

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

Θεόδωρος Ρίζος

Ιούνιος 2025

Επιβλέπων Καθηγητής: Κωνσταντίνος
Αναγνωστόπουλος



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών
Επιστημών

Περίληψη

Η παρούσα διπλωματική εργασία μελετά το τρισδιάστατο μοντέλο Potts με τρεις καταστάσεις ($q = 3$) παρουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, μέσω προσομοιώσεων Monte Carlo. Για τη δειγματοληψία της κατανομής κατάστασης του συστήματος χρησιμοποιείται ο αλγόριθμος Metropolis, με τις θερμοκρασίες προσομοίωσης να επιλέγονται κυρίως κοντά στο κρίσιμο σημείο ώστε να αναλυθεί η φασική μετάβαση. Η μέθοδος επαναβαθμονόμησης Ferrenberg–Swendsen εφαρμόζεται για τη βελτίωση της ακρίβειας και την ανακατασκευή θερμοδυναμικών μεγεθών στην κρίσιμη περιοχή.

Μελετώνται βασικές θερμοδυναμικές ποσότητες, όπως η ενέργεια, ο μαγνητισμός και η μαγνητική επιδεκτικότητα, για διαφορετικά μεγέθη πλέγματος. Η ανάλυση βασίζεται σε εργαλεία πεπερασμένου μεγέθους (finite-size scaling), με στόχο τον εντοπισμό του κρίσιμου σημείου και τη διερεύνηση της καθολικότητας (universality) της μετάβασης φάσης.

Abstract

This thesis investigates the three-dimensional Potts model with three states ($q = 3$) in the presence of an external magnetic field, using Monte Carlo simulations. The Metropolis algorithm is employed for sampling the system's state distribution, with simulation temperatures chosen primarily near the critical point in order to analyze the phase transition. The Ferrenberg–Swendsen reweighting method is applied to improve accuracy and reconstruct thermodynamic quantities in the critical region.

Key thermodynamic observables such as energy, magnetization, and magnetic susceptibility are studied for various lattice sizes. The analysis is based on finite-size scaling techniques, aiming to determine the critical point and explore the universality of the phase transition.

Περιεχόμενα

1	Εισαγωγή	5
1.1	Κίνητρο	5
1.2	Επισκόπηση	5
1.3	Μεθοδολογία	6
2	Θεωρητικό Υπόβαθρο και το Μοντέλο	7
2.1	Το μοντέλο Potts	7
2.2	Τιμές q και σύνδεση με γνωστά μοντέλα	8
2.3	Φασικές Μεταβάσεις και Κρίσιμα Φαινόμενα	9
2.3.1	Διαστάσεις και φασική συμπεριφορά	10
2.3.2	Συμμετρίες και κατανομή καταστάσεων	10
2.4	Εξωτερικό Μαγνητικό Πεδίο στο Μοντέλο Potts	11
2.5	Θερμοδυναμικά Μεγέθη και Παρατηρήσιμα	12
2.6	Καθολικότητα και Ανάλυση Πεπερασμένου Μεγέθους (Finite-Size Scaling)	13
2.7	Δείκτης Binder (Binder Cumulant)	14
2.8	Κρίσιμο Σημείο: Scaling Fields και Operator Mixing στο Critical Endpoint	15
2.9	Αριθμητικές Μέθοδοι Προσομοίωσης	17
2.9.1	Μέθοδος Monte Carlo	17
2.9.2	Αλγόριθμος Metropolis	18
2.9.3	Μέθοδος Ferrenberg–Swendsen	18
3	Μέθοδοι Αριθμητικής Προσομοίωσης και Υπολογιστική Μεθοδολογία	20
3.1	Δομή Πλέγματος και Αρχικοποίηση	20
3.2	Συνοριακές Συνθήκες	22
3.3	Αλγόριθμος Metropolis	23
3.4	Εφαρμογή Εξωτερικού Μαγνητικού Πεδίου	26
3.5	Τεχνική Επανασταθμίσεως Ferrenberg–Swendsen	28
4	Διαχείριση και Ανάλυση Δεδομένων	32
4.1	Οργάνωση Υπολογισμών και Αυτόματη Εκτέλεση	32
4.2	Ανάλυση Δεδομένων και Προσδιορισμός Κρίσιμης Συμπεριφοράς . .	34
4.2.1	Post-processing μέσω της μεθόδου Ferrenberg–Swendsen . .	34
4.2.2	Οργάνωση αποτελεσμάτων και καταγραφή κρίσιμων θερμοκρασιών	35
4.3	Παραγωγή Γραφικών Παραστάσεων	38

5	Αποτελέσματα και Συζήτηση	45
5.1	Μαγνητική επιδεκτικότητα σε συνάρτηση με το εξωτερικό πεδίο $\chi(h)$	45
5.2	Μελέτη της συνάρτησης $\beta(h)$ και εκτίμηση των coupling σταθερών r και s	47
5.3	Εκτίμηση της κρίσιμης θερμοκρασίας β_c και του εκθέτη συσχέτισης ν	50
5.4	Μελέτη της συνάρτησης του Binder cumulant $B_4(h)$ και εκτίμηση της κρίσιμης τιμής του εξωτερικού πεδίου h_c	52
5.5	Μετασχηματισμός στο (τ, ξ) : Υπολογισμός του κρίσιμου σημείου . .	53
	Συμπεράσματα	55
	Αναφορές	56

1 Εισαγωγή

1.1 Κίνητρο

Η κατανόηση φασικών μεταβάσεων παραμένει κεντρικό ζήτημα στη στατιστική φυσική και σε συναφείς επιστήμες. Το μοντέλο Potts, ως γενίκευση του μοντέλου Ising [1], επιτρέπει τη μελέτη συστημάτων με διαφορετικές συμμετρίες και παρουσιάζει πλούσια συμπεριφορά στη μετάβαση φάσεων. Ιδιαίτερα στην τρισδιάστατη περίπτωση για $q = 3$, το σύστημα εμφανίζει ασθενή μετάβαση πρώτης τάξης — ένα φαινόμενο θεωρητικά ενδιαφέρον αλλά δύσκολα προσδιορίσιμο αριθμητικά, λόγω απουσίας αναλυτικής λύσης.

Η εφαρμογή εξωτερικού μαγνητικού πεδίου καθιστά το πρόβλημα ακόμα πιο σύνθετο, καθώς σπάει τη συμμετρία του συστήματος και τροποποιεί τη φύση της μετάβασης φάσης. Ανάλογα με την ένταση και τον προσανατολισμό του πεδίου, ιδιαίτερα αν το πεδίο ευνοεί μία από τις καταστάσεις έναντι των υπολοίπων, η μετάβαση μπορεί να εξασθενίσει, να μετατραπεί σε δεύτερης τάξης, είτε σε μια ομαλή διελεύση (crossover) ή και να εξαλειφθεί — γεγονός που καθιστά την αριθμητική της διερεύνηση κρίσιμη για την κατανόηση της συμπεριφοράς του συστήματος.

