

Υπολογιστική μελέτη του τρισδιάστατου μοντέλου Potts για $q = 3$ υπό την επίδραση εξωτερικού μαγνητικού πεδίου

Θεόδωρος Ρίζος

Επιβλέπων Καθηγητής: Κωνσταντίνος
Αναγνωστόπουλος



Περίληψη

- Κίνητρο και Επισκόπηση της Διπλωματικής
- Θεωρητικό Μοντέλο
- Μέθοδοι Αριθμητικής Προσομοίωσης
- Ανάλυση Δεδομένων
- Παρουσίαση Αποτελεσμάτων
- Συμπεράσματα και Προεκτάσεις

Κίνητρο

- Η κατανόηση φασικών μεταβάσεων.
- Η μελέτη του μοντέλου Potts, που αποτελεί γενίκευση του μοντέλου Ising.
- Ειδικότερα η μελέτη του μοντέλου Potts για $q=3$ και με εφαρμογή εξωτερικού πεδίου έχει εξεταστεί περιορισμένα.
- Η χρήση του μοντέλου Potts ως θεωρητικό πρότυπο σε άλλα επιστημονικά πεδία όπου συστήματα παρουσιάζουν ίδιες συμμετρίες και κρίσιμη συμπεριφορά, ανεξαρτήτως των μικροσκοπικών λεπτομερειών τους.

Επισκόπηση

- Υλοποίηση και χρήση αλγόριθμων Monte Carlo με τη μέθοδο Metropolis για την προσομοίωση του μοντέλου.
- Εκτέλεση των προσομοιώσεων σε διάφορα μεγέθη συστήματος L και θερμοκρασίες β κοντά στην κρίσιμη περιοχή.
- Επεξεργασία των δεδομένων μέσω τεχνικών επαναβαθμονόμησης (reweighting) με τη χρήση αλγόριθμων Ferrenberg–Swendsen και ανάλυση πεπερασμένου μεγέθους (finite-size scaling).
- Ποιοτική και ποσοτική ερμηνεία των αποτελεσμάτων.

Θεωρητικό Μοντέλο

- Το μοντέλο Potts περιγράφει συλλογικά φαινόμενα μέσω ενός συνόλου από διακριτές μεταβλητές (spins) τοποθετημένες στους κόμβους ενός κανονικού πλέγματος. Κάθε κόμβος αντιστοιχεί σε μια θέση του συστήματος, ενώ η μεταβλητή s_i που τοποθετείται εκεί παριστάνει την τοπική «κατάσταση» του συστήματος σε εκείνο το σημείο.
- Στο Potts μοντέλο κάθε spin μπορεί να λάβει μία από q διακριτές καταστάσεις.

Σε πολλές φυσικές εφαρμογές, αυτές οι διακριτές καταστάσεις μπορούν να αντιστοιχούν σε ποσοτικά μετρήσιμες αλλά ασυνεχείς τιμές φυσικών μεγεθών.

Φυσικό σύστημα	Ερμηνεία κατάστασης σ_i
Μαγνητισμός (Potts)	Προσανατολισμός spin σε διακριτές κατευθύνσεις
Κρυσταλλικές φάσεις	Τοπική φάση του υλικού (στερεό, υγρό, άμορφο)
QCD σε πλέγμα (lattice)	Χρωματική φόρτιση (κόκκινο, πράσινο, μπλε)
Βιολογικά πρότυπα	Στάδιο ανάπτυξης κυττάρου ή πρωτεΐνης
Κοινωνικά μοντέλα	Ένταξη ή προτίμηση σε κοινωνική ομάδα

Η Χαμιλτονιανή του συστήματος είναι:

$$H = -J \cdot \sum_{i,j} \delta_{\sigma_i, \sigma_j}$$

Όμως με την εφαρμογή του εξωτερικού πεδίου παίρνει τη μορφή:

$$H = -J \cdot \sum_{i,j} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} - h \sum_i \delta_{\sigma_i, \sigma}$$

Το πεδίο αυτό σπάει τη συμμετρία S_q του μοντέλου και επηρεάζει τη φύση της φασικής μετάβασης. Για μικρές τιμές του h , η μετάβαση μπορεί να παραμείνει πρώτης τάξης. Καθώς όμως το πεδίο αυξάνεται και φτάνει σε μια κρίσιμη τιμή h_c , η φασική μετάβαση καταλήγει σε ένα κρίσιμο σημείο δεύτερης τάξης.

