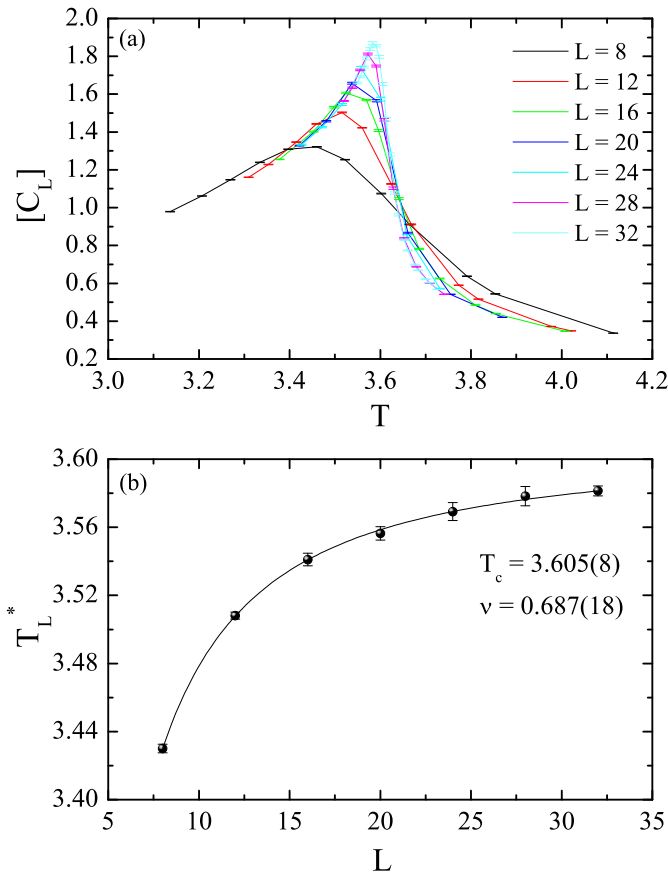
T_{C^*} και αφετέρου από την ανάλυση των κορυφών της παραγώγου του λογαρίθμου της δεύτερης δύναμης της παραμέτρου τάξης ως προς το αντίστροφο της θερμοκρασίας. Επιβεβαιώθηκαν τα αποτελέσματα με παράλληλη εκτίμηση των κρίσιμων θερμοκρασιών αλλά και του κρίσιμου εκθέτη της μαγνητικής επιδεκτικότητας γ/ν .

Ξεκινώντας την ανάλυση από την $p_z = 0.25$ όπου μελετήθηκε μεγάλο εύρος πλεγματικών μεγεθών $L = \{8 - 32\}$ παρουσιάζεται η κλιμάκωση της θερμοχωρητικότητας (σχήμα 4.20). Πιο συγκεκριμένα το σχήμα (a), παρουσιάζει τις καμπύλες θερμοχωρητικότητας $[C_L]$ ως προς τη θερμοκρασία για όλα τα πλεγματικά μεγέθη. Η παρατηρούμενη μετατόπιση των κορυφών φαίνεται στο αντίστοιχο σχήμα (b), όπου μελετήθηκε η κλιμάκωση των ψευδό-κρίσιμων θερμοκρασιών T_L^* . Εφαρμόζοντας τη σχέση κλιμάκωσης των ψευδοκρίσιμων θερμοκρασιών (1.49) στα αριθμητικά δεδομένα προκύπτει: $T_c = 3.605(8)$ και $\nu = 0.687(18)$. Ο κρίσιμος εκθέτης υποδεικνύοντας ότι το μοντέλο ανήκει στην κλάση οικουμενικότητας του τυχαίου μοντέλου Ising για το οποίο η βιβλιογραφία δίνει $\nu = 0.6837(53)$ [5], $0.683(3)$ [69] και $0.6835(25)$ [142].

Επιβεβαίωση της τιμής του κρίσιμου εκθέτη ν έδωσε η ανάλυση των κορυφών της παραγώγου του λογαρίθμου της δεύτερης δύναμης της παραμέτρου τάξης ως προς το αντίστροφο της θερμοκρασίας (σχήμα 4.21). Συγκεκριμένα παρουσιάζεται η εξάρτηση ως προς τη θερμοκρασία για το σύνολο των πλεγματικών μεγεθών. Στο ένθετο σχήμα παρουσιάζεται η κλιμάκωση που αναμένεται να συμπεριφέρεται σύμφωνα με τον νόμο 1.51 και έδωσε $\nu = 0.68(1)$ τιμή σύμφωνη με την τιμή από τη θερμοχωρητικότητα.

Τελειώνοντας την ανάλυση FSS με τις μαγνητικές ιδιότητες του μοντέλου και συγκεκριμένα με την εκτίμηση του εκθέτη γ/ν από την κλιμάκωση της μαγνητικής επιδεκτικότητας. Στο κύριο σχήμα του σχήματος 4.22 παρουσιάζεται η θερμοκρασιακή εξάρτηση της μαγνητικής επιδεκτικότητας και η FSS των αντίστοιχων μεγίστων στο ένθετο σχήμα. Η συνεχής γραμμή δείχνει την προσαρμογή του νόμου δύναμης 1.48 του ακολουθούμενου σχήματος FSS για το σύνολο των πλεγματικών μεγεθών. Το αποτέλεσμα της προσαρμογής είναι $1.966(17)$ για τον εκθέτη γ/ν ο οποίος είναι σύμφωνος με τις πιο ακριβείς βιβλιογραφικές τιμές του τυχαίου μοντέλου Ising: $1.965(6)$ [5, 13, 175].

Στο σχήμα 4.23 παρουσιάζονται οι τομές των καμπυλών της Binder cumulant της μαγνήτισης U_M . Είναι φανερό ότι οι καμπύλες τέμνονται κοντά στην τιμή 3.6 η οποία υποδεικνύει την κρίσιμη θερμοκρασία του συστήματος. Στο ένθετο σχήμα του σχήματος 4.23 έγινε πρόβλεψη της μετατόπισης του σημείου τομής για $L' \rightarrow \infty$ με $L' = 1/(L_1 + L_2)$ των σημείων τομής T_{cross} των ζευγαριών $(L_1, L_2) = (L, 2L)$ η οποία

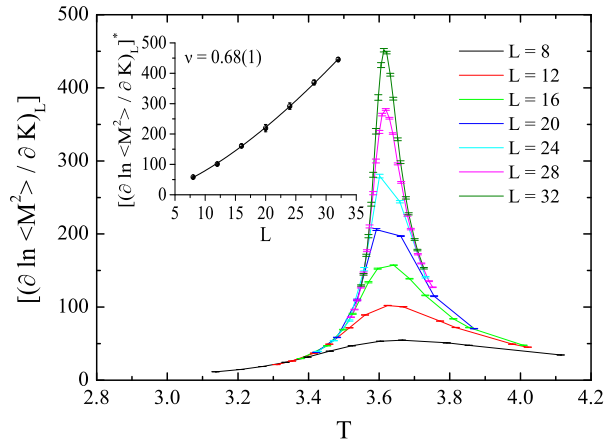


Σχήμα 4.20: (a) Καμπύλες θερμοχωρητικότητας ως προς τη θερμοκρασία για τα διάφορα πλεγματικά μεγέθη που μελετήθηκαν. (b) Μετατόπιση των αντίστοιχων ψευδο-κρίσιμων θερμοκρασιών όπως αυτές προέκυψαν από τα μέγιστα του σχήματος (a).

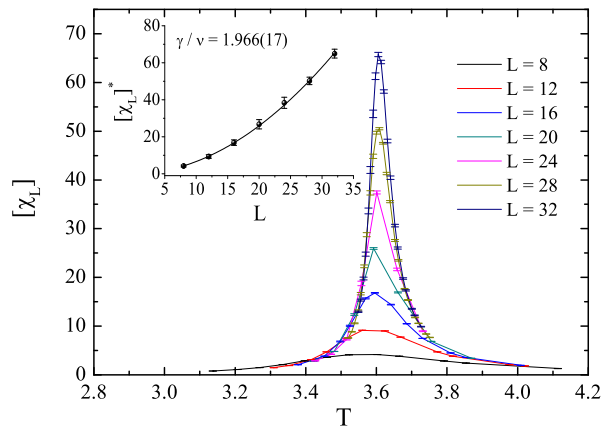
έδωσε $T_C = 3.605(7)$ σε καλή συμφωνία με την αντίστοιχη του σχήματος 4.20(b).

Εξ' άλλου μέσω της μεθόδου συσσώρευσης δεδομένων της Binder cumulant της μαγνήτισης U_M εκτιμήθηκε η κρίσιμη θερμοκρασία μαζί με τον κρίσιμο εκθέτη ν (σχήμα 4.24). Η μέθοδος έδωσε $T_C = 3.611(2)$ η οποία συμφωνεί με την ανάλυση των τομών της ίδιας ποσότητας βλ. σχήμα 4.23. Επιπλέον ο κρίσιμος εκθέτης $\nu = 0.68(3)$ συμφωνεί με τα προηγούμενα αποτελέσματα. Αντίστοιχη διαδικασία ακολουθήθηκε και για την Binder cumulant της επικάλυψης (overlap), τα αποτελέσματα της οποίας παρουσιάζονται στον πίνακα 4.3.

Επιπρόσθετα για την προσέγγιση του διαγράμματος φάσης 4.19 στην

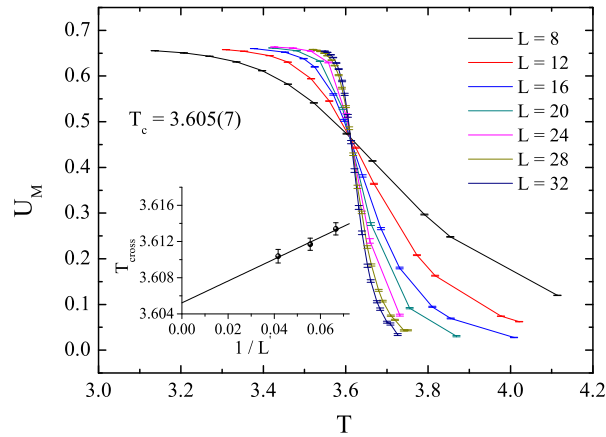


Σχήμα 4.21: Εξάρτηση θερμοκρασίας της παραγώγου του λογαρίθμου της δεύτερης δύναμης της παραμέτρου τάξης ως προς το αντίστροφο της θερμοκρασίας (κυρίως σχήμα) και η αντίστοιχη συμπεριφορά της κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους των κορυφών (ένθετο σχήμα).