Παρότι τέτοιες καταστάσεις είναι θεμελιώδους σημασίας για τη μελέτη συλλογικών φαινομένων, η συγκεκριμένη παραμετροποίηση του μοντέλου έχει εξεταστεί περιορισμένα.

Επιπλέον, το μοντέλο Potts χρησιμοποιείται ως απλό αλλά ισχυρό θεωρητικό πρότυπο σε ποικίλα πεδία, από θεωρίες πλέγματος στην QCD έως εφαρμογές σε βιολογικά συστήματα (όπως μοντέλα συγχρονισμού) και κοινωνικά δίκτυα, όπου φαινόμενα ομαδοποίησης και μετάβασης κατάστασης εμφανίζουν ανάλογα χαρακτηριστικά.

Στο πλαίσιο αυτό, η παρούσα εργασία επικεντρώνεται στη μελέτη του τρισδιάστατου Potts μοντέλου για $q = 3$ παρουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, με στόχο την αριθμητική διερεύνηση της φασικής συμπεριφοράς και την εκτίμηση χαρακτηριστικών όπως η καθολικότητα και η δυναμική της μετάβασης. Τα αποτελέσματα αναμένεται να συνεισφέρουν στην πληρέστερη κατανόηση μεταβάσεων υπό εξωτερικές επιδράσεις και να προσφέρουν δεδομένα χρήσιμα για τη σύνδεση θεωρητικών μοντέλων με πραγματικά ή προσομοιωμένα συστήματα σε διεπιστημονικά περιβάλλοντα όπως αυτά που περιγράφονται παραπάνω.

1.2 Επισκόπηση

Στόχος της παρούσας εργασίας είναι η μελέτη της επίδρασης εξωτερικού μαγνητικού πεδίου στο τρισδιάστατο Potts μοντέλο με $q = 3$. Για τον σκοπό αυτό, υλοποιήθηκαν αλγόριθμοι Monte Carlo με χρήση της μεθόδου Metropolis, επιτρέ-

ποντας την προσαρμογή παραμέτρων όπως το μέγεθος του πλέγματος, η ένταση του εξωτερικού πεδίου και η θερμοκρασία, καθώς και η επιλογή τυχαίων αρχικών καταστάσεων μέσω ψευδοτυχαίων seed.

Μετά την εκτέλεση των προσομοιώσεων σε διάφορα μεγέθη συστήματος L και θερμοκρασίες κοντά στην κρίσιμη περιοχή, τα προκύπτοντα δεδομένα υποβλήθηκαν σε επεξεργασία μέσω τεχνικών επαναβαθμονόμησης (reweighting) με χρήση αλγορίθμων Ferrenberg–Swendsen [2]. Αυτό επέτρεψε την λεπτομερή ανάλυση των θερμοδυναμικών μεγεθών στην περιοχή της μετάβασης.

Η διαδικασία αυτή επέτρεψε τον προσδιορισμό κρίσιμων σημείων και την παρακολούθηση αλλαγών στη φασική συμπεριφορά του συστήματος, θέτοντας τα θεμέλια για τα συμπεράσματα σχετικά με τη φύση της μετάβασης υπό την επίδραση εξωτερικού πεδίου.

1.3 Μεθοδολογία

Η διερεύνηση του τρισδιάστατου Potts μοντέλου με $q = 3$ υπό την επίδραση εξωτερικού μαγνητικού πεδίου πραγματοποιήθηκε μέσω αριθμητικών προσομοιώσεων με τη μέθοδο Monte Carlo, χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο Metropolis [3] για τη δειγματοληψία των καταστάσεων. Οι προσομοιώσεις υλοποιήθηκαν σε Fortran, με περιοδικές συνοριακές συνθήκες, και οι διαστάσεις του πλέγματος κυμάνθηκαν από $L = 40$ έως $L = 70$. Στα πλαίσια των προσομοιώσεων, καταγράφηκαν η ενέργεια και ο μαγνητισμός σε κάθε βήμα Monte Carlo.

Για την ανάλυση της εξάρτησης των θερμοδυναμικών μεγεθών από τη θερμοκρασία και την ακριβή προσέγγιση της κρίσιμης περιοχής, εφαρμόστηκε η μέθοδος Ferrenberg–Swendsen reweighting. Η αξιοπιστία των αποτελεσμάτων διασφαλίστηκε μέσω ελέγχων σύγκλισης, με την εκτίμηση του χρόνου αυτοσυσχέτισης (autocorrelation), καθώς και με στατιστική ανάλυση των δεδομένων χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο jackknife για τον υπολογισμό των σφαλμάτων.

Επιπλέον, για τη μελέτη των φασικών μεταβάσεων και τον προσδιορισμό της καθολικότητας (universality), υπολογίστηκαν κρίσιμοι εκθέτες μέσω κατάλληλης επεξεργασίας των αποτελεσμάτων και ανάλυσης γραφημάτων. Οι λεπτομέρειες υλοποίησης των αλγορίθμων, καθώς και η αναλυτική περιγραφή των τεχνικών επεξεργασίας δεδομένων, παρουσιάζονται στο κύριο σώμα της εργασίας.

2 Θεωρητικό Υπόβαθρο και το Μοντέλο

2.1 Το μοντέλο Potts

Το μοντέλο Potts αποτελεί γενίκευση του γνωστού μοντέλου Ising και προτάθηκε από τον Renfrey Potts το 1952[4]. Πρόκειται για ένα πρότυπο στατιστικής φυσικής που 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 σ_i που τοποθετείται εκεί παριστάνει την τοπική «κατάσταση» του συστήματος σε εκείνο το σημείο.