- Η **καθολικότητα (universality)** περιγράφει το γεγονός ότι εντελώς διαφορετικά συστήματα μπορεί να εμφανίζουν όμοια κρίσιμη συμπεριφορά κοντά στο σημείο μετάβασης, παρά τις διαφορετικές μικροσκοπικές τους λεπτομέρειες. Τα συστήματα αυτά κατατάσσονται σε κλάσεις καθολικότητας, οι οποίες καθορίζονται από μια παράμετρο τάξης, τη χωρική διάσταση και τη φύση των αλληλεπιδράσεων.
- Η κρίσιμη συμπεριφορά μπορεί να μελετηθεί ποσοτικά μέσω της **θεωρίας πεπερασμένου μεγέθους (finite-size scaling – FSS)**, η οποία προβλέπει ότι τα παρατηρήσιμα θερμοδυναμικά μεγέθη υπακούουν σε χαρακτηριστικούς νόμους κλιμάκωσης (scaling laws) καθώς το σύστημα πλησιάζει το κρίσιμο σημείο.

$$C_{max} \sim L^{\alpha/\nu}, \quad \chi_{max} \sim L^{\gamma/\nu}, \quad M \sim L^{-\beta/\nu}$$



όπου α , β , γ , ν είναι οι κρίσιμοι εκθέτες του συστήματος. Οι εκθέτες αυτοί είναι καθολικοί, δηλαδή εξαρτώνται μόνο από την κλάση καθολικότητας στην οποία ανήκει το σύστημα.

Αν τα δεδομένα επανακλιμακωθούν κατάλληλα, τότε τα γραφήματα των μεγεθών για διαφορετικά L «καταρρέουν» σε μια ενιαία καμπύλη-φαινόμενο γνωστό ως data collapse. Αυτή η συμπεριφορά αποτελεί ένδειξη ότι το σύστημα ακολουθεί την αναμενόμενη κρίσιμη κλιμάκωση και ανήκει στην αντίστοιχη καθολική κλάση.

Scaling Fields και Operator Mixing στο Critical Endpoint

Στο κρίσιμο αυτό σημείο (β_c, h_c) οι τυπικές θερμοδυναμικές μεταβλητές ενέργεια E και μαγνήτιση M , δεν ευθυγραμμίζονται πλέον με τις σχετικές διευθύνσεις που καθορίζουν την κρίσιμη συμπεριφορά του συστήματος.

Για να περιγραφεί σωστά η κρίσιμη συμπεριφορά, πρέπει να οριστούν νέοι, περιστρεφόμενοι (rotating) βαθμωτοί παράγοντες κλίμακας, γραμμικοί συνδυασμοί των β και h , που ευθυγραμμίζονται με τις διευθύνσεις όπου παρατηρούνται διακυμάνσεις (fluctuations) .



Αυτοί δίνονται από τις παρακάτω σχέσεις:

$$\tau = \frac{1}{1-rs}(\beta - s \cdot h), \xi = \frac{1}{1-rs}(h - r \cdot \beta)$$

Όπου οι παράμετροι ανάμειξης (mixing parameters) r και s καθορίζουν τον προσανατολισμό αυτών των αξόνων κλίμακας σε σχέση με το αρχικό σύστημα (β, h) .

Γεωμετρικά, η περιστροφή από το σύστημα (β, h) στο (τ, ξ) αντιστοιχεί στην ευθυγράμμιση του συστήματος συντεταγμένων με την εφαπτομένη και την κάθετη της γραμμής φάσης πρώτης τάξης στο κρίσιμο σημείο τερματισμού.


$$r^{-1} = \left. \frac{d\beta_c(h)}{dh} \right|_{h=h_c}$$

Η παράμετρος s ορίζεται στη συνέχεια ώστε να ικανοποιεί την ανεξαρτησία των στατιστικών διακυμάνσεων των αναμειγμένων παρατηρητών.

Αντίστοιχα, τα παρατηρήσιμα πρέπει να επαναπροσδιοριστούν κοντά στο κρίσιμο σημείο:

$$\tilde{E} = E + r \cdot M, \quad \tilde{M} = M + s \cdot E$$

όπου οι $\tilde{E}$ και $\tilde{M}$ είναι (order parameter-like operators) κατά τις νέες διευθύνσεις.

Μέθοδοι Αριθμητικής Προσομοίωσης

- Η προσομοίωση του τρισδιάστατου μοντέλου Potts με $q=3$ πραγματοποιείται σε κυβικό πλέγμα πλευράς L , με συνολικό αριθμό θέσεων $N = L^3$. Κάθε θέση του πλέγματος φέρει ένα spin $\sigma_i \in \{1, 2, 3\}$.
- Η επιλογή μονοδιάστατου πίνακα αντί τρισδιάστατου έγινε ώστε να αποφεύγονται προβλήματα με αρνητικούς δείκτες, ειδικά κατά την υλοποίηση περιοδικών συνοριακών συνθηκών.
- Χρησιμοποιήθηκαν περιοδικές συνοριακές συνθήκες (periodic boundary conditions), γνωστές και ως τορροειδείς (toroidal) συνθήκες, που προσομοιώνουν ένα κλειστό, χωρίς σύνορα σύστημα, όπου κάθε διάσταση συνδέεται κυκλικά με την αντίθετη της πλευρά.