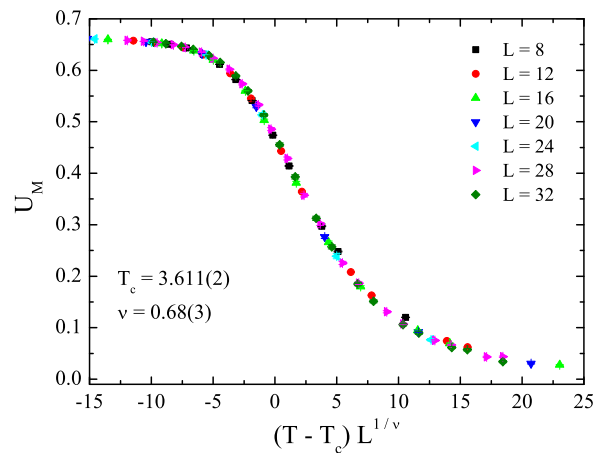


Σχήμα 4.22: Καμπύλες μαγνητικής επιδεκτικότητας συναρτήσει της θερμοκρασίας (κυρίως σχήμα) και εικόνα της κλιμάκωσης των μεγίστων της (ένθετο σχήμα).

περιοχή μικρών p_z μελετήθηκαν οι τιμές $p_z \in \{0.15, 0.35, 0.40\}$. Τα ευρήματα παρουσιάζονται συγκεντρωτικά στον πίνακα 4.3. Για την τιμή $p_z = 0.425$ παρατηρείται σημαντική απόκλιση στις εκτιμήσεις της κρίσι-



Σχήμα 4.23: Συμπεριφορά των τομών της Binder cumulant της μαγνήτισης (κυρίως σχήμα) και η παρέκταση στο όριο άπειρου μεγέθους των σημείων τομής (ένθετο σχήμα).



Σχήμα 4.24: Συσσώρευση δεδομένων της Binder cumulant της μαγνήτισης U_M

μης θερμοκρασίας μεταξύ των τιμών που δίνει η U_M και η U_q υποδεικνύοντας ότι προσεγγίζεται το πολυ-κρίσιμο σημείο πέρα από το οποίο η μαγνήτιση δεν λειτουργεί ως κατάλληλη παράμετρος τάξης. Συγκεκριμένα στην $p_z = 0.45$ η απόκλιση αφορά και στην τιμή του κρίσιμου εκθέτη. Σε αυτήν την περίπτωση η συσσώρευση της U_M δίνει $1/\nu = 0.86(12)$

ενώ η αντίστοιχη της U_q $1/\nu = 0.67(12)$. Η δεύτερη τιμή είναι κοντά στην $1/\nu = 0.61(2)$ την οποία δίνουν ο Hasenbusch κ.ά. για το πολυ-κρίσιμο σημείο του ιστροπικού [66], γεγονός το οποίο δείχνει ότι η μετάβαση στην $p_z = 0.45$ είναι πολύ κοντά στο πολυ-κρίσιμο σημείο.

Πίνακας 4.3: Εκτιμώμενες τιμές της κρίσιμης θερμοκρασίας και του κρίσιμου εκθέτη του μήκους συσχέτισης από τη μέθοδο συσσώρευσης δεδομένων. Για $p_z \leq 0.45$ δίνονται δύο ομάδες αποτελεσμάτων. Η δεύτερη και τρίτη στήλη αφορά στην U_M ενώ η τέταρτη και πέμπτη στην U_q . Για $p_z > 0.45$ δίνονται μόνο οι τιμές από την U_q .

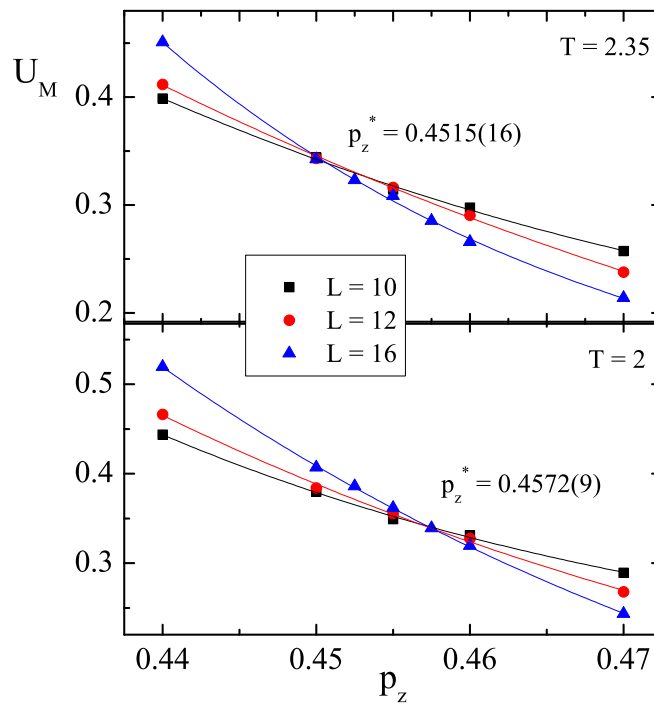
p_z	U_M		U_q	
	T_C	$1/\nu$	T_C	$1/\nu$
0.15	3.993(2)	1.465(9)	3.995(2)	1.46(2)
0.25	3.611(2)	1.464(12)	3.6128(9)	1.46(4)
0.35	3.172(2)	1.43(9)	3.166(9)	1.46(4)
0.4	2.90(2)	1.46(21)	2.880(12)	1.47(12)
0.425	2.74(3)	1.46(42)	2.705(33)	1.46(5)
0.45	2.41(12)	0.86(12)	2.43(5)	0.67(12)
0.475			2.00(15)	0.42(8)
0.5			1.77(8)	0.42(5)

4.4.2 Σιδηρομαγνητική-υαλώδης μετάβαση FG

Η πολύ απότομη κλίση της μετάβασης κάνει αρκετά δύσκολο τον εντοπισμό των κρίσιμων σημείων. Προκειμένου να μελετηθεί γίνεται μελέτη της συμπεριφοράς της Binder cumulant κρατώντας σταθερή τη θερμοκρασία και μεταβάλλοντας την πιθανότητα. Για $T = 2.6$ και $p_z = 0.44 - 0.47$ η U_M δεν τέμνεται, γεγονός που καταδεικνύει ότι στη θερμοκρασία αυτή βρισκόμαστε στην παραμαγνητική φάση ενώ σημεία τομής παρατηρούνται κάτω από την γραμμή μετάβασης. Στο σχήμα 4.25 βλέπουμε τις καμπύλες της U_M να τέμνονται στις θερμοκρασίες $T = 2$ και $T = 2.35$ δίνοντας κρίσιμες πιθανότητες $p_z = 0.4572(9)$ και $p_z = 0.4515(16)$ αντίστοιχα. Τα σημεία υπολογίστηκαν παίρνοντας τη μέση τιμή των τομών των πολυωνυμικών προσαρμογών δεύτερης τάξης. Πρέπει να σημειωθεί ότι οι τιμές αυτές είναι αδρές εκτιμήσεις και ότι χρειάζεται μελέτη μεγαλύτερων πλεγμάτων ώστε να φανεί η συμπεριφορά των μετατοπίσεων της κλιμάκωσης. Βάσει όμως των παρόντων

δεδομένων η μετάβαση φαίνεται να είναι πρόσθια και όχι επανεισδύουσα όπως στο ιστροπικό μοντέλο [34].

Παίρνοντας δύο τιμές κοντινές στο πολυ-κρίσιμο σημείο της μετάβασης FP και τις παραπάνω τιμές της FG εκτιμήθηκε το πολυ-κρίσιμο σημείο M_{xy} από τις τομές των γραμμικών προσαρμογών τους στο σημείο $p_z = 0.4509(5); T = 2.42(3)$. Η γραμμική προσαρμογή στα παραπάνω σημεία της FG έδωσε την κρίσιμη πιθανότητα της θεμελιώδους κατάστασης $p_z = 0.47(14)$.



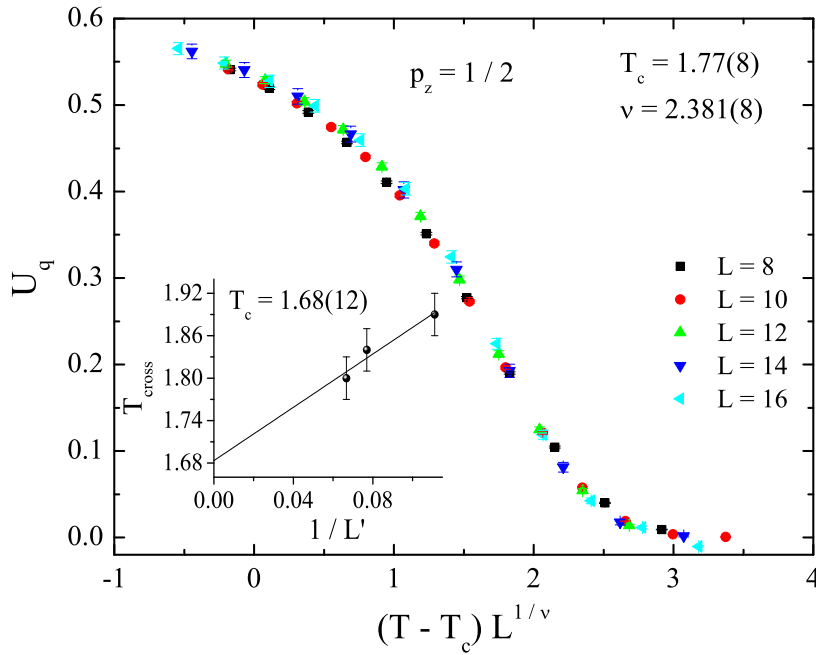
Σχήμα 4.25: Συμπεριφορά των τομών της Binder cumulant της μαγνήτισης U_M για στις θερμοκρασίες $T = 2, 2.35$ για πλέγματα μεγέθους $L = \{10, 12, 16\}$.