Σε αντίθεση με το μοντέλο Ising, όπου κάθε spin μπορεί να λάβει δύο μόνο τιμές ($\sigma_i = \pm 1$), στο Potts μοντέλο κάθε spin μπορεί να λάβει μία από q διακριτές καταστάσεις:

$$\sigma_i \in \{1, 2, \dots, q\}$$

Το σύστημα θεωρείται τοποθετημένο σε ένα δισδιάστατο ή τρισδιάστατο πλέγμα (π.χ. κυβικό καρτεσιανό πλέγμα), με αλληλεπιδράσεις μεταξύ γειτονικών κόμβων. Ορίζοντας ως $\langle i, j \rangle$ τα ζεύγη γειτονικών κόμβων (π.χ. πρώτοι γείτονες), η Χαμιλτονιανή του συστήματος (σε απουσία εξωτερικού πεδίου) δίνεται από:

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

όπου:

- J είναι η σταθερά αλληλεπίδρασης, η οποία ρυθμίζει την «τάση ευθυγράμμισης» μεταξύ γειτονικών spins. Για $J > 0$, το σύστημα είναι σιδηρομαγνητικό και ευνοεί την ομοιομορφία (ευθυγράμμιση).
- $\delta_{\sigma_i, \sigma_j}$ είναι η συνάρτηση Kronecker: 1 αν $\sigma_i = \sigma_j$, διαφορετικά 0.
- Το άθροισμα εκτελείται σε όλα τα γειτονικά ζεύγη κόμβων.

Ουσιαστικά, η ενέργεια του συστήματος μειώνεται όταν δύο γειτονικά spins βρίσκονται στην ίδια κατάσταση. Έτσι, το μοντέλο περιγράφει την τάση του συστήματος να σχηματίζει «domains» — περιοχές του πλέγματος όπου πολλές συνεχόμενες θέσεις έχουν την ίδια τιμή σ_i . Η συμπεριφορά αυτή είναι χαρακτηριστική σε φαινόμενα φασικής μετάβασης, όπως η μετάβαση από αποδιοργανωμένες σε οργανωμένες φάσεις με τη μεταβολή της θερμοκρασίας.

Ερμηνεία των καταστάσεων σ_i

Οι καταστάσεις $\sigma_i \in \{1, 2, \dots, q\}$ δεν διαθέτουν αριθμητική σημασία καθαυτές. Αντιπροσωπεύουν γενικά διακριτούς δείκτες που προσδιορίζουν την κατάσταση

ενός κόμβου του πλέγματος, χωρίς το ίδιο το σύστημα να ενδιαφέρεται για την ποσοτική διαφορά μεταξύ τους. Ο καθοριστικός παράγοντας στην ενεργειακή συμπεριφορά είναι το αν δύο γειτονικά spins συμφωνούν ή όχι — όχι πόσο «διαφέρουν».

Ωστόσο, σε πολλές φυσικές εφαρμογές, αυτές οι διακριτές καταστάσεις μπορούν να αντιστοιχούν σε ποσοτικά μετρήσιμες αλλά ασυνεχείς τιμές φυσικών μεγεθών. Για παράδειγμα, σε συστήματα με διακριτούς προσανατολισμούς, φάσεις υλικών ή ακόμη και στάδια βιολογικής ανάπτυξης, κάθε κατάσταση σ_i συνδέεται με διαφορετική φυσική ιδιότητα. Σε τέτοιες περιπτώσεις, το μοντέλο Potts λειτουργεί ως αφαιρετικό σχήμα που συμπεριλαμβάνει τα ποιοτικά χαρακτηριστικά των φάσεων, διατηρώντας ταυτόχρονα την ευκολία της διακριτής περιγραφής.

Πίνακας 2.1: Παραδείγματα φυσικών συστημάτων και ερμηνεία των καταστάσεων σ_i

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

2.2 Τιμές q και σύνδεση με γνωστά μοντέλα

Το μοντέλο Potts παρουσιάζει διαφορετική φυσική συμπεριφορά και θεωρητικές συνδέσεις ανάλογα με την τιμή της παραμέτρου q , η οποία καθορίζει τον αριθμό των δυνατών καταστάσεων ανά spin. Ορισμένες χαρακτηριστικές περιπτώσεις έχουν ιδιαίτερη σημασία:

- **Για $q = 2$:** το μοντέλο Potts ταυτίζεται με το γνωστό μοντέλο Ising. Σε αυτή την περίπτωση, κάθε spin μπορεί να πάρει μόνο δύο τιμές και η φασική μετάβαση του συστήματος έχει μελετηθεί εκτενώς, τόσο αναλυτικά όσο και αριθμητικά, σε διάφορες διαστάσεις[5].
- **Για $q = 1$:** το μοντέλο δεν έχει φυσική ερμηνεία μεμονωμένων spins, ωστόσο παραμένει μαθηματικά ορισμένο. Συνδέεται με το bond percolation, μέσω της σχέσης του Potts μοντέλου με την αναπαράσταση Fortuin–Kasteleyn[6].

Σε αυτή την ερμηνεία, η φασική μετάβαση αντιστοιχεί στην εμφάνιση ενός μακροσκοπικού συσσωματώματος στο πλέγμα.

- **Για $q \rightarrow \infty$:** το σύστημα παραμένει αποδιοργανωμένο σε όλες τις θερμοκρασίες, καθώς η επιβολή ενέργειας σύμπτωσης γίνεται ασθενής. Η κατάσταση ελάχιστης ενέργειας είναι πλήρως εκφυλισμένη, και η πιθανότητα συμφωνίας γειτονικών spins τείνει στο μηδέν.
- **Για $q = 3$:** αποτελεί την κεντρική περίπτωση της παρούσας εργασίας. Το μοντέλο εμφανίζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον λόγω της μεταβατικής συμπεριφοράς του. Στη δισδιάστατη περίπτωση ($d = 2$), η μετάβαση είναι συνεχής (δεύτερης τάξης), ενώ στην τρισδιάστατη περίπτωση ($d = 3$), παρουσιάζει χαρακτηριστικά ασθενούς πρώτης τάξης μετάβασης — με μικρό αλλά πεπερασμένο άλμα στην ενέργεια και τον μαγνητισμό. Η μετάβαση είναι δύσκολο να ανιχνευθεί αριθμητικά και απαιτεί εξειδικευμένες τεχνικές όπως επαναβαθμονόμηση (reweighting) και ανάλυση πεπερασμένου μεγέθους (finite-size scaling).

2.3 Φασικές Μεταβάσεις και Κρίσιμα Φαινόμενα

Οι φασικές μεταβάσεις αποτελούν κεντρικό θέμα της στατιστικής φυσικής, καθώς περιγράφουν δραστικές αλλαγές στη μακροσκοπική συμπεριφορά ενός συστήματος όταν μεταβάλλεται μια εξωτερική παράμετρος, συνήθως η θερμοκρασία. Κατά τη μετάβαση από τη μία φάση στην άλλη, ορισμένες φυσικές ποσότητες εμφανίζουν χαρακτηριστικές ασυνέχειες ή ιδιομορφίες.