- Όλες οι παράμετροι όπως μήκος πλέγματος, θερμοκρασία, αρχική κατάσταση, εξωτερικό πεδίο κτλπ, μπορούν να εισαχθούν από τον χρήστη του προγράμματος.
- Αλγόριθμος Metropolis

```
1 subroutine met
2 integer :: i, k, nn, snn, dE, next_spin
3 real(dp) :: dE_field, dE_interaction
4 integer :: ix, iy, iz, XNN, YNN, ZNN ! 3D indices
5
6 do k = 1, N
7   ! Choosing a random site
8   i = INT(N * drandom()) + 1
9
10  ! Conversion of the one-dimensional index i to 3D coordinates
11  (ix, iy, iz)
12
13  ix = MOD(i - 1, L) + 1 ! X direction
14  iy = MOD((i - 1) / L, L) + 1 ! Y direction
15  iz = MOD(((i - 1) / (L * L)), L) + 1 ! Z direction
16
17  ! Calculation of neighboring spins (6 in total)
18  snn = 0
19
```

```

18
19 ! Neighbors in the X direction (left and right)
20 XNN = MOD(ix - 2, L) + 1
21 snn = snn + s(index_3d(XNN, iy, iz, L))
22 XNN = MOD(ix, L) + 1
23 snn = snn + s(index_3d(XNN, iy, iz, L))
24
25 ! Neighbors in the Y direction (up and down)
26 YNN = MOD(iy, L) + 1
27 snn = snn + s(index_3d(ix, YNN, iz, L))
28 YNN = MOD(iy - 2, L) + 1
29 snn = snn + s(index_3d(ix, YNN, iz, L))
30
31 ! Neighbors in the Z direction (forth and back)
32 ZNN = MOD(iz, L) + 1
33 snn = snn + s(index_3d(ix, iy, ZNN, L))
34 ZNN = MOD(iz - 2, L) + 1
35 snn = snn + s(index_3d(ix, iy, ZNN, L))
36
37 ! Calculation of energy change due to interaction
38 dE_interaction = 2 * snn * (s(i) - 1)
39
40 ! Calculation of energy change due to external field h
41 if (s(i) == 1) then
42 dE_field = -h ! Ευνοείται η κατάσταση s=1
43 else
44 dE_field = h ! Επιβάλλεται ενεργειακό κόστος στις άλλες
   καταστάσεις
45 end if
46
47 ! Total energy change
48 dE = dE_interaction + dE_field
49

```

```
50 ! Applying the Metropolis criteria
51 prob_acc = exp(-beta * dE)
52
53 if (dE .le. 0) then
54 ! Energy-favorable change - acceptance
55 next_spin = INT(drandom() * 3) + 1
56 s(i) = next_spin
57 else if (drandom() < prob_acc) then
58 ! Possible acceptance with Metropolis probability
59 next_spin = INT(drandom() * 3) + 1
60 s(i) = next_spin
61 end if
62 end do
63 end subroutine met
```

- Η τεχνική επανασταθμίσεως **Ferrenberg–Swendsen** εφαρμόζεται μετά την ολοκλήρωση των Monte Carlo προσομοιώσεων, με στόχο την ανακατασκευή θερμοδυναμικών μεγεθών σε ένα εύρος θερμοκρασιών "γύρω" από τη αντίστροφη θερμοκρασία β_0 που πραγματοποιήθηκε η προσομοίωση Monte Carlo. Αξιοποιεί δεδομένα που έχουν συλλεχθεί σε αυτή τη θερμοκρασία και, χωρίς την ανάγκη νέων προσομοιώσεων, παράγει εκτιμήσεις για ένα κοντινό πλήθος θερμοκρασιών β' μέσω αναπροσαρμογής των σχετικών πιθανοτήτων των καταστάσεων.
- Η πιθανότητα εμφάνισης μιας κατάστασης με ενέργεια E_0 σε θερμοκρασία β' σχετίζεται με την αντίστοιχη σε β_0 μέσω του λόγου:

$$w_i = \exp [-(b' - b_0) \cdot E_i]$$

- Τα βάρη w_i χρησιμοποιούνται για την επανασταθμισμένη εκτίμηση παρατηρήσιμων μεγεθών, όπως η μέση ενέργεια, η μαγνήτιση, η ειδική θερμότητα, η μαγνητική επιδεκτικότητα κτλπ.
- Είναι ιδιαίτερα χρήσιμη στη μελέτη φασικών μεταβάσεων, καθώς επιτρέπει την ακριβέστερη μελέτη στο εύρος της κρίσιμης συμπεριφοράς αξιοποιώντας αποτελεσματικά τα ήδη διαθέσιμα δεδομένα, προσφέροντας σημαντική υπολογιστική οικονομία και στατιστική ακρίβεια.
- Η εφαρμοσιμότητα της μεθόδου εξαρτάται από το κατά πόσον οι κατανομές ενέργειας στις θερμοκρασίες β_0 και β' επικαλύπτονται επαρκώς (overlap condition). Γι' αυτό και γίνεται έλεγχος της στατιστικής αξιοπιστίας.

```

58 do i = 1, n
59 if (abs(delta_beta * E(i)) > EXP_LIMIT) then
60 weights(i) = 0.0_dp
61 else
62 weights(i) = exp(-delta_beta * E(i))
63 end if
64 end do
65
66 ! Important if-loop that prevents values with huge errors caused by poor
67   statistics, which effectively zero out the weights
68
69 sum_w = sum(weights)
70 if (sum_w < 1.0e-12_dp) then
71 print *, "Warning:_sum_of_weights_near_zero_at_beta_", beta_prime
72 write(20, '(A)') "#_WARNING:_poor_statistics_at_beta_=" // trim(adjustl(
73   to_string(beta_prime)))
74 end if
75
76 sum_Ew = sum(E * weights)
77 sum_E2w = sum((E**2) * weights)
78 sum_Mw = sum(M * weights)
79 sum_M2w = sum((M**2) * weights)
80 sum_M4w = sum((M**4) * weights)
81
82 E_avg = sum_Ew / sum_w
83 E2_avg = sum_E2w / sum_w
84 Cv = (E2_avg - E_avg**2) * (beta_prime**2)
85
86 M_avg = sum_Mw / sum_w
87 M2_avg = sum_M2w / sum_w
88 chi = (M2_avg - M_avg**2) * beta_prime