Πρόσθια συμπεριφορά έχουν υποδείξει για το εγκάρσια ανιστροπικό μοντέλο με λόγο αλληλεπιδράσεων $J^z/J^{xy} = 0.5$ οι Guven κ.ά. [58] (πάνω δεξί πλαίσιο του σχήματος 3). Για λόγο αλληλεπιδράσεων 1, οι συγγραφείς στην ίδια εργασία ανέφεραν την ύπαρξη στενής υαλώδους φάσης για το κατά μήκος μοντέλο χωρίς όμως να σχολιάζουν την κλίση της γραμμής μετάβασης (κάτω αριστερό πλαίσιο του σχήματος 3).

4.4.3 Υαλώδης-παραμαγνητική μετάβαση GP

Σύμφωνα με την προηγούμενη ανάλυση το πολυ-κρίσιμο σημείο είναι πολύ κοντά στην τιμή $p_z = 0.45$. Οπότε οι τιμές $p_z = 0.475$ και $p_z = 0.5$ ανήκουν στην μετάβαση GP. Πιο εκτεταμένα μελετήθηκε η συμμετρική $p_z = 0.5$ για την οποία έχουν μελετηθεί τόσο το ιστροπικό όσο και το εγκάρσια ανισοτροπικό και μπορεί να δώσει γόνιμα συγκριτικά δεδομένα. Για τον λόγο αυτό πραγματοποιήθηκε σε αυτό το σημείο συμπληρωματική μελέτη θεμελιώδους κατάστασης.

Κοντά στη συμμετρική $p_z = 1/2$ η υαλώδης φάση κάνει σαφώς εμφανή την παρουσία της. Η πρώτη ένδειξη είναι ότι η μαγνήτιση δεν αποτελεί κατάλληλη παράμετρο τάξης (βλέπε επίσης πιο κάτω τη συζήτηση για τη μαγνήτιση στην $T = 0$). Επιπλέον στις $p_z = 0.475$ και $p_z = 1/2$ η συσσώρευση δεδομένων της U_q έδωσε $\nu = 2.38(45)$ και $2.38(28)$ αντίστοιχα. Τιμές πολύ κοντά στις βιβλιογραφικές αντίστοιχες του ιστροπικού μοντέλου βλ. §4.2.3 όσο και την αντίστοιχη του εγκάρσια ανισοτροπικού 2.424(14) [142].



Σχήμα 4.26: Συσσώρευση δεδομένων της Binder cumulant του overlap U_q για $p_z = 1/2$ (κυρίως τμήμα). Στο ένθετο σχήμα παρουσιάζεται η γραμμική προσαρμογή στα σημεία τομής διαφόρων $1/L'$ με $L' = \left\{ \frac{(L_8+L_{10})}{2}, \frac{(L_{12}+L_{14})}{2}, \frac{(L_{14}+L_{16})}{2} \right\}$.

Η συσσώρευση της Binder cumulant του overlap U_q όπως παρουσιάζεται στο κυρίως τμήμα του σχήματος 4.26 δίνει για την κρίσιμη θερμοκρασία τιμή $T_{B_{xy}} = 1.77(8)$. Εξ' άλλου η γραμμική παρεμβολή στα σημεία τομής της U_q δίνει $T_{B_{xy}} = 1.68(12)$. Οι δύο τιμές είναι σύμφωνες και υποδεικνύουν ότι η $T_{B_{xy}}$ είναι σαφώς υψηλότερη από τις αντίστοιχες του ιστροπικού και εγκάρσια ανιστροπικού μοντέλου οι οποίες φαίνεται να συμπίπτουν μεταξύ τους (§ 4.3.3).

Θεμελιώδης κατάσταση στην $p_z = 1/2$

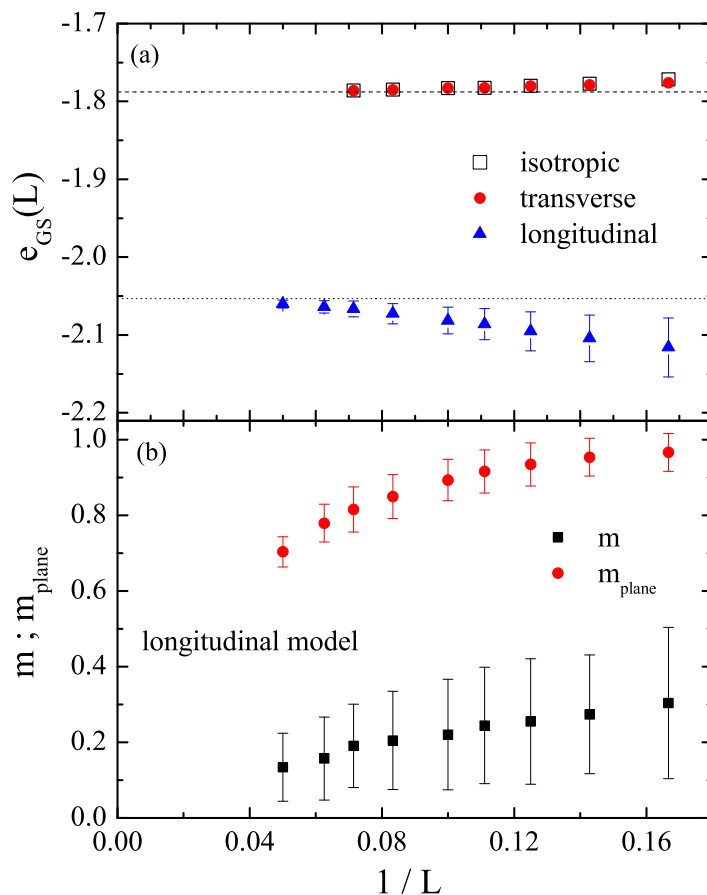
Στο σχήμα 4.27 παρουσιάζεται η κλιμάκωση της ενέργειας ανά σωματίδιο $e_{GS} = E_{GS}/N$ της θεμελιώδους κατάστασης για το εγκάρσια και κατά μήκος ανιστροπικό αλλά και το ιστροπικό κυβικό μοντέλο EA. Είναι ξεκάθαρο πως όπως και για την κρίσιμη θερμοκρασία το κατά μήκος ανιστροπικό διαφέρει στην e_{GS} από τα δυο άλλα μοντέλα τα οποία δείχνουν και πάλι να ταυτίζονται. Συγκεκριμένα $e_{GS}(L \rightarrow \infty) = -2.0533(8)$ για το κατά μήκος ανιστροπικό ενώ για το ιστροπικό η βιβλιογραφία δίνει $e_{GS}(L \rightarrow \infty) = -1.7863(4)$ [140], και $-1.7876(3)$ [61].

Το κάτω τμήμα του σχήματος 4.27 παρουσιάζει την κλιμάκωση της μαγνήτισης όπως αυτή εκδηλώνεται συνολικά στον όγκο του συστήματος (μαύρα τετράγωνα) αλλά και στα επίπεδα $m_{\text{plane}} = \langle \sum_{\text{planes}} |M_{\text{plane}}| \rangle$ (κόκκινοι κύκλοι) όπου αν και έχει όπως αναμένεται κατά πολύ μεγαλύτερη τιμή, στο όριο φθίνει στο μηδέν.

Η ερμηνεία η οποία προτείνεται για την διαφοροποίηση του κατά μήκος μοντέλου είναι ότι η ποσότητα της σύγχυσης (frustration) § 4.1.2 είναι στη συμμετρική περίπτωση $p_z = 1/2$ $f = 1/3$ ενώ στα άλλα δύο μοντέλα που ταυτίζονται ισχύει ότι $f = 1/2$. Συνολικά αναδεικνύεται η σύγχυση σαν ο βασικός παράγοντας που προσδιορίζει το διάγραμμα φάσης και την ενέργεια θεμελιώδους κατάστασης.

4.4.4 Περιγραφή διαδικασίας προσομοίωσης

Το σχήμα που ακολουθήθηκε είναι PT - CAE (§ 2.5.2) - Metropolis. Στα μικρά πλεγματικά μεγέθη το PT αποτελούνταν από 5 – 10 θερμοκρασίες, ενώ στα μεγάλα πλέγματα χρησιμοποιήθηκαν πάνω από 20, παρ' ότι ο λόγος ανταλλαγής αντιγράφων ήταν αρκετά χαμηλός της τάξης του 0.15. Όπως αναμενόταν, η διαδικασία ισορρόπησης ήταν γρηγορότερη στη σιδηρομαγνητική και παραμαγνητική φάση σε αντίθεση με την υαλώδη φάση κατά την οποία οι δειγματικές διακυμάνσεις (sample-to-sample fluctuations), οι απαιτούμενοι χρόνοι ισορρόπησης και άθροισης αλλά και το πλήθος υλοποιήσεων ήταν σημαντικά μεγαλύτερα.



Σχήμα 4.27: (a) Ενέργεια ανά σπιν e_{GS} του κυβικού ιστροπικού αλλά και των δύο ανισοτροπικών μοντέλων στη συμμετρική πιθανότητα $p; p_{xy}; p_z = 1/2$. (b) Κλιμάκωση της μαγνήτισης του όγκου και των επιπέδων του κατά μήκος ανισοτροπικού μοντέλου. Το σφάλμα αντιπροσωπεύει την δειγματική διακύμανση.

Μετάβαση FP

Για μικρά $p_z \in \{0.15, 0.25, 0.35, 0.40\}$, χρησιμοποιήθηκαν 6 με 7 πλεγματικά μεγέθη τα οποία κυμαίνονταν από $L = 8$ έως 32 ($p_z = 0.25$). Το πλήθος των δειγμάτων επίσης κυμαινόταν από 400 έως 1000. Κοντά στο πολυ-κρίσιμο σημείο M_{xy} χρειάστηκε αρκετά μεγαλύτερος αριθμός υλοποιήσεων. Για $p_z = 0.425$ εν προκειμένω πραγματοποιήθηκαν 7000 δείγματα για $L = 8$ έως 600 για $L = 24$. Στην $p_z = 0.45$ για $L = 8$ έγιναν 14000 μέχρι 2400 για $L = 20$.