Οι μεταβάσεις διακρίνονται γενικά σε δύο κύριες κατηγορίες:

- **Μεταβάσεις πρώτης τάξης**, όπου παρατηρούνται ασυνέχειες σε παρατηρήσιμα μεγέθη, όπως η ενέργεια ή ο μαγνητισμός. Χαρακτηριστικό γνώρισμα αποτελεί η εμφάνιση λανθάνουσας θερμότητας.
- **Μεταβάσεις δεύτερης τάξης** (ή συνεχείς), κατά τις οποίες οι θερμοδυναμικές συναρτήσεις είναι συνεχείς, αλλά οι παραγώγοι τους παρουσιάζουν ιδιομορφίες (π.χ. η ειδική θερμότητα γίνεται μη αναλυτική στο κρίσιμο σημείο).

Η συμπεριφορά κοντά στο κρίσιμο σημείο περιγράφεται από τους **κρίσιμους εκθέτες** ($\alpha, \beta, \gamma, \nu$, κ.ά.), οι οποίοι χαρακτηρίζουν την καθολική συμπεριφορά του συστήματος και είναι ανεξάρτητοι από τις μικρολεπτομέρειες του μοντέλου[7]. Τα μεγέθη που παρουσιάζουν κρίσιμη συμπεριφορά περιλαμβάνουν, μεταξύ άλλων, την ειδική θερμότητα C , τον μαγνητισμό M και τη διασπορά του μαγνητισμού.

2.3.1 Διαστάσεις και φασική συμπεριφορά

Η φασική συμπεριφορά του Potts μοντέλου εξαρτάται ουσιαστικά από δύο παραμέτρους:

- τη χωρική διάσταση d του συστήματος,
- τον αριθμό διαθέσιμων καταστάσεων q .

Στη δισδιάστατη περίπτωση ($d = 2$), το μοντέλο είναι αναλυτικά λυμένο και παρουσιάζει:

- συνεχή (δεύτερης τάξης) μετάβαση για $q \leq 4$,
- ασυνεχή (πρώτης τάξης) μετάβαση για $q > 4$.

Αντίθετα, **στην τρισδιάστατη περίπτωση** ($d = 3$), η συμπεριφορά δεν είναι πλήρως αναλυτικά γνωστή και απαιτεί αριθμητική διερεύνηση. Ειδικότερα:

- Για $q = 2$: παρατηρείται συνεχής μετάβαση τύπου Ising.
- Για $q = 3$: η μετάβαση χαρακτηρίζεται ως ασθενώς πρώτης τάξης — δηλαδή υπάρχει μικρό αλλά πεπερασμένο άλμα στην ενέργεια και στον μαγνητισμό, με χαρακτηριστικά που προσεγγίζουν συνεχή μετάβαση σε πεπερασμένα συστήματα.
- Για $q \geq 4$: η μετάβαση είναι συνήθως πρώτης τάξης, συνδεδεμένη με μία λανθάνουσα θερμότητα (latent heat). Αυτή η λανθάνουσα θερμότητα αντιστοιχεί στην ενέργεια που απορροφάται ή εκλύεται κατά την αλλαγή φάσης.

Η περίπτωση $q = 3$ στην τρισδιάστατη γεωμετρία αποτελεί ιδιαίτερο ενδιαφέρον, καθώς βρίσκεται στο μεταίχμιο μεταξύ συνεχούς και ασυνεχούς φασικής συμπεριφοράς. Η σαφής διάκριση απαιτεί προσεκτική ανάλυση με τεχνικές όπως το finite-size scaling, καθώς οι ενδείξεις πρώτης τάξης εμφανίζονται εξασθενημένες.

2.3.2 Συμμετρίες και κατανομή καταστάσεων

Το Potts μοντέλο διαθέτει συμμετρία ανταλλαγής μεταξύ των διαθέσιμων καταστάσεων $\sigma = 1, 2, \dots, q$, που περιγράφεται από την ομάδα συμμετρίας S_q . Όλες οι καταστάσεις είναι ισοδύναμες όταν δεν υπάρχει εξωτερικό πεδίο — δηλαδή η ενέργεια του συστήματος παραμένει αμετάβλητη υπό αυθαίρετη ανταλλαγή των δεικτών κατάστασης.

Σε χαμηλές θερμοκρασίες, το σύστημα τείνει να ευθυγραμμιστεί σε μία μόνο κυρίαρχη κατάσταση, με αποτέλεσμα το σπάσιμο της συμμετρίας: παρατηρείται

δηλαδή αυθόρμητο σπάσιμο συμμετρίας (spontaneous symmetry breaking), και το σύνολο των spins συγκεντρώνεται κυρίως γύρω από έναν από τους q δυνατούς δείκτες[5].

Αντίθετα, σε υψηλές θερμοκρασίες, οι θερμικές διακυμάνσεις υπερτερούν της τάσης για ευθυγράμμιση, και οι καταστάσεις κατανέμονται κατά προσέγγιση ομοιόμορφα.

2.4 Εξωτερικό Μαγνητικό Πεδίο στο Μοντέλο Potts

Η εισαγωγή ενός εξωτερικού πεδίου h , που ευνοεί ενεργειακά μία συγκεκριμένη κατάσταση σ , τροποποιεί την Χαμιλτονιανή ως εξής:

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

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.

Αυτό το κρίσιμο σημείο ανήκει στην καθολική κλάση (universality class) του τρισδιάστατου μοντέλου Ising, δηλαδή παρουσιάζει κοινά κρίσιμα χαρακτηριστικά και κρίσιμους εκθέτες με αυτό, ανεξάρτητα από τις λεπτομέρειες του Potts μοντέλου. Η έννοια της καθολικής κλάσης εκφράζει την ιδιότητα ότι διαφορετικά συστήματα παρουσιάζουν παρόμοια συμπεριφορά κοντά στο κρίσιμο σημείο.

Για τιμές του πεδίου h μεγαλύτερες από το h_c , η φασική μετάβαση εξομαλύνεται και μετατρέπεται σε ομαλή μεταβολή των φυσικών μεγεθών, χωρίς απότομες αλλαγές — αυτό το φαινόμενο ονομάζεται *crossover*. Σε αυτή την περιοχή, το σύστημα μεταβαίνει ομαλά ανάμεσα στις φάσεις χωρίς την ύπαρξη αυστηρού ορίου φάσης.

Το κρίσιμο πεδίο h_c αποτελεί σημαντικό σημείο αναφοράς στην ανάλυση του Potts μοντέλου υπό εξωτερικό πεδίο. Σε πειραματικές ή αριθμητικές προσομοιώσεις, ο προσδιορισμός του h_c είναι καθοριστικός για την κατανόηση της αλλαγής στη φύση της φασικής μετάβασης και για τον χαρακτηρισμό του κρίσιμου σημείου δεύτερης τάξης. Η ακριβής εκτίμηση του h_c επιτρέπει την εφαρμογή τεχνικών όπως το *finite-size scaling* και τη σύγκριση με θεωρητικές προβλέψεις καθολικότητας, παρέχοντας βαθύτερη κατανόηση της κρίσιμης συμπεριφοράς του συστήματος[8].