```

Ανάλυση Δεδομένων

- Προφανώς έγιναν πολλές προσομοιώσεις για διάφορες τιμές μήκους πλέγματος L και εξωτερικού πεδίου h στο εύρος:

$$L \in [40, 70] \text{ και } h \in [0.00050, 0.00095]$$

- Ύστερα από κάθε προσομοίωση επεξεργάστηκε τα δεδομένα και ένα πρόγραμμα "autoco" το οποίο υπολογίζει τους χρόνους αυτοσυσχέτισης για κάθε παρατηρούμενο.
- Η αξιοπιστία των αποτελεσμάτων συνδέεται με την επιλογή του αριθμού των γραμμών δεδομένων που προσπερνάει ο αλγόριθμος μέχρι την κατάσταση θερμικής ισορροπίας του συστήματος ώστε η εφαρμογή της μεθόδου Ferrenberg–Swendsen (FS) να γίνει σε σωστό εύρος θερμοκρασιών αποκόπτοντας στατιστικό θόρυβο.

Για κάθε τιμή του εξωτερικού πεδίου h και κάθε μέγεθος συστήματος L , εντοπίστηκε:

- Η αντίστροφη θερμοκρασία $\beta_{\max}$ στην οποία η επιδεκτικότητα χ μεγιστοποιείται.
- Τα μέγιστα της μαγνητικής επιδεκτικότητας $\chi_{\max}$.
- Ο συντελεστής Binder B_4 .

Ορισμός: Για το μαγνητικό παρατηρήσιμο M , ο τέταρτης τάξης Binder cumulant ορίζεται ως:

$$B_4 = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3\langle M^2 \rangle^2}$$