Μετάβαση FG

Για τον προσδιορισμό της μετάβασης χρησιμοποιήθηκαν 8000, 3000 και 2000 υλοποιήσεις για πλέγματα μεγέθους $L \in \{10, 12, 16\}$ αντίστοιχα. Προσομοιώθηκαν αρκετές τιμές p_z κοντά στην τιμή του πολυκρίσιμου σημείου $p_z(M_{xy}) = 0.45$. Οι θερμοκρασίες για κάθε πιθανότητα ξεπερνούσαν την $T > 2.6$, ώστε η μέγιστη θερμοκρασία να είναι βαθιά στην παραμαγνητική φάση προς αποφυγή παγιδεύσεων και γρήγορης ισορρόπησης. Η ελάχιστη θερμοκρασία ήταν στις περισσότερες περιπτώσεις $T = 1.5$. Έγιναν επιλεγμένες δοκιμές με $T_{min} = 0.45$ για την καταγραφή των ιδιοτήτων της θεμελιώδους κατάστασης.

Υαλώδης φάση

Στην υαλώδη φάση $p_z = 0.475$ και $p_z = 0.5$ χρησιμοποιήθηκαν μικρότερα πλέγματα και περισσότερα δείγματα. Συγκεκριμένα στην $p_z = 0.475$ για $L = 6$ αθροίστηκαν 24000 υλοποιήσεις και έφτασαν στις 720 για $L = 24$. Στην $p_z = 0.5$ αντίστοιχα έγιναν 36000 για $L = 6$ και για το μεγαλύτερο πλέγμα $L = 16$ αθροίστηκαν 6000 υλοποιήσεις.

Για την δειγματοληψία της θεμελιώδους κατάστασης στην $p_z = 0.5$ ακολουθήθηκε το ίδιο σχήμα PT με το αντίστοιχο του εγκάρσια ανισοτροπικού § 4.3.4. Το πλήθος των υλοποιήσεων κυμάνθηκε από 15000 για $L = 6$ μέχρι 100 για $L = 20$.

4.4.5 Συμπεράσματα

Η μελέτη μας του κυβικού κατά μήκος ανισοτροπικού μοντέλου EA κατέληξε στα εξής βασικά συμπεράσματα:

- Παρατηρήθηκε ενίσχυση της σιδηρομαγνητικής φάσης. Η υαλώδης φάση συρρικνωθήκε και η γραμμή μετάβασης PG βρίσκεται σε μεγαλύτερες θερμοκρασίες σε σχέση με την αντίστοιχη του ισοτροπικού γεγονός που προκύπτει από τόσο από το πολυκρίσιμο σημείο $M_{xy} = \{p_z = 0.4509(5); T_{M_{xy}} = 2.42(3)\}$ όσο και το κρίσιμο συμμετρικό σημείο $B_{xy} = \{p_z = 0.5; T_{B_{xy}} = 1.77(8)\}$.
- Η κρισιμότητα της μετάβασης FP περιγράφεται από τους εκθέτες $\nu = 0.68(1); \gamma/\nu = 1.966(17)$ εντάσσοντάς τη στην κλάση οικουμενικότητας του τυχαίου προτύπου Ising στην οποία ανήκει και το ισοτροπικό πρότυπο EA. Η μετάβαση PG επίσης ανήκει στην αντίστοιχη του ισοτροπικού μοντέλου με $\nu = 2.38(28)$.
- Το κατα μήκος ανισοτροπικό πρότυπο στο συμμετρικό σημείο $p_z = 1/2$ διαφέρει ως προς την κρίσιμη θερμοκρασία ($T_{B_{xy}} = 1.77(8)$)

αλλά και την ενέργεια θεμελιώδους κατάστασης ($e_{GS} = -2.0533(8)$) από το εγκάρσια ανισοτροπικό και το ιστροπικό πρότυπο τα οποία φαίνεται να ταυτίζονται στο σημείο αυτό ($T_{B_z} = 1.11(1)$; $e_{GS} = -1.7876(3)$). Όπως τονίσαμε και νωρίτερα, η συμπεριφορά αυτή έγκειται στην διαφορά της σύγχυσης η οποία ενώ είναι ίδια στο ιστροπικό και εγκάρσιο πρότυπο με $f(1/2) = f_z(1/2) = 1/2$, στο κατα μήκος ανισοτροπικό ισούται με $f_{xy}(1/2) = 1/3$.

- Τέλος, παρατηρήθηκε πιθανή πρόσθια μετάβαση FG κάτι που δεν έχει παρατηρηθεί ξανά από δειγματοληψία MC, σε κυβικό υαλώδες πρότυπο EA . Η παρατήρησή μας αυτή δεν παραβιάζει την υπόθεση Nishimori κατά την οποία η FG δεν επιτρέπεται να είναι πρόσθια μετάβαση λόγω του ότι δεν ορίζεται η συμμετρία Nishimori στο κατα μήκος ανισοτροπικό μοντέλο.

4.5 Συνολικό διάγραμμα φάσης

Στο συνολικό διάγραμμα φάσης του σχήματος 4.28 παρουσιάζονται με τη συνεχή γραμμή IM, MB, MA το ιστροπικό μοντέλο EA [19, 43, 69], το εγκάρσια ανιστροπικό [142] με τη στικτή γραμμή $IM_z, M_z B_z, M_z A_z$ και το κατά μήκος ανιστροπικό [143] με την διακεκομμένη γραμμή $IM_{xy}, M_{xy} B_{xy}, M_{xy} A_{xy}$. Για λόγους ομοιομορφίας ο οριζόντιος άξονας p αντιστοιχεί στην πιθανότητα σιδηρομαγνητισμού p για το ιστροπικό, p_{xy} για το εγκάρσια ανιστροπικό και p_z για το κατά μήκος ανιστροπικό.

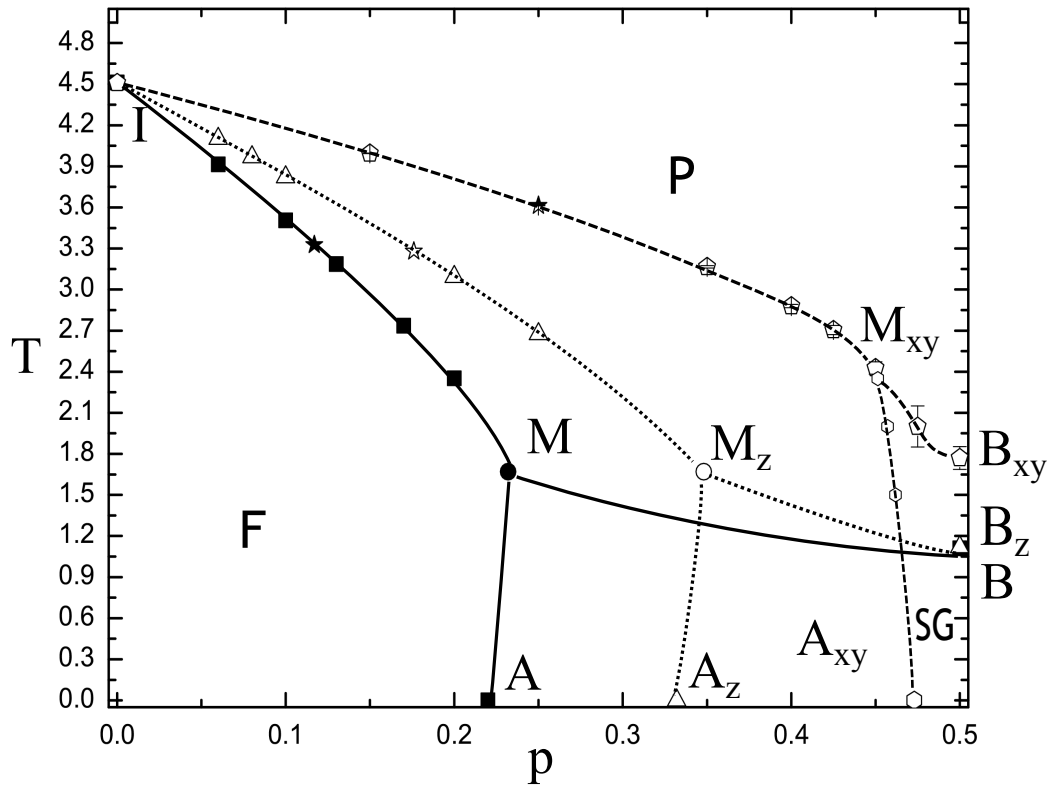
Τα τρία μοντέλα είναι συμμετρικά ως προς τον άξονα $p = 1/2$ και έτσι παραλείπεται το τμήμα για $p > 1/2$. Στα τρία μοντέλα υπάρχουν οι εξής τρεις μεταβάσεις φάσης, σιδηρομαγνητική παραμαγνητική FP , σιδηρομαγνητική - υαλώδης FG και υαλώδης - παραμαγνητική GP . Επίσης και στα τρία οι παραπάνω μεταβάσεις συναντώνται σε αντίστοιχα πολυ-κρίσιμα σημεία.

Ξεκινώντας από $p = 0$ τα τρία μοντέλα αντιστοιχούν στο απλό κυβικό πρότυπο Ising του οποίου η μετάβαση FP έχει μελετηθεί αναλυτικά με αναπτύγματα σειρών υψηλών θερμοκρασιών και η θερμοκρασία της με μεγάλη ακρίβεια έχει βρεθεί $T_c = 4.5115232(16)$ [22, 27, 31, 39, 56, 67, 148].

Τα σημεία της FP γραμμής του ιστροπικού είναι δοσμένα από την εργασία των Hasenbusch κ.ά. [69] κατά την οποία στο σημείο $p^* = 0.117(3); T = 3.32656(20)$, το οποίο συμβολίζεται με πλήρες άστρο, οι διορθώσεις κλιμάκωσης είναι ελάχιστες. Το πολυ-κρίσιμο σημείο M $p = 0.23180(4); T = 1.6692(3)$ έχει προσδιοριστεί στην εργασία [66]. Το σημείο $p = 0.222(5); T = 0$ στη μετάβαση FG της θεμελιώδους κατάστασης έχει προσδιοριστεί από τον Hartmann [62]. Αναμφισβήτητα η πιο μελετημένη μετάβαση του μοντέλου EA είναι η υαλώδης-παραμαγνητική GP και ειδικά το συμμετρικό σημείο $p = \frac{1}{2}$ [4, 14, 16, 17, 29, 30, 82, 87, 116–118, 126, 135, 136, 141, 150, 163] Για το σημείο B χρησιμοποιήθηκε η πιο πρόσφατη εκτίμηση $T_C = 1.109(10)$ [68].