Το εξωτερικό πεδίο επηρεάζει επίσης την κατανομή πιθανότητας των καταστάσεων, αυξάνοντας την προτίμηση για την ευνοούμενη κατάσταση, και συνεπώς τροποποιεί τα θερμοδυναμικά μεγέθη, όπως ο μαγνητισμός και η ενέργεια του συστήματος.

2.5 Θερμοδυναμικά Μεγέθη και Παρατηρήσιμα

Στο πλαίσιο του μοντέλου Potts, τα βασικά θερμοδυναμικά παρατηρήσιμα μεγέθη που υπολογίζονται είναι τα εξής:

Πίνακας 2.2: Παρατηρήσιμα θερμοδυναμικά μεγέθη στο μοντέλο Potts (με και χωρίς εξωτερικό πεδίο)

Ποσότητα (Quantity)	Ορισμός (Definition)
Χαμιλτονιανή χωρίς πεδίο	$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{\sigma_i, \sigma_j}$
Χαμιλτονιανή με πεδίο	$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} - h \sum_i \delta_{\sigma_i, \sigma^*}$
Ενέργεια ανά spin	$E = \frac{\langle H \rangle}{N}$
Μαγνητισμός	$M = \left\langle \frac{q \cdot \max_{\alpha} (n_{\alpha}/N) - 1}{q-1} \right\rangle$
Ειδική θερμότητα	$C = \frac{1}{NT^2} (\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2)$
Μαγνητική επιδεκτικότητα	$\chi = \frac{1}{NT} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2)$

Όπου:

- N : συνολικός αριθμός spins
- σ^* : η κατάσταση που ευνοείται από το εξωτερικό πεδίο
- n_{α} : αριθμός spins στην κατάσταση α
- $\langle \cdot \rangle$: θερμοδυναμικός μέσος όρος
- T : θερμοκρασία

Τα μεγέθη αυτά αποτυπώνουν τη μακροσκοπική συμπεριφορά του συστήματος και χρησιμοποιούνται για την ανάλυση φασικών μεταβάσεων και κρίσιμων φαινομένων[9].

Επεξηγήσεις:

- Η Χαμιλτονιανή με πεδίο περιλαμβάνει έναν όρο που ευνοεί την κατάσταση σ^* . Το εξωτερικό πεδίο h προκαταλαμβάνει το σύστημα προς αυτή την κατάσταση, σπάζοντας τη συμμετρία μεταξύ των q καταστάσεων.
- Ο μαγνητισμός στο Potts μοντέλο δεν είναι διάνυσμα όπως στο Ising, αλλά μετρά το πόσο κυριαρχεί μία κατάσταση α έναντι των υπολοίπων. Η τιμή $M = 1$ σημαίνει απόλυτη κυριαρχία μιας κατάστασης, ενώ $M = 0$ ισοκατανομή.
- Η ειδική θερμότητα προκύπτει από τις διακυμάνσεις της ενέργειας μέσω της σχέσης $C \propto \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$ και φανερώνει τις ενεργειακές μεταβολές στο σύστημα. Όταν το σύστημα βρίσκεται κοντά σε φασική μετάβαση, οι ενεργειακές διακυμάνσεις αυξάνονται.

- Η μαγνητική επιδεκτικότητα (susceptibility) μετρά την απόκριση του συστήματος σε εξωτερικό πεδίο: δείχνει πόσο «εύκολα» ενισχύεται η επικρατούσα spin κατάσταση καθώς μεταβάλλεται η θερμοκρασία. Τα μέγιστα της υποδεικνύουν κρίσιμα σημεία ή ισχυρές συναθροίσεις γύρω από αυτά.

2.6 Καθολικότητα και Ανάλυση Πεπερασμένου Μεγέθους (Finite-Size Scaling)

Η **καθολικότητα (universality)** αποτελεί ένα θεμελιώδες χαρακτηριστικό των φασικών μεταβάσεων. Περιγράφει το γεγονός ότι εντελώς διαφορετικά φυσικά συστήματα μπορεί να εμφανίζουν όμοια κρίσιμη συμπεριφορά κοντά στο σημείο μετάβασης, παρά τις διαφορετικές μικροσκοπικές τους λεπτομέρειες[7]. Τα συστήματα αυτά κατατάσσονται σε κλάσεις καθολικότητας, οι οποίες καθορίζονται από:

- τη χωρική διάσταση d ,
- την παράμετρο τάξης,
- και τη φύση των αλληλεπιδράσεων στο σύστημα.

Η **παράμετρος τάξης (order parameter)** είναι ένα φυσικό μέγεθος που διακρίνει τις δύο φάσεις ενός συστήματος: παίρνει μη μηδενική τιμή στη φάση όπου υπάρχει μακροσκοπική τάξη (π.χ. ευνοούμενη spin κατάσταση), και τείνει στο μηδέν στην άτακτη ή «συμμετρική» φάση, όπου οι καταστάσεις εμφανίζονται περίπου ισοκαταναεμημένες.

Σε αριθμητικές προσομοιώσεις, όπου το πλέγμα έχει πεπερασμένο μέγεθος, η φασική μετάβαση δεν εκδηλώνεται ως απότομη αλλαγή, όπως θα συνέβαινε στο θερμοδυναμικό όριο, αλλά παρουσιάζει ομαλές μεταβολές. Αυτή η «εξομάλυνση» είναι αποτέλεσμα του περιορισμένου αριθμού βαθμών ελευθερίας και της αδυναμίας εμφάνισης πραγματικής ασυνέχειας. Παρ' όλα αυτά, 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.

Συγκεκριμένα, για ένα σύστημα με γραμμική διάσταση L , κοντά στο κρίσιμο σημείο, ισχύουν οι σχέσεις:

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

όπου $\alpha, \beta, \gamma, \nu$ 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* [10]. Αυτή η συμπεριφορά αποτελεί ένδειξη ότι το σύστημα ακολουθεί την αναμενόμενη κρίσιμη κλιμάκωση και ανήκει στην αντίστοιχη καθολική κλάση.