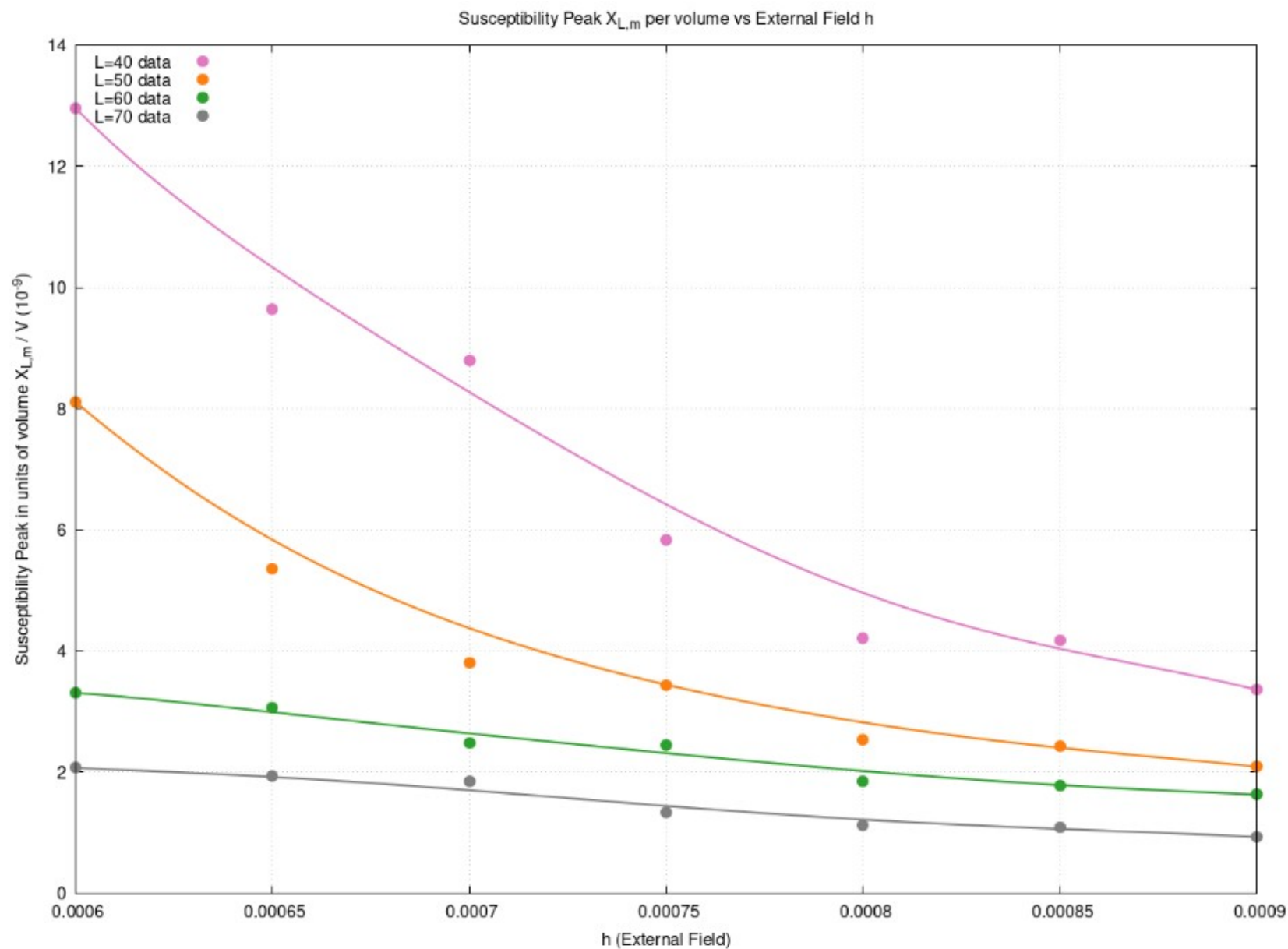


Παρουσίαση Αποτελεσμάτων

Η ανάλυση των αποτελεσμάτων αποσκοπεί αφενός στην ποιοτική κατανόηση της κρίσιμης συμπεριφοράς του συστήματος, αφετέρου γίνεται ποσοτική εκτίμηση κρίσιμων μεγεθών και σταθερών μέσω μεθόδων όπως η ανάλυση πεπερασμένου μεγέθους (finite size scaling).

- Εκτίμηση των coupling σταθερών r και s .
- Μελέτη και υπολογισμός των κρίσιμων σημείων τόσο στις κανονικές όσο και στις rotated συντεταγμένες.
- Εκτίμηση της κρίσιμη σταθεράς ν (που σχετίζεται με την καθολικότητα του συστήματος).

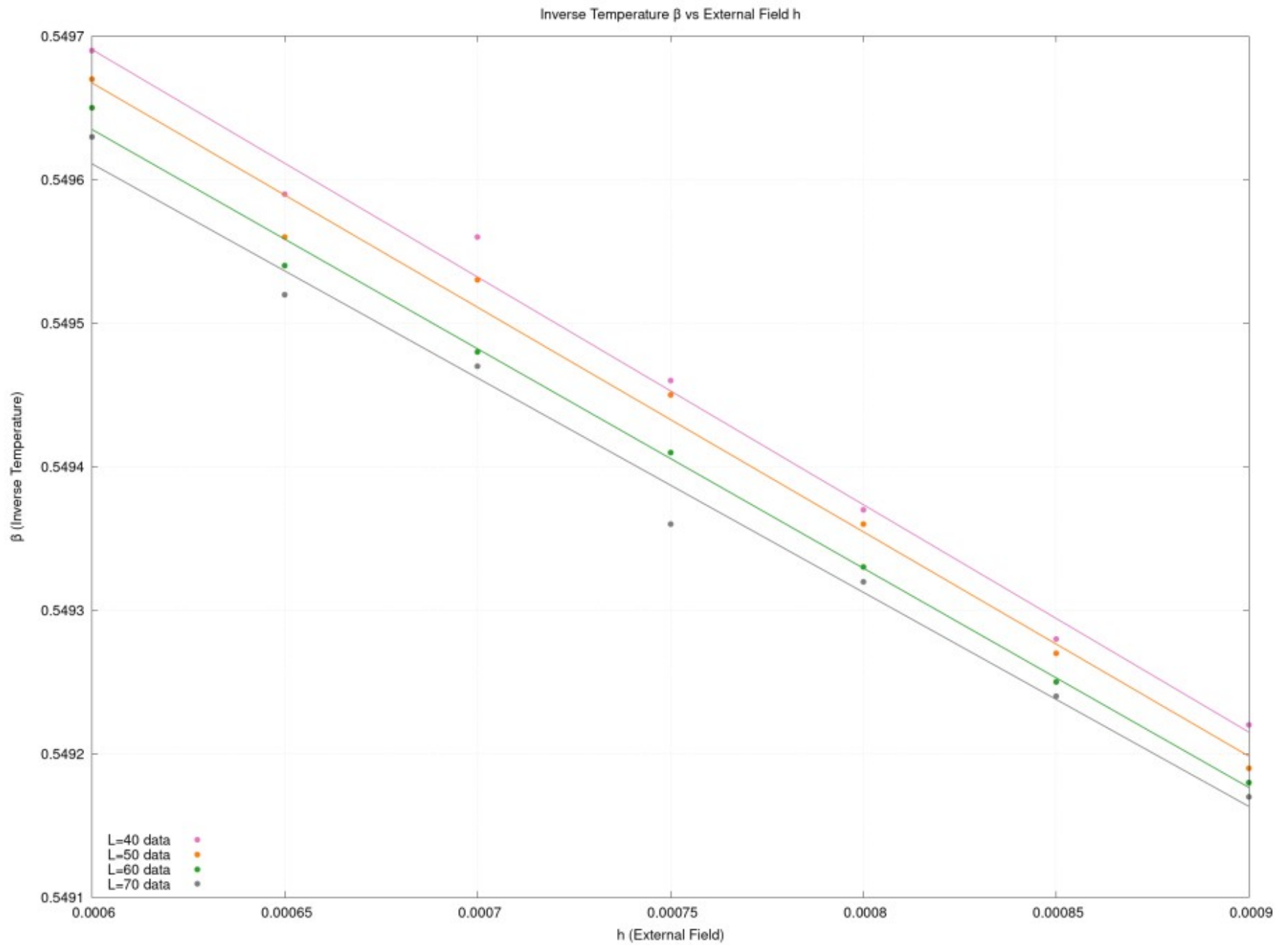
Μαγνητική επιδεκτικότητα σε συνάρτηση με το εξωτερικό πεδίο $\chi(h)$