Στο εγκάρσια ανιστροπικό το πολυ-κρίσιμο σημείο M_z , $p = 0.3477(4)$, $T_{M_z} = 1.6692(3)$ εκτιμήθηκε προσεγγιστικά και αντιστοιχεί στο σημείο του ιστροπικού M θέτοντας $p_{xy}(M_{xy}) = \frac{3}{2}p(M)$.

Κατά προσέγγιση το πολυ-κρίσιμο σημείο του κατά μήκος ανιστροπικού M_{xy} βρίσκεται στο σημείο $p = 0.4509(5)$, $T_{M_{xy}} = 2.42(3)$. Στο συμμετρικό σημείο η κρίσιμη θερμοκρασία της GP μετάβασης είναι $T_{B_{xy}} = 1.68(12)$, ενώ η κρίσιμη πυκνότητα της FG υπολογίστηκε κοντά στην τιμή $p_{A_{xy}} = 0.47(14)$. Συμπληρωματικά για την FG βρέθηκαν εν-



Σχήμα 4.28: Συνολικό διάγραμμα φάσης. Οι γραμμές μετάβασης διαχωρίζουν τη σιδηρομαγνητική F , παραμαγνητική P , και υαλώδη φάση SG . Η συνεχής γραμμή αντιστοιχεί στο ιστροπικό μοντέλο, η στικτή με δείκτη z στο εγκάρσια ανισοτροπικό, και η διακεκομμένη με δείκτη xy στο κατά μήκος ανισοτροπικό μοντέλο EA . Τα σημεία αντιστοιχούν σε βιβλιογραφικά ευρήματα, λεπτομέρειες των οποίων βρίσκονται στο κείμενο, ενώ οι γραμμές υπάρχουν για την διευκόλυνση του αναγνώστη. Τα σφάλματα όπου δεν είναι ορατά είναι μικρότερα από το ύψος των αντίστοιχων συμβόλων.

δείξεις για πιθανή πρόσθια κλίση, συμπεριφορά αντίθετη από την αντίστοιχη των υπολοίπων προτύπων EA .

4.6 Συμπεράσματα

Συνοψίζονται τα αποτελέσματα της έρευνάς μας στις υάλους σπιν μικρής εμβέλειας.

Καταρχάς, παρατηρείται ότι η εισαγωγή ανισοτροπίας στην τυχαιότητα δεσμών δεν άλλαξε την κλάση οικουμενικότητας της μετάβασης FP . Έτσι, το ιστροπικό, το εγκάρσια ανισοτροπικό και το κατα μήκος ανισοτροπικό ανήκουν στην κλάση οικουμενικότητας του τυχαίου προτύπου Ising. Επίσης στη μετάβαση φάσης PG , τα δύο ανισοτροπικά πρότυπα παραμένουν στην οικουμενικότητα του ιστροπικού.

Όσον αφορά το διάγραμμα φάσης, και στα δύο ανισοτροπικά πρότυπα υπήρξε ενίσχυση της σιδηρομαγνητικής φάσης ενώ η υαλώδης τους φάση συρρικνώθηκε. Στο εγκάρσια ανισοτροπικό πρότυπο η κλίση της μετάβασης FP για μικρές τιμές του p_{xy} έχει λόγο περίπου $2/3$ του ιστροπικού. Στην περιοχή αυτή σημειώνεται ότι ταυτίζονται τόσο ο λόγος σιδηρομαγνητικών προς αντισιδηρομαγνητικών αλληλεπιδράσεων, όσο και η σύγχυση των δύο προτύπων για $p_{xy} = \frac{3}{2}p$. Το κατα μήκος ανισοτροπικό πρότυπο παρουσιάζει ενδεχόμενη πρόσθια μετάβαση FP χωρίς παραβίαση της υπόθεσης Nishimori περί τη μετάβαση FP .

Στο συμμετρικό σημείο, δηλαδή για $p = p_{xy} = 1/2$, το ιστροπικό και το εγκάρσια ανισοτροπικό πρότυπο είχαν σχεδόν πανομοιότυπη μακροσκοπική συμπεριφορά, αφού τόσο η κρίσιμη θερμοκρασία τους όσο και η ενέργεια θεμελιώδους κατάστασης τους συνέπιπταν. Το γεγονός αυτό, σε συνδυασμό με το ότι το κατά μήκος ανισοτροπικό διαφέρει ως προς τα άλλα πρότυπα στο συμμετρικό σημείο, έγκειται στη σύγχυση των προτύπων στο σημείο αυτό. Στο εγκάρσια ανισοτροπικό και το ιστροπικό πρότυπο, η σύγχυσή τους ταυτίζεται με μέτρο $f(1/2) = f_z(1/2) = 1/2$, ενώ η αντίστοιχη τιμή της σύγχυσης για το κατα μήκος ανισοτροπικό είναι $f_{xy}(1/2) = 1/3$.

Βιβλιογραφία

- [1] Amnon Aharony and Michael E. Fisher. Nonlinear scaling fields and corrections to scaling near criticality. *Phys. Rev. B*, 27:4394–4400, Apr 1983.
- [2] Amnon Aharony and A. Brooks Harris. Absence of self-averaging and universal fluctuations in random systems near critical points. *Phys. Rev. Lett.*, 77:3700–3703, Oct 1996.
- [3] Michael Aizenman and Jan Wehr. Rounding of first-order phase transitions in systems with quenched disorder. *Phys. Rev. Lett.*, 62:2503–2506, May 1989.
- [4] H. G. Ballesteros, A. Cruz, L. A. Fernández, V. Martín-Mayor, J. Pech, J. J. Ruiz-Lorenzo, A. Tarancón, P. Téllez, C. L. Ullod, and C. Ungil. Critical behavior of the three-dimensional Ising spin glass. *Phys. Rev. B*, 62:14237–14245, December 2000.
- [5] H. G. Ballesteros, L. A. Fernández, V. Martín-Mayor, A. Muñoz Sudupe, G. Parisi, and J. J. Ruiz-Lorenzo. Critical exponents of the three-dimensional diluted Ising model. *Phys. Rev. B*, 58:2740–2747, Aug 1998.
- [6] H. G. Ballesteros, L. A. Fernández, V. Martín-Mayor, A. Muñoz Sudupe, G. Parisi, and J. J. Ruiz-Lorenzo. Critical behavior in the site-diluted three-dimensional three-state potts model. *Phys. Rev. B*, 61:3215–3218, Feb 2000.
- [7] R Alvarez Baños, A Cruz, L A Fernandez, J M Gil-Narvion, A Gordillo-Guerrero, M Guidetti, A Maiorano, F Mantovani, E Marinari, V Martin-Mayor, J Monforte-Garcia, A Muñoz Sudupe, D Navarro, G Parisi, S Perez-Gaviro, J J Ruiz-Lorenzo, S F Schifano, B Seoane, A Tarancon, R Tripiccione, and D Yllanes. Nature of the spin-glass phase at experimental length scales. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2010(06):P06026, 2010.

- [8] F Barahona. On the computational complexity of Ising spin glass models. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 15(10):3241, 1982.
- [9] R.J. Baxter. *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*. Dover Publications, 2007.
- [10] Paul D. Beale. Finite-size scaling study of the two-dimensional blume-capel model. *Phys. Rev. B*, 33:1717–1720, Feb 1986.
- [11] Paul D. Beale. Exact distribution of energies in the two-dimensional ising model. *Phys. Rev. Lett.*, 76:78–81, Jan 1996.
- [12] R. E. Belardinelli and V. D. Pereyra. Fast algorithm to calculate density of states. *Phys. Rev. E*, 75:046701, Apr 2007.
- [13] P. E. Berche, C. Chatelain, B. Berche, and W. Janke. Bond dilution in the 3D Ising model: a Monte Carlo study. *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*, 38:463–474, 2004. 10.1140/epjb/e2004-00141-x.
- [14] Bernd A. Berg and Wolfhard Janke. Multioverlap Simulations of the 3D Edwards-Anderson Ising Spin Glass. *Phys. Rev. Lett.*, 80:4771–4774, May 1998.
- [15] A. Nihat Berker. Harris criterion for direct and orthogonal quenched randomness. *Phys. Rev. B*, 42:8640–8642, Nov 1990.
- [16] L. W. Bernardi, S. Prakash, and I. A. Campbell. Ordering Temperatures and Critical Exponents in Ising Spin Glasses. *Phys. Rev. Lett.*, 77:2798–2801, Sep 1996.
- [17] R. N. Bhatt and A. P. Young. Search for a transition in the three-dimensional J Ising spin-glass. *Phys. Rev. Lett.*, 54:924–927, Mar 1985.
- [18] K. Binder. Finite size scaling analysis of ising model block distribution functions. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 43(2):119–140, 1981.
- [19] K. Binder and A. P. Young. Spin glasses: Experimental facts, theoretical concepts, and open questions. *Rev. Mod. Phys.*, 58:801–976, Oct 1986.