Πίνακας 2.3: Τυπικοί κρίσιμοι εκθέτες για διάφορες κλάσεις καθολικότητας, συμπεριλαμβανομένου του 3D Potts με $q = 3$

Μοντέλο (Model)	α	β	γ	ν
Ising 2D	0	1/8	7/4	1
Ising 3D	≈ 0.110	≈ 0.326	≈ 1.237	≈ 0.630
Potts 2D, $q = 3$	1/3	1/9	13/9	5/6
Potts 2D, $q = 4$	2/3	1/12	7/6	2/3
Potts 3D, $q = 3$	≈ -0.011	≈ 0.351	≈ 1.309	≈ 0.630

2.7 Δείκτης Binder (Binder Cumulant)

Ο δείκτης Binder, ή αλλιώς *Binder cumulant*, αποτελεί ένα σημαντικό εργαλείο στη μελέτη φασικών μεταβάσεων, ειδικά σε πεπερασμένα συστήματα (finite-size systems). Προσφέρει τη δυνατότητα προσδιορισμού της **κρίσιμης θερμοκρασίας** καθώς και της **τάξης της φασικής μετάβασης**, χωρίς την ανάγκη παραγώγων ή προσεγγίσεων στο θερμοδυναμικό όριο.

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

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

Ερμηνεία:

- Για **υψηλές θερμοκρασίες** ($T \gg T_c$), το σύστημα βρίσκεται σε άτακτη φάση (disordered) και οι διακυμάνσεις του μαγνητισμού είναι μικρές και περίπου Γκαουσιανές, με αποτέλεσμα $B_4 \approx 0$.
- Για **χαμηλές θερμοκρασίες** ($T \ll T_c$), το σύστημα είναι διατεταγμένο (ordered phase) και μία κατάσταση κυριαρχεί, οπότε $B_4 \rightarrow \frac{2}{3}$.
- Στην **κρίσιμη θερμοκρασία** T_c , οι καμπύλες του $B_4(T)$ για διαφορετικά μεγέθη συστήματος L τέμνονται περίπου στο ίδιο σημείο. Το σημείο αυτό αποτελεί καλή εκτίμηση του T_c στο θερμοδυναμικό όριο.

Ιδιότητες και χρήσεις:

- Ο B_4 είναι **αδιάστατο μέγεθος**, επιτρέποντας σύγκριση μεταξύ διαφορετικών μεγεθών πλέγματος.

- Είναι ανεξάρτητο από την ανάγκη υπολογισμού παραγώγων θερμοδυναμικών μεγεθών.
- Μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να διακρίνει μεταβάσεις **πρώτης** και **δεύτερης τάξης**:
 - Σε μεταβάσεις πρώτης τάξης, οι καμπύλες δεν τέμνονται καθαρά ή έχουν έντονο ελάχιστο στο T_c .
 - Σε μεταβάσεις δεύτερης τάξης, οι καμπύλες τέμνονται καθαρά και συγκλίνουν με το L .

Στο πλαίσιο του μοντέλου Potts (3D, $q = 3$, με εξωτερικό πεδίο):

- Ο υπολογισμός του B_4 επιτρέπει την πιο ακριβή εκτίμηση της κρίσιμης θερμοκρασίας σε σύγκριση με τις συμβατικές μεθόδους.
- Εξετάζει αν και πώς η παρουσία εξωτερικού πεδίου h επηρεάζει τη φύση της φασικής μετάβασης σε σχέση με την περίπτωση $h = 0$.

Η εισαγωγή του Binder cumulant αποτελεί θεμελιώδες στοιχείο σε προσομοιώσεις τύπου Monte Carlo και χρησιμοποιείται ευρέως σε μελέτες φασικών μεταβάσεων μικρού μεγέθους [11].

2.8 Κρίσιμο Σημείο: Scaling Fields και Operator Mixing στο Critical Endpoint

Στην παρουσία ενός μη μηδενικού εξωτερικού πεδίου, το τρισδιάστατο μοντέλο Potts με $q = 3$ εμφανίζει μια γραμμή φασικής μετάβασης πρώτης τάξης στο πεδίο των παραμέτρων (β, h) . Αυτή η γραμμή τερματίζει σε ένα κρίσιμο σημείο τερματισμού (critical endpoint) (β_c, h_c) , πέρα από το οποίο δεν παρατηρείται απότομη φασική μετάβαση. Στο κρίσιμο αυτό σημείο, οι τυπικές θερμοδυναμικές μεταβλητές—η ενέργεια E και η μαγνήτιση M —δεν ευθυγραμμίζονται πλέον με τις σχετικές διευθύνσεις που καθορίζουν την κρίσιμη συμπεριφορά του συστήματος.

Η Χαμιλτονιανή του μοντέλου Potts με εξωτερικό πεδίο γράφεται ως:

$$\mathcal{H} = -\beta E - hM,$$

όπου $\beta = 1/T$ είναι η αντίστροφη θερμοκρασία και h το εξωτερικό πεδίο που συζεύγνυνται με την ενέργεια και τη μαγνήτιση. Αυτοί είναι οι φυσικοί συζεύκτες μακριά από το κρίσιμο σημείο. Ωστόσο, κοντά στο κρίσιμο σημείο, δεν αντιστοιχούν στις σωστές κατευθύνσεις κλίμακας (scaling directions).

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*) [12]. Αυτοί δίνονται από:

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

όπου η τ λειτουργεί ως η συνάρτηση-πεδίο θερμοκρασιακού τύπου (*temperature-like field*) και η ξ ως η συνάρτηση-πεδίο σπασίματος-συμμετρίας (*symmetry-breaking field*). Οι παράμετροι ανάμειξης (*mixing parameters*) r και s καθορίζουν τον προσανατολισμό αυτών των αξόνων κλίμακας σε σχέση με το αρχικό σύστημα (β, h) .

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

$$\tilde{E} = E + rM, \quad \tilde{M} = M + sE,$$

όπου οι $\tilde{E}$ και $\tilde{M}$ είναι (*order parameter-like operators*) κατά τις νέες διευθύνσεις. Αυτή η επαναπροσδιορισμός έχει σημαντικές επιπτώσεις:

1. **Ταυτοποίηση των κατευθύνσεων κλίμακας:** Οι κρίσιμες διακυμάνσεις δεν συμβαίνουν πλέον κατά μήκος των β και h , αλλά κατά μήκος των τ και ξ . Η περιστροφή που ορίζεται από τα r και s είναι επομένως απαραίτητη για τη σωστή ανάλυση του κρίσιμου σημείου. Αυτές οι νέες μεταβλητές επιτρέπουν την εφαρμογή της θεωρίας κλίμακας πεπερασμένου μεγέθους (*finite-size scaling*) και την σύγκριση του μοντέλου Potts με άλλα συστήματα της ίδιας κλάσης καθολικότητας (*universality class*), όπως το τρισδιάστατο μοντέλο Ising.
2. **Διαγώνια μορφή των διακυμάνσεων:** Η παράμετρος ανάμειξης s προσδιορίζεται από την απαίτηση ότι οι μίξεις των παρατηρήσιμων είναι στατιστικά μη συσχετιζόμενες:

$$\langle \delta \tilde{E} \cdot \delta \tilde{M} \rangle = 0.$$

Αυτό εξασφαλίζει ότι οι $\tilde{E}$ και $\tilde{M}$ αντιστοιχούν σε ανεξάρτητες κατευθύνσεις κλίμακας, απλοποιώντας την ερμηνεία θερμοδυναμικών μεγεθών όπως η ευαισθησία (*susceptibility*) και η ειδική θερμότητα (*specific heat*).