Μελέτη της συνάρτησης $\beta(h)$ και εκτίμηση των coupling σταθερών r και s

Λόγω της εγγύτητας στο κρίσιμο σημείο, θεωρούμε ότι η σχέση μεταξύ β και h μπορεί να προσεγγιστεί γραμμικά. Έτσι, εφαρμόστηκε γραμμική προσαρμογή στις καμπύλες $\beta(h)$ για κάθε L , και υπολογίστηκαν οι αντίστοιχες κλίσεις των ευθειών.

Οι κλίσεις αυτών των ευθειών συνδέονται άμεσα με τις σταθερές σύζευξης (coupling parameters) r, s των περιστραμμένων διευθύνσεων, όπου περιγράφονται οι διακυμάνσεις στην περιοχή του κρίσιμου σημείου.





Μέσω του παραπάνω γραφήματος και της εύρεσης των κλίσεων των προσαρμοσμένων ευθειών παρατηρείται ότι καθώς το L αυξάνεται, οι κλίσεις συγκλίνουν σε μια τιμή περίπου -1.493 , η οποία σύμφωνα με τη θεωρία αντιστοιχεί στην παράγωγο

$$r^{-1} = \left. \frac{d\beta_c(h)}{dh} \right|_{h=h_c} = -1.493,$$

οπότε
$$r^{-1} = \frac{1}{-1.493} \approx -0.670,$$

μπορεί ναδειχθεί ότι η δεύτερη coupling σταθερά ικανοποιεί την $s = -r = 0.670$, εντός των ορίων του στατιστικού σφάλματος.

Εκτίμηση της κρίσιμης θερμοκρασίας β_c και του εκθέτη συσχέτισης ν

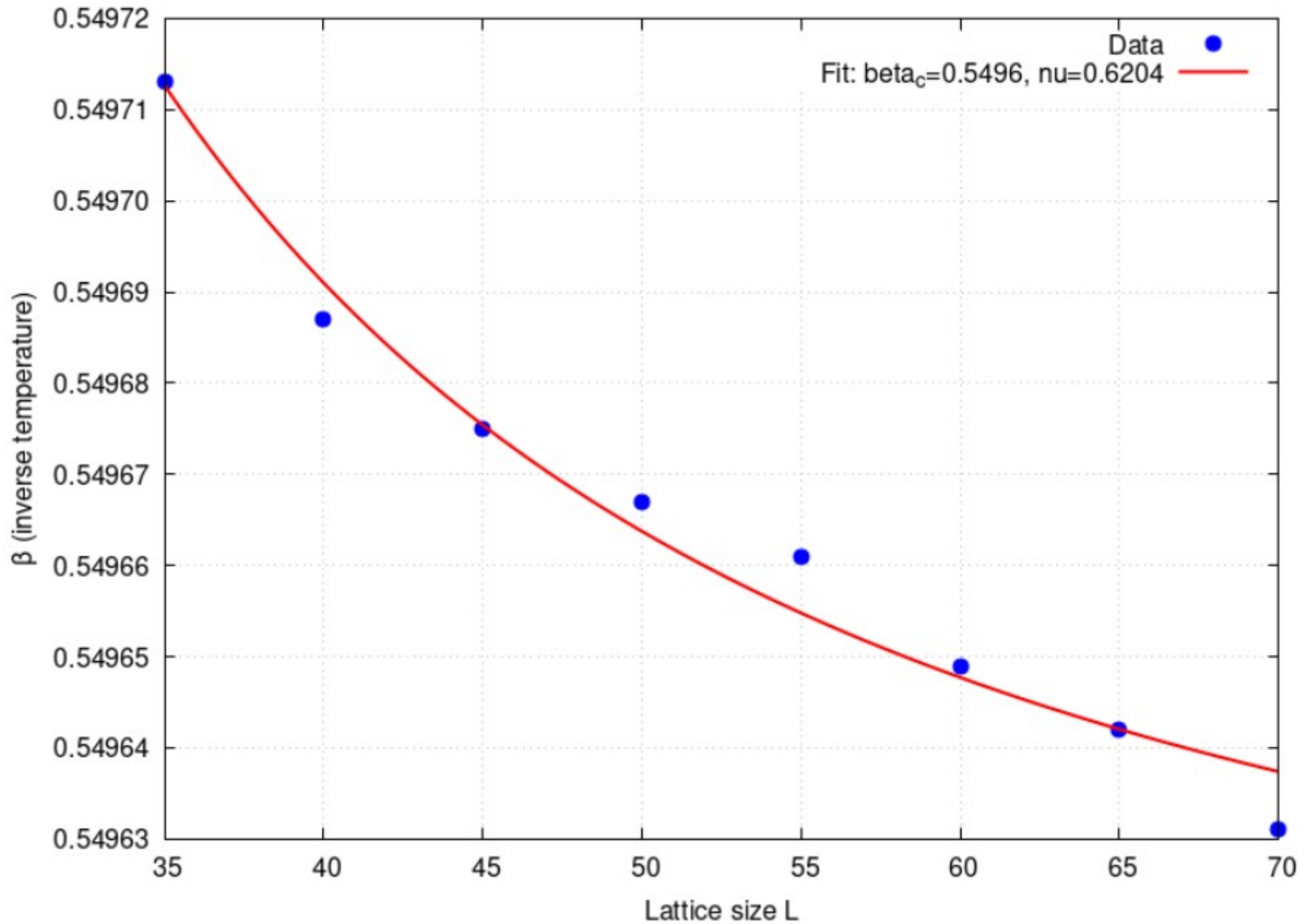
Σύμφωνα με τη θεωρία του πεπερασμένου μεγέθους (finite-size scaling), στην περιοχή του κρίσιμου σημείου, η τιμή του $\beta^*(L)$, όπου παρατηρείται η μέγιστη απόκριση του συστήματος, προσεγγίζει την κρίσιμη θερμοκρασία φάσης μετάβασης στο θερμοδυναμικό όριο β_c μέσω της σχέσης:

$$\beta^*(L) = \beta_c + \alpha \cdot L^{-\frac{1}{\nu}}$$

όπου α είναι μια σταθερά και ν είναι ο κρίσιμος εκθέτης που περιγράφει τη συμπεριφορά του μήκους συσχέτισης

$$\xi \sim |T - T_c|^{-\nu}$$

Finite-Size Scaling of Susceptibility Peak (β)



$$\beta_c \approx 0.5496 \quad \nu \approx 0.62$$

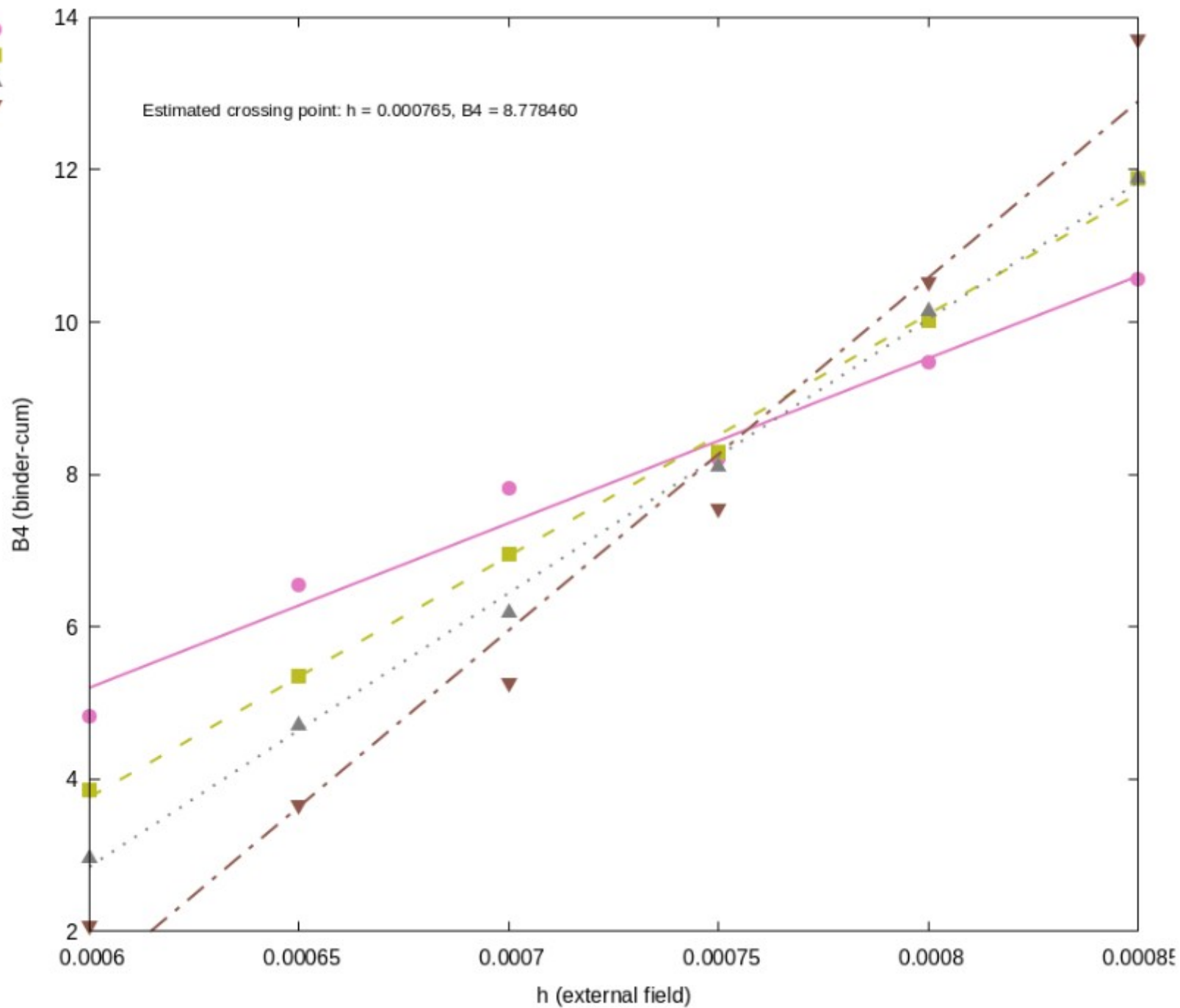
Μελέτη της συνάρτησης του Binder cumulant $B_4(h)$ και εκτίμηση της κρίσιμης τιμής του εξωτερικού πεδίου h_c