- [20] Kurt Binder and Walter Kob. *Glassy Materials and Disordered Solids: An Introduction to Their Statistical Mechanics (Revised Edition)*. WORLD SCIENTIFIC, January 2011.
- [21] Elmar Bittner, Andreas Nußbaumer, and Wolfhard Janke. Make life simple: Unleash the full power of the parallel tempering algorithm. *Phys. Rev. Lett.*, 101:130603, Sep 2008.
- [22] H W J Blote, E Luijten, and J R Heringa. Ising universality in three dimensions: a Monte Carlo study. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 28(22):6289, 1995.
- [23] M. Blume. Theory of the first-order magnetic phase change in UO_2 . *Phys. Rev.*, 141:517–524, Jan 1966.
- [24] Stefan Boettcher and Allon G. Percus. Optimization with extremal dynamics. *Phys. Rev. Lett.*, 86:5211–5214, Jun 2001.
- [25] A.B. Bortz, M.H. Kalos, and J.L. Lebowitz. A new algorithm for monte carlo simulation of ising spin systems. *Journal of Computational Physics*, 17(1):10 – 18, 1975.
- [26] Paul Brenner, Christopher R. Sweet, Dustin VonHandorf, and Jesus A. Izaguirre. Accelerating the replica exchange method through an efficient all-pairs exchange. *The Journal of Chemical Physics*, 126(7):074103, 2007.
- [27] P. Butera and M. Comi. Critical universality and hyperscaling revisited for ising models of general spin using extended high-temperature series. *Phys. Rev. B*, 65:144431, Apr 2002.
- [28] F. Calvo. All-exchanges parallel tempering. *The Journal of Chemical Physics*, 123(12):124106, 2005.
- [29] I. A. Campbell, K. Hukushima, and H. Takayama. Extended Scaling Scheme for Critically Divergent Quantities in Ferromagnets and Spin Glasses. *Physical Review Letters*, 97(11):117202, September 2006.
- [30] I. A. Campbell, K. Hukushima, and H. Takayama. Extended scaling for ferromagnets. *Phys. Rev. B*, 76(13):134421, October 2007.
- [31] Massimo Campostrini, Andrea Pelissetto, Paolo Rossi, and Ettore Vicari. 25th-order high-temperature expansion results for three-dimensional Ising-like systems on the simple-cubic lattice. *Phys. Rev. E*, 65:066127, Jun 2002.

- [32] H. W. Capel. On the possibility of first-order phase transitions in ising systems of triplet ions with zero-field splitting. *Physica*, 32(5):966–988, 5 1966.
- [33] C M Care. Microcanonical monte carlo study of a two-dimensional blume-capel model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 26(7):1481, 1993.
- [34] G. Ceccarelli, A. Pelissetto, and E. Vicari. Ferromagnetic-glassy transitions in three-dimensional Ising spin glasses. *Phys. Rev. B*, 84(13):134202, October 2011.
- [35] Christophe Chatelain, Bertrand Berche, Wolfhard Janke, and Pierre Emmanuel Berche. Softening of first-order transition in three-dimensions by quenched disorder. *Phys. Rev. E*, 64:036120, Aug 2001.
- [36] A. Codello. Exact Curie temperature for the Ising model on Archimedean and Laves lattices. *Journal of Physics A Mathematical General*, 43:L5002+, September 2010.
- [37] Thomas H. Cormen, Clifford Stein, Ronald L. Rivest, and Charles E. Leiserson. *Introduction to Algorithms*. McGraw-Hill Higher Education, 2001.
- [38] Jesper Dall and Paolo Sibani. Faster monte carlo simulations at low temperatures. the waiting time method. *Computer Physics Communications*, 141(2):260–267, 11 2001.
- [39] Youjin Deng and Henk W. J. Blöte. Simultaneous analysis of several models in the three-dimensional Ising universality class. *Phys. Rev. E*, 68:036125, Sep 2003.
- [40] Youjin Deng and Henk W. J. Blöte. Constrained tricritical Blume-Capel model in three dimensions. *Phys. Rev. E*, 70(4):046111, Oct 2004.
- [41] Markus Deserno. Tricriticality and the Blume-Capel model: A Monte Carlo study within the microcanonical ensemble. *Phys. Rev. E*, 56(5):5204–5210, Nov 1997.
- [42] David J. Earl and Michael W. Deem. Parallel tempering: Theory, applications, and new perspectives. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 7:3910–3916, 2005.

- [43] S F Edwards and P W Anderson. Theory of spin glasses. *Journal of Physics F: Metal Physics*, 5(5):965, 1975.
- [44] J W Essam. Percolation theory. *Reports on Progress in Physics*, 43(7):833, 1980.
- [45] Alexis Falicov and A. Nihat Berker. Tricritical and critical end-point phenomena under random bonds. *Phys. Rev. Lett.*, 76:4380–4383, Jun 1996.
- [46] Arthur E. Ferdinand and Michael E. Fisher. Bounded and inhomogeneous ising models. i. specific-heat anomaly of a finite lattice. *Phys. Rev.*, 185:832–846, Sep 1969.
- [47] Alan M. Ferrenberg and D. P. Landau. Critical behavior of the three-dimensional Ising model: A high-resolution Monte Carlo study. *Phys. Rev. B*, 44:5081–5091, Sep 1991.
- [48] Carlos E. Fiore. Comparing different protocols of temperature selection in the parallel tempering method. *The Journal of Chemical Physics*, 135(11):114107, 2011.
- [49] Michael E. Fisher. Quantum corrections to critical-point behavior. *Phys. Rev. Lett.*, 16:11–14, Jan 1966.
- [50] P F Fox and A J Guttmann. Low temperature critical behaviour of the ising model with spin $s > 1/2$. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 6(5):913, 1973.
- [51] N G Fytas, A Malakis, and K Eftaxias. First-order transition features of the 3d bimodal random-field ising model. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2008(03):P03015, 2008.
- [52] N G Fytas, A Malakis, and I A Hadjiagapiou. Quenched bond randomness in marginal and non-marginal ising spin models in 2d. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2008(11):P11009, 2008.
- [53] Nikolaos G. Fytas and Panagiotis E. Theodorakis. Universality in disordered systems: The case of the three-dimensional random-bond ising model. *Phys. Rev. E*, 82:062101, Dec 2010.
- [54] Rafael L. Greenblatt, Michael Aizenman, and Joel L. Lebowitz. Rounding of first order transitions in low-dimensional quantum

- systems with quenched disorder. *Phys. Rev. Lett.*, 103:197201, Nov 2009.
- [55] Robert B. Griffiths. Dependence of critical indices on a parameter. *Phys. Rev. Lett.*, 24:1479–1482, Jun 1970.
- [56] R Guida and J Zinn-Justin. Critical exponents of the N -vector model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 31(40):8103, 1998.
- [57] K. Gunnarsson, P. Svedlindh, P. Nordblad, L. Lundgren, H. Aruga, and A. Ito. Static scaling in a short-range Ising spin glass. *Phys. Rev. B*, 43:8199–8203, Apr 1991.
- [58] Can Güven, A. Nihat Berker, Michael Hinczewski, and Hidetoshi Nishimori. Reentrant and forward phase diagrams of the anisotropic three-dimensional Ising spin glass. *Phys. Rev. E*, 77(6):061110, Jun 2008.
- [59] Ulrich H. E. Hansmann. Parallel tempering algorithm for conformational studies of biological molecules. *Chemical Physics Letters*, 281(1–3):140–150, 12 1997.
- [60] A B Harris. Effect of random defects on the critical behaviour of ising models. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 7(9):1671, 1974.
- [61] A. K. Hartmann. Evidence for nontrivial ground-state structure of $3d \pm j$ spin glasses. *EPL (Europhysics Letters)*, 40(4):429, 1997.
- [62] Alexander K. Hartmann. Ground-state behavior of the three-dimensional $\pm J$ random-bond Ising model. *Phys. Rev. B*, 59(5):3617–3623, Feb 1999.
- [63] Alexander K. Hartmann and Heiko Rieger. *Optimization Algorithms in Physics*. Wiley-VCH, 1 edition.
- [64] Alexander K. Hartmann and Heiko Rieger. *New Optimization Algorithms in Physics*. John Wiley & Sons, 2004.
- [65] M. Hasenbusch, F. Parisen Toldin, A. Pelissetto, and E. Vicari. The universality class of 3D site-diluted and bond-diluted Ising systems. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2:16, February 2007.

- [66] M. Hasenbusch, F. P. Toldin, A. Pelissetto, and E. Vicari. Magnetic-glassy multicritical behavior of the three-dimensional $\pm J$ Ising model. *Phys. Rev. B*, 76(18):184202, November 2007.
- [67] Martin Hasenbusch. Finite size scaling study of lattice models in the three-dimensional Ising universality class. *Phys. Rev. B*, 82:174433, Nov 2010.
- [68] Martin Hasenbusch, Andrea Pelissetto, and Ettore Vicari. The critical behavior of three-dimensional Ising spin glass models. *Physical Review B*, 78:214205, 2008.
- [69] Martin Hasenbusch, Francesco Parisen Toldin, Andrea Pelissetto, and Ettore Vicari. Critical behavior of the three-dimensional $\pm J$ Ising model at the paramagnetic-ferromagnetic transition line. *Phys. Rev. B*, 76:094402, Sep 2007.
- [70] Michael Hinczewski and A. Nihat Berker. Multicritical point relations in three dual pairs of hierarchical-lattice ising spin glasses. *Phys. Rev. B*, 72:144402, Oct 2005.
- [71] Kenneth Hui and A. Nihat Berker. Random-field mechanism in random-bond multicritical systems. *Phys. Rev. Lett.*, 62:2507–2510, May 1989.
- [72] K. Hukushima and K. Nemoto. Exchange Monte Carlo Method and Application to Spin Glass Simulations. *Journal of the Physical Society of Japan*, 65:1604, June 1996.
- [73] Koji Hukushima. Random Fixed Point of Three-Dimensional Random-Bond Ising Models. *Journal of the Physical Society of Japan*, 69(3):631–634, 2000.
- [74] Koji Hukushima, Hajime Takayama, and Hajime Yoshino. Exchange monte carlo dynamics in the sk model. *Journal of the Physical Society of Japan*, 67(1):12–15, 1998.
- [75] A. Ito, H. Aruga, E. Torikai, M. Kikuchi, Y. Syono, and H. Takei. Time-Dependent Phenomena in a Short-Range Ising Spin-Glass, Fe_{0.5}Mn_{0.5}TiO₃. *Phys. Rev. Lett.*, 57:483–486, Jul 1986.
- [76] N. Sh. Izmailian and Chin-Kun Hu. Exact amplitude ratio and finite-size corrections for the $m \times n$ square lattice ising model. *Phys. Rev. E*, 65:036103, Feb 2002.