3. **Καθολικότητα και Θεωρητικός Χάρτης:** Η περιστροφή των συζεύξεων (*couplings*) είναι ανάλογη με άλλες φυσικές καταστάσεις με κρίσιμα σημεία τερματισμού, όπως η μετάβαση υγρού-αερίου ή το φασικό διάγραμμα του QCD στο επίπεδο (T, μ_B) . Σε όλα αυτά τα συστήματα, η ορθή ταυτοποίηση των βαθμωτών παραγόντων κλίμακας είναι απαραίτητη για την κατανόηση της καθολικής κρίσιμης συμπεριφοράς. Συνεπώς, ο υπολογισμός των r και s προσφέρει τη δυνατότητα σύνδεσης του μοντέλου Potts με πιο σύνθετα φυσικά συστήματα.

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 $\beta_c(h)$ στο κρίσιμο σημείο τερματισμού. Συγκεκριμένα, η κλίση αυτής της γραμμής στο $h = h_c$ καθορίζει την παράμετρο ανάμειξης r μέσω της σχέσης:

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

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

Η θεωρητική αυτή προσέγγιση αποτελεί το θεμέλιο για την ορθή ταυτοποίηση της κρίσιμης συμπεριφοράς κοντά στο σημείο τερματισμού και είναι απαραίτητη για την ουσιαστική αριθμητική ανάλυση.

2.9 Αριθμητικές Μέθοδοι Προσομοίωσης

Η αριθμητική προσομοίωση αποτελεί βασικό εργαλείο για τη μελέτη του μοντέλου Potts σε τρεις διαστάσεις, ιδίως στην περιοχή της κρίσιμης συμπεριφοράς. Οι στοχαστικές μέθοδοι Monte Carlo επιτρέπουν την προσέγγιση θερμοδυναμικών μεγεθών μέσω δειγματοληψίας από την κατανομή Boltzmann, παρέχοντας αξιόπιστα αποτελέσματα για πεπερασμένα μεγέθη συστήματος.

2.9.1 Μέθοδος Monte Carlo

Η μέθοδος Monte Carlo εφαρμόζεται ευρέως σε στατιστικά φυσικά συστήματα για τον υπολογισμό θερμοδυναμικών μέσων τιμών μέσω στοχαστικής δειγματοληψίας[3]. Αντί να υπολογίζονται όλες οι πιθανές καταστάσεις του συστήματος — κάτι πρακτικά αδύνατο για πλέγματα μεγάλου μεγέθους—, η προσέγγιση στηρίζεται στη δειγματοληψία από το σύνολο καταστάσεων με πιθανότητες κατανομής Boltzmann. Με αυτόν τον τρόπο, οι θερμοδυναμικές ποσότητες (όπως ενέργεια, μαγνήτιση, ειδική θερμότητα κ.ά.) υπολογίζονται ως μέσοι όροι σε ένα αντιπροσωπευτικό υποσύνολο καταστάσεων.

Η διαδικασία βασίζεται στη δημιουργία μιας αλυσίδας από διαδοχικές καταστάσεις του συστήματος (αλυσίδα Markov), στην οποία κάθε νέα κατάσταση εξαρτάται μόνο από την προηγούμενη. Οι κανόνες μετάβασης επιλέγονται έτσι ώστε η αλυσίδα να συγκλίνει στην κατανομή Boltzmann, η οποία περιγράφει την ισορροπία του συστήματος σε δεδομένη θερμοκρασία. Η σωστή επιλογή αυτών των κανόνων είναι ιδιαίτερης σημασίας για την αποδοτική εξερεύνηση του χώρου καταστάσεων και την επίτευξη στατιστικά ανεξάρτητων μετρήσεων.

2.9.2 Αλγόριθμος Metropolis

Ο αλγόριθμος Metropolis είναι η πιο διαδεδομένη τεχνική Monte Carlo για προσομοιώσεις θερμικής ισορροπίας[13]. Προτείνει τυχαίες τοπικές μεταβολές στην κατάσταση του συστήματος—για παράδειγμα, αλλαγή της κατάστασης ενός σπιν στο πλέγμα— και αποφασίζει αν η νέα διαμόρφωση θα γίνει αποδεκτή με βάση ενεργειακά κριτήρια.

Συγκεκριμένα, εάν η νέα κατάσταση έχει χαμηλότερη ενέργεια από την προηγούμενη, γίνεται πάντοτε αποδεκτή. Αντίθετα, αν η ενέργεια αυξάνεται κατά ΔE , η μετάβαση αποδέχεται με πιθανότητα

$$P = \min(1, e^{-\beta \Delta E}),$$

όπου $\beta = 1/(k_B T)$ είναι η αντίστροφη θερμοκρασία.

Η διαδικασία αυτή εξασφαλίζει ότι η τελική κατανομή καταστάσεων ακολουθεί την κατανομή Boltzmann, ικανοποιώντας τη συνθήκη λεπτομερούς ισορροπίας (*detailed balance*) [10]. Η στατιστική σημασία αυτής της κατανομής έγκειται στο ότι περιγράφει την πιθανότητα να βρίσκεται το σύστημα σε μια δεδομένη κατάσταση σε θερμική ισορροπία.

Ο αλγόριθμος αυτός είναι εξαιρετικά απλός στην υλοποίηση, όμως παρουσιάζει προβλήματα κοντά σε κρίσιμες θερμοκρασίες λόγω της εμφάνισης κρίσιμης επιβράδυνσης (*critical slowing down*), όπου η συσχέτιση μεταξύ διαδοχικών καταστάσεων αυξάνεται σημαντικά. Για τον λόγο αυτό, συχνά συνδυάζεται ή αντικαθίσταται από πιο αποδοτικές τεχνικές σε κρίσιμα σημεία.