Σύμφωνα με τη θεωρία του πεπερασμένου μεγέθους, η συνάρτηση $B_4(h)$ εμφανίζει σχεδόν γραμμική συμπεριφορά κοντά στο κρίσιμο σημείο. Επιπλέον, οι καμπύλες που αντιστοιχούν σε διαφορετικά L τέμνονται περίπου στο ίδιο σημείο, το οποίο προσεγγίζει την κρίσιμη τιμή του εξωτερικού πεδίου h_c .

Η τομή των ευθειών αυτών αποτελεί εκτίμηση για την κρίσιμη τιμή του εξωτερικού πεδίου.

Binder Cumulant vs External Field

L=40 Data
L=50 Data
L=60 Data
L=70 Data



$$h_c \approx 0.000765$$

Μετασχηματισμός στο (τ, ξ) : Υπολογισμός του κρίσιμου σημείου

Εφόσον έχουν εκτιμηθεί το κρίσιμο σημείο και οι σταθερές coupling

$$\beta_c \approx 0.5496 \quad h_c \approx 0.000765$$

$$r \approx -0.670 \quad s \approx 0.670$$

Μπορώ να υπολογίσω το κρίσιμο στο rotated σύστημα

$$\tau_c \approx 0.379 \quad \xi_c \approx 0.254$$

Συγκρίνοντας τις τιμές της παρούσας εργασίας με τη μελέτη των Karsch και Stickan, όπου η τιμή του κρίσιμου σημείου για το τρισδιάστατο $q=3$ Potts μοντέλο εκτιμάται ως:

$$(\beta_c, h_c) = (0.54938(2), 0.000775(10)).$$

η σχετική απόκλιση είναι μόλις:

- $\sim 0.04\%$ για το β_c ,
- $\sim 1.3\%$ για το h_c ,

σε σχέση με τις τιμές αυτές.

Αυτή η πολύ καλή συμφωνία αποτελεί ένδειξη ότι η ανάλυση των δεδομένων, τόσο ως προς την επιλογή των μεγεθών όσο και ως προς την εφαρμογή της θεωρίας του πεπερασμένου μεγέθους, είναι αξιόπιστη.

Συμπεράσματα και Προεκτάσεις

- Επιβεβαίωση ότι το σύστημα εντάσσεται στην κλάση καθολικότητας τριών διαστάσεων και $q=3$.
- Επιβεβαιώθηκε η τοποθεσία του κρίσιμου σημείου του συστήματος στο επίπεδο των θερμοδυναμικών μεταβλητών (β, h) , καθώς και στις περιστραμμένες συντεταγμένες (τ, ξ) .
- Λόγω της έννοιας της καθολικότητας, τα πορίσματα της μελέτης μπορούν να αξιοποιηθούν και στη μελέτη άλλων συστημάτων που εμφανίζουν τις ίδιες συμμετρίες και κρίσιμη συμπεριφορά, ανεξαρτήτως των μικροσκοπικών λεπτομερειών τους.

- 
- Μελέτη μεγαλύτερων συστημάτων.
 - Διαφορετική προσέγγιση στην υπολογιστική μεθοδολογία για μικρότερο κόστος υπολογισμών και μεγαλύτερη ακρίβεια.
 - Την αριθμητική διερεύνηση άλλων κρίσιμων εκθετών.
 - Μελέτη του συστήματος και εκτός κρίσιμης περιοχής.
 - Επέκταση της ανάλυσης σε άλλες τάξεις καθολικότητας.