- [77] A. K. Jain and D. P. Landau. Monte carlo study of the fcc blume-capel model. *Phys. Rev. B*, 22:445–452, Jul 1980.
- [78] Thomas Jörg. Critical behavior of the three-dimensional bond-diluted Ising spin glass: Finite-size scaling functions and universality. *Phys. Rev. B*, 73:224431, Jun 2006.
- [79] G Kamieniarz and H W J Blote. Universal ratio of magnetization moments in two-dimensional ising models. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 26(2):201, 1993.
- [80] C. Nadir Kaplan and A. Nihat Berker. Quantum-mechanically induced asymmetry in the phase diagrams of spin-glass systems. *Phys. Rev. Lett.*, 100:027204, Jan 2008.
- [81] H. G. Katzgraber. Introduction to Monte Carlo Methods. *ArXiv e-prints*, May 2009.
- [82] Helmut G. Katzgraber, Mathias Körner, and A. P. Young. Universality in three-dimensional Ising spin glasses: A Monte Carlo study. *Phys. Rev. B*, 73:224432, Jun 2006.
- [83] Helmut G. Katzgraber, Matteo Palassini, and A. P. Young. Monte carlo simulations of spin glasses at low temperatures. *Phys. Rev. B*, 63:184422, Apr 2001.
- [84] Helmut G Katzgraber, Simon Trebst, David A Huse, and Matthias Troyer. Feedback-optimized parallel tempering monte carlo. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2006(03):P03018, 2006.
- [85] Bruria Kaufman. Crystal statistics. ii. partition function evaluated by spinor analysis. *Phys. Rev.*, 76:1232–1243, Oct 1949.
- [86] N. Kawashima and H. Rieger. Recent Progress in Spin Glasses. *eprint arXiv:cond-mat/0312432*, December 2003.
- [87] N. Kawashima and A. P. Young. Phase transition in the three-dimensional $\pm J$ Ising spin glass. *Phys. Rev. B*, 53:R484–R487, Jan 1996.
- [88] R. Kenna, D. A. Johnston, and W. Janke. Self-consistent scaling theory for logarithmic-correction exponents. *Phys. Rev. Lett.*, 97:155702, Oct 2006.

- [89] Jae-Kwon Kim. Weak universality in the two-dimensional randomly disordered three-state potts ferromagnet. *Phys. Rev. B*, 53:3388–3391, Feb 1996.
- [90] Jae-Kwon Kim and Adrian Patrascioiu. Critical behavior of the specific heat in the two dimensional site diluted ising system. *Phys. Rev. Lett.*, 72:2785–2788, Apr 1994.
- [91] David A. Kofke. On the acceptance probability of replica-exchange monte carlo trials. *The Journal of Chemical Physics*, 117(15):6911–6914, 2002.
- [92] Aminata Kone and David A. Kofke. Selection of temperature intervals for parallel-tempering simulations. *The Journal of Chemical Physics*, 122(20):206101, 2005.
- [93] M. J. Krawczyk, K. Malarz, B. Kawecka-Magiera, A. Z. Maksymowicz, and K. Kułakowski. Spin-glass properties of an ising antiferromagnet on the archimedean $(3, 12^2)$ lattice. *Phys. Rev. B*, 72:024445, Jul 2005.
- [94] D. P. Landau. Magnetic tricritical points in ising antiferromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, 28:449–452, Feb 1972.
- [95] D. P. Landau and R. H. Swendsen. Tricritical universality in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 46:1437–1440, Jun 1981.
- [96] David Landau and Kurt Binder. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge University Press, New York, NY, USA, 2005.
- [97] Pierre Le Doussal and A. Brooks Harris. Location of the Ising Spin-Glass Multicritical Point on Nishimori’s Line. *Phys. Rev. Lett.*, 61:625–628, Aug 1988.
- [98] Pierre Le Doussal and A. Brooks Harris. ϵ expansion for the Nishimori multicritical point of spin glasses. *Phys. Rev. B*, 40:9249–9252, Nov 1989.
- [99] J. C. Le Guillou and J. Zinn-Justin. Critical exponents from field theory. *Phys. Rev. B*, 21:3976–3998, May 1980.
- [100] Jooyoung Lee. New monte carlo algorithm: Entropic sampling. *Phys. Rev. Lett.*, 71:211–214, Jul 1993.

- [101] F. W. S. LIMA and K. MALARZ. Majority-vote model on (3, 4, 6, 4) and (34, 6) archimedean lattices. *International Journal of Modern Physics C*, 17(09):1273–1283, 2015/07/06 2006.
- [102] F. W. S. Lima, J. Mostowicz, and K. Malarz. Critical behaviour of the ising $s=1/2$ and $s=1$ model on (3,4,6,4) and (3,3,3,3,6) archimedean lattices. *Communications in Computational Physics*, 10:912–919, 10 2011.
- [103] Jon Machta. Strengths and Weaknesses of Parallel Tempering. Aug 2009.
- [104] N. D. Mackenzie and A. P. Young. Lack of ergodicity in the infinite-range ising spin-glass. *Phys. Rev. Lett.*, 49:301–304, Aug 1982.
- [105] A. Malakis, A. N. Berker, I. A. Hadjiagapiou, and N. G. Fytas. Strong violation of critical phenomena universality: Wang-Landau study of the two-dimensional Blume-Capel model under bond randomness. *Phys. Rev. E*, 79(1):011125–+, January 2009.
- [106] A. Malakis, A. N. Berker, I. A. Hadjiagapiou, N. G. Fytas, and T. Papakonstantinou. Multicritical points and crossover mediating the strong violation of universality: Wang-Landau determinations in the random-bond $d=2$ Blume-Capel model. *Phys. Rev. E*, 81(4):041113, April 2010.
- [107] A. Malakis, A. Nihat Berker, N. G. Fytas, and T. Papakonstantinou. Universality aspects of the $d = 3$ random-bond blume-capel model. *Phys. Rev. E*, 85:061106, Jun 2012.
- [108] A. Malakis, A. Nihat Berker, I.A. Hadjiagapiou, N.G. Fytas, and T. Papakonstantinou. Uncovering the secrets of the 2d random-bond blume–capel model. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 389(15):2930 – 2933, 2010. Statistical, Fluid and Biological Physics Problems An {MIT} Symposium and Articles dedicated to A. Nihat Berker on his 60th Birthday.
- [109] A. Malakis, G. Gulpinar, Y. Karaaslan, T. Papakonstantinou, and G. Aslan. Universality of the ising and the $s = 1$ model on archimedean lattices: A monte carlo determination. *Phys. Rev. E*, 85:031146, Mar 2012.
- [110] A. Malakis, S. S. Martinos, I. A. Hadjiagapiou, N. G. Fytas, and P. Kalozoumis. Entropic sampling via wang-landau random walks in dominant energy subspaces. *Phys. Rev. E*, 72:066120, Dec 2005.

- [111] A. Malakis, S. S. Martinos, I. A. Hadjiagapiou, and A. S. Peratzakis. On the wang-landau method using the n-fold way. *International Journal of Modern Physics C*, 15(05):729–740, 2004.
- [112] A. Malakis and T. Papakonstantinou. Comparative study of selected parallel tempering methods. *Phys. Rev. E*, 88:013312, Jul 2013.
- [113] A. Malakis, A. Peratzakis, and N. G. Fytas. Estimation of critical behavior from the density of states in classical statistical models. *Phys. Rev. E*, 70:066128, Dec 2004.
- [114] Anastasios Malakis and Nikolaos G. Fytas. Lack of self-averaging of the specific heat in the three-dimensional random-field ising model. *Phys. Rev. E*, 73:016109, Jan 2006.
- [115] K. Malarz, M. Zborek, and B. Wrobel. Curie temperature for an Ising model on Archimedean lattices. *eprint arXiv:cond-mat/0506436*, June 2005.
- [116] P. O. Mari and I. A. Campbell. Ising spin glasses: Corrections to finite size scaling, freezing temperatures, and critical exponents. *Phys. Rev. E*, 59:2653–2658, Mar 1999.
- [117] P. O. Mari and I. A. Campbell. Ising Spin Glasses : interaction distribution dependence of the critical exponents. *eprint arXiv:cond-mat/0111174*, November 2001.
- [118] P. O. Mari and I. A. Campbell. Ordering temperature and critical exponents of the binomial Ising spin glass in dimension 3. *Phys. Rev. B*, 65:184409, Apr 2002.
- [119] E. Marinari. Optimized Monte Carlo Methods. *eprint arXiv:cond-mat/9612010*, November 1996.
- [120] E. Marinari, G. Parisi, and J. J. Ruiz-Lorenzo. Numerical Simulations of Spin Glass Systems. *Spin Glasses And Random Fields. Series: Series on Directions in Condensed Matter Physics, ISBN: <ISBN>978-981-02-3183-5</ISBN>. WORLD SCIENTIFIC, Edited by A P Young, vol. 12, pp. 59-98, 12:59–98, December 1997.*
- [121] William David McComb. *Renormalization Methods: A Guide For Beginners*. Oxford University Press, 2004.

- [122] Nicholas Metropolis, Arianna W. Rosenbluth, Marshall N. Rosenbluth, Augusta H. Teller, and Edward Teller. Equation of state calculations by fast computing machines. *The Journal of Chemical Physics*, 21(6):1087–1092, 1953.
- [123] M. Mezard, Giorgio Parisi, and M. Virasoro. *Spin Glass Theory and Beyond (World Scientific Lecture Notes in Physics, Vol 9)*. World Scientific Publishing Company.
- [124] Gabriele Migliorini and A. Nihat Berker. Global random-field spin-glass phase diagrams in two and three dimensions. *Phys. Rev. B*, 57:426–431, Jan 1998.
- [125] Sunil Nair and A. K. Nigam. Critical exponents and the correlation length in the manganite spin glass $\text{Eu}_{0.5}\text{Ba}_{0.5}\text{MnO}_3$. *Phys. Rev. B*, 75:214415, Jun 2007.
- [126] Tota Nakamura, Shin-ichi Endoh, and Takeo Yamamoto. Weak universality of spin-glass transitions in three-dimensional $\pm J$ models. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 36(43):10895, 2003.
- [127] J. P. Neirotti, F. Calvo, David L. Freeman, and J. D. Doll. Phase changes in 38-atom lennard-jones clusters. i. a parallel tempering study in the canonical ensemble. *The Journal of Chemical Physics*, 112(23):10340–10349, 2000.
- [128] M. E. J. Newman and G. T. Barkema. *Monte Carlo methods in statistical physics*. Clarendon Press ; Oxford University Press, April 1999.
- [129] Peter Nightingale. Finite-size scaling and phenomenological renormalization (invited). *Journal of Applied Physics*, 53(11):7927–7932, 1982.
- [130] A. Nihat Berker. Critical behavior induced by quenched disorder. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 194(1–4):72–76, 3 1993.
- [131] H Nishimori. Exact results and critical properties of the Ising model with competing interactions. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 13(21):4071, 1980.
- [132] Hidetoshi Nishimori. Internal Energy, Specific Heat and Correlation Function of the Bond-Random Ising Model. *Progress of Theoretical Physics*, 66(4):1169–1181, 1981.

- [133] Hidetoshi Nishimori. Geometry-induced phase transition in the $\pm j$ Ising model. *Journal of the Physical Society of Japan*, 55(10):3305–3307, 1986.
- [134] Hidetoshi Nishimori. *Statistical Physics of Spin Glasses and Information Processing: An Introduction (International Series of Monographs on Physics)*. Oxford University Press, USA, September 2001.
- [135] Andrew T. Ogielski. Dynamics of three-dimensional Ising spin glasses in thermal equilibrium. *Phys. Rev. B*, 32:7384–7398, Dec 1985.
- [136] Andrew T. Ogielski and Ingo Morgenstern. Critical behavior of three-dimensional Ising spin-glass model. *Phys. Rev. Lett.*, 54:928–931, Mar 1985.
- [137] Lars Onsager. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, 65:117–149, Feb 1944.
- [138] Yukiyasu Ozeki and Nobuyasu Ito. Multicritical dynamics for the $\pm j$ Ising model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 31(24):5451, 1998.
- [139] Yukiyasu Ozeki and Hidetoshi Nishimori. Phase Diagram of the $\pm J$ Ising Model in Two Dimensions. *Journal of the Physical Society of Japan*, 56(9):3265–3269, 1987.
- [140] Károly F. Pál. The ground state energy of the Edwards-Anderson Ising spin glass with a hybrid genetic algorithm. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 223(3–4):283 – 292, 1996.
- [141] M. Palassini and S. Caracciolo. Universal Finite-Size Scaling Functions in the 3D Ising Spin Glass. *Physical Review Letters*, 82:5128–5131, June 1999.
- [142] T. Papakonstantinou and A. Malakis. Critical behavior of the three-dimensional Ising model with anisotropic bond randomness at the ferromagnetic-paramagnetic transition line. *Phys. Rev. E*, 87(1):012132, January 2013.
- [143] Thodoris Papakonstantinou, Nikolaos G. Fytas, Anastasios Malakis, and Ioannis Lelidis. Critical aspects of three-dimensional anisotropic spin-glass models. *The European Physical Journal B*, 88(4), 2015.

- [144] G. Parisi. Toward a mean field theory for spin glasses. *Physics Letters A*, 73(3):203–205, 9 1979.
- [145] G. Parisi. The physical Meaning of Replica Symmetry Breaking. *eprint arXiv:cond-mat/0205387*, May 2002.
- [146] R. Parviainen. PhD thesis, Uppsala University, Sweden, 2004.
- [147] Andrea Pelissetto and Ettore Vicari. Randomly dilute spin models: A six-loop field-theoretic study. *Phys. Rev. B*, 62:6393–6409, Sep 2000.
- [148] Andrea Pelissetto and Ettore Vicari. Critical phenomena and renormalization-group theory. *Physics Reports*, 368(6):549 – 727, 2002.
- [149] Pines, David and Santa Fe institute. *Emerging syntheses in science : proceedings of the founding workshops of the Santa Fe Institute, Santa Fe, New Mexico*, volume 1 of *Sante Fe Institute studies in the sciences of complexity*, Redwood City, Calif., 1988. Addison-Wesley.
- [150] Michel Pleimling and I. A. Campbell. Dynamic critical behavior in Ising spin glasses. *Phys. Rev. B*, 72:184429, Nov 2005.
- [151] Cristian Predescu, Mihaela Predescu, and Cristian V. Ciobanu. The incomplete beta function law for parallel tempering sampling of classical canonical systems. *The Journal of Chemical Physics*, 120(9):4119–4128, 2004.
- [152] Cristian Predescu, Mihaela Predescu, and Cristian V. Ciobanu. On the efficiency of exchange in parallel tempering monte carlo simulations. *The Journal of Physical Chemistry B*, 109(9):4189–4196, 2005. PMID: 16851481.
- [153] F. Romá, S. Risau-Gusman, A.J. Ramirez-Pastor, F. Nieto, and E.E. Vogel. The ground state energy of the Edwards-Anderson spin glass model with a parallel tempering Monte Carlo algorithm. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 388(14):2821–2838, 2009.
- [154] Dubravko Sabo, Markus Meuwly, David L. Freeman, and J. D. Doll. A constant entropy increase model for the selection of parallel tempering ensembles. *The Journal of Chemical Physics*, 128(17):174109, 2008.

- [155] Jesús Salas. Exact finite-size-scaling corrections to the critical two-dimensional ising model on a torus. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 34(7):1311, 2001.
- [156] Jesús Salas and Alan D. Sokal. Universal amplitude ratios in the critical two-dimensional ising model on a torus. 98(3-4):551–588, 2000.
- [157] Ben Jesko Schulz, Kurt Binder, and Marcus Müller. Flat histogram method of wang–landau and n-fold way. *International Journal of Modern Physics C*, 13(04):477–494, 2002.
- [158] W. Selke and L. N. Shchur. LETTER TO THE EDITOR: Critical Binder cumulant in two-dimensional anisotropic Ising models. *Journal of Physics A Mathematical General*, 38:L739–L744, November 2005.
- [159] Lev N. Shchur and Wolfhard Janke. Critical amplitude ratios of the baxter–wu model. *Nuclear Physics B*, 840(3):491–512, 12 2010.
- [160] David Sherrington and Scott Kirkpatrick. Solvable model of a spin-glass. *Phys. Rev. Lett.*, 35:1792–1796, Dec 1975.
- [161] C. J. Silva, A. A. Caparica, and J. A. Plascak. Wang-landau monte carlo simulation of the blume-capel model. *Phys. Rev. E*, 73:036702, Mar 2006.
- [162] Rajiv R. P. Singh. Spin-glass-ferromagnetic-paramagnetic multicritical point. *Phys. Rev. Lett.*, 67:899–902, Aug 1991.
- [163] Rajiv R. P. Singh and Sudip Chakravarty. Critical Behavior of an Ising Spin-Glass. *Phys. Rev. Lett.*, 57:245–248, Jul 1986.
- [164] J. Skolnick and A. Kolinski. Computational studies of protein folding. *Computing in Science Engineering*, 3(5):40–50, Sep 2001.
- [165] H. Sompolinsky. Time-dependent order parameters in spin-glasses. *Phys. Rev. Lett.*, 47:935–938, Sep 1981.
- [166] H. Eugene Stanley. Scaling, universality, and renormalization: Three pillars of modern critical phenomena. *Rev. Mod. Phys.*, 71:S358–S366, Mar 1999.

- [167] H. Eugene Stanley and Victor K. Wong. Introduction to phase transitions and critical phenomena. *American Journal of Physics*, 40(6):927–928, 1972.
- [168] D.L. Stein and C.M. Newman. *Spin Glasses and Complexity*. Primers in Complex Systems. Princeton University Press, 2013.
- [169] M. J. Stephen and J. L. McCauley Jr. Feynman graph expansion for tricritical exponents. *Physics Letters A*, 44(2):89–90, 5 1973.
- [170] Paul N. Suding and Robert M. Ziff. Site percolation thresholds for Archimedean lattices. *Phys. Rev. E*, 60:275–283, Jul 1999.
- [171] Yuji Sugita and Yuko Okamoto. Replica-exchange molecular dynamics method for protein folding. *Chemical Physics Letters*, 314(1–2):141 – 151, 1999.
- [172] Masuo Suzuki. New universality of critical exponents. *Progress of Theoretical Physics*, 51(6):1992–1993, 1974.
- [173] Robert H. Swendsen and Jian-Sheng Wang. Replica Monte Carlo Simulation of Spin-Glasses. *Phys. Rev. Lett.*, 57(21):2607–2609, Nov 1986.
- [174] Robert H. Swendsen and Jian-Sheng Wang. Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations. *Phys. Rev. Lett.*, 58(2):86–88, Jan 1987.
- [175] P. E. Theodorakis and N. G. Fytas. Wang-Landau study of the 3D Ising model with bond disorder. *European Physical Journal B*, 81:245–251, May 2011.
- [176] Fugao Wang and D. P. Landau. Determining the density of states for classical statistical models: A random walk algorithm to produce a flat histogram. *Phys. Rev. E*, 64:056101, Oct 2001.
- [177] Fugao Wang and D. P. Landau. Efficient, multiple-range random walk algorithm to calculate the density of states. *Phys. Rev. Lett.*, 86:2050–2053, Mar 2001.
- [178] Martin Weigel. Genetic embedded matching approach to ground states in continuous-spin systems. *Phys. Rev. E*, 76:066706, Dec 2007.

- [179] John C. Wierman. Bond percolation critical probability bounds for three archimedean lattices. *Random Structures & Algorithms*, 20(4):507–518, 2002.
- [180] Ulli Wolff. Collective monte carlo updating for spin systems. *Phys. Rev. Lett.*, 62:361–364, Jan 1989.
- [181] Ming-Chya Wu, Chin-Kun Hu, and N. Sh. Izmailian. Universal finite-size scaling functions with exact nonuniversal metric factors. *Phys. Rev. E*, 67:065103, Jun 2003.
- [182] X. T. Wu. Excited states of the saddle point equation of the landau-ginzburg-wilson hamiltonian with random temperature. *Phys. Rev. B*, 79:184208, May 2009.
- [183] Yuri YAMADA, Yosuke UEDA, and Yosuke KATAOKA. Replica exchange monte carlo simulations for folding of di-block polyampholyte. *Journal of Computer Chemistry, Japan*, 4(3):127–130, 2005.
- [184] C. N. Yang. The spontaneous magnetization of a two-dimensional ising model. *Phys. Rev.*, 85:808–816, Mar 1952.