2.9.3 Μέθοδος Ferrenberg–Swendsen

Η μέθοδος Ferrenberg–Swendsen αποτελεί μια ισχυρή τεχνική ανάλυσης δεδομένων Monte Carlo, που επιτρέπει την εξαγωγή θερμοδυναμικών μεγεθών σε ευρύτερο φάσμα θερμοκρασιών από αυτό που καλύπτει άμεσα η προσομοίωση. Βασίζεται στην επανασταθμισμένη δειγματοληψία (*reweighting*): εφόσον έχει αποκτηθεί δείγμα καταστάσεων από μια συγκεκριμένη θερμοκρασία β_0 , μπορούμε να ανακατασκευάσουμε τις θερμοδυναμικές ιδιότητες σε γειτονικές θερμοκρασίες β' εφαρμόζοντας στατιστικά βάρη στα δεδομένα που έχουν ήδη συλλεχθεί.

Η πιθανότητα εμφάνισης μιας κατάστασης με ενέργεια E_i σε θερμοκρασία β' σχετίζεται με την αντίστοιχη σε β_0 μέσω του λόγου:

$$w_i = \exp[-(\beta' - \beta_0)E_i] = \exp(-\Delta\beta E_i)$$

Όπου $\Delta\beta = \beta' - \beta_0$. Τα βάρη w_i χρησιμοποιούνται για την επανασταθμισμένη εκτίμηση παρατηρήσιμων μεγεθών, όπως η μέση ενέργεια, η μαγνήτιση, η ειδική θερμότητα, η μαγνητική επιδεκτικότητα και η παράμετρος Binder. Η τεχνική αυτή

είναι ιδιαίτερα χρήσιμη στη μελέτη φασικών μεταβάσεων, καθώς επιτρέπει την ακριβέστερη προσέγγιση της κρίσιμης θερμοκρασίας και των αντίστοιχων κρίσιμων εκθετών. Αξιοποιώντας αποτελεσματικά τα ήδη διαθέσιμα δεδομένα, προσφέρει σημαντική υπολογιστική οικονομία και στατιστική ακρίβεια.

Ωστόσο, η εφαρμοσιμότητα της μεθόδου εξαρτάται από το κατά πόσον οι κατανομές ενέργειας στις θερμοκρασίες β_0 και β' **επικαλύπτονται επαρκώς (overlap condition)**[2]. Αν η διασπορά της κατανομής ενέργειας είναι μικρή ή η απόσταση $\Delta\beta$ είναι μεγάλη, τότε το βάρος των περισσότερων δειγμάτων γίνεται αμελητέο και η στατιστική ακρίβεια υποβαθμίζεται δραματικά. Γι' αυτό, στην παρούσα εργασία ελέγχεται το άθροισμα των βαρών w_i , ώστε να εντοπιστούν περιοχές κακής στατιστικής ποιότητας. Αν το $\sum_i w_i$ προσεγγίζει το μηδέν, η επανασταθμισμένη κατανομή καθίσταται μη αξιόπιστη.

Επιπλέον, αναλύονται και καταγράφονται οι *κατανομές των παρατηρούμενων μεγεθών* (E, M) σε κάθε θερμοκρασία μέσω των επανασταθμισμένων μέσων τιμών και διακυμάνσεων. Αυτό επιτρέπει την ακριβή εκτίμηση της ειδικής θερμότητας C_v και της επιδεκτικότητας χ , καθώς και τον υπολογισμό της παραμέτρου Binder:

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

Έτσι η χρήση της μεθόδου Ferrenberg–Swendsen στην παρούσα εργασία όχι μόνο παρέχει βελτιωμένη στατιστική ακρίβεια, αλλά επιτρέπει και τη λεπτομερή σάρωση της θερμοκρασιακής εξάρτησης των παρατηρήσιμων μεγεθών, χωρίς την ανάγκη για ξεχωριστές προσομοιώσεις.

3 Μέθοδοι Αριθμητικής Προσομοίωσης και Υπολογιστική Μεθοδολογία

Στο παρόν κεφάλαιο παρουσιάζεται η υπολογιστική προσέγγιση που ακολουθήθηκε για τη μελέτη του τρισδιάστατου μοντέλου Potts με $q = 3$ καταστάσεις, αρχικά η διαμόρφωση του πλέγματος και οι συνοριακές συνθήκες που εφαρμόστηκαν, καθώς και η εσωτερική δομή του κώδικα προσομοίωσης. Ιδιαίτερη έμφαση δίνεται στην υλοποίηση του αλγορίθμου Metropolis, η οποία πραγματοποιήθηκε με δυνατότητα εισαγωγής εξωτερικού μαγνητικού πεδίου (ως μίας εκ των παραμέτρων εισαγωγής), το οποίο ευννοεί μία από τις τρεις καταστάσεις του συστήματος. Επιπλέον, αναλύεται η τεχνική επανασταθμίσεως Ferrenberg–Swendsen, η οποία εφαρμόστηκε για τη βελτίωση της ακρίβειας κοντά στη κρίσιμη περιοχή. Όλες οι μέθοδοι παρουσιάζονται μέσω επιλεγμένων αποσπασμάτων του κώδικα που υλοποιήθηκε εξ ολοκλήρου στη γλώσσα Fortran.

Αντιθέτως, εργαλεία όπως ο γεννήτορας τυχαίων αριθμών, ο υπολογισμός των αυτοσυσχετίσεων και η εκτίμηση των σφαλμάτων μέσω της μεθόδου *jackknife* δεν παρουσιάζονται αναλυτικά, καθώς χρησιμοποιήθηκαν έτοιμοι κώδικες που παραχωρήθηκαν από τον επιβλέποντα. Η εστίαση του κεφαλαίου είναι στην αναλυτική περιγραφή των βασικών υπολογιστικών τεχνικών που σχεδιάστηκαν και υλοποιήθηκαν αποκλειστικά για τις ανάγκες της παρούσας εργασίας.

3.1 Δομή Πλέγματος και Αρχικοποίηση

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 $\sigma_i \in \{1, 2, 3\}$.

Το πλέγμα αναπαρίσταται στη μνήμη ως μονοδιάστατος πίνακας $s(N)$:

```
1 integer, allocatable :: s(:) ! Spin states array (q = 3)
```

Listing 1: Ορισμός του πίνακα spins

Η επιλογή μονοδιάστατου πίνακα αντί τρισδιάστατου έγινε ώστε να αποφεύγονται προβλήματα με αρνητικούς δείκτες, ειδικά κατά την υλοποίηση περιοδικών συνοριακών συνθηκών. Η μετατροπή από τρισδιάστατες συντεταγμένες σε γραμμική αρίθμηση υλοποιείται μέσω της συνάρτησης:

```
1 function index_3d(ix, iy, iz, L)
2 integer :: ix, iy, iz, L
3 integer :: index_3d
4 ! Convert 3D indices (ix, iy, iz) to a 1D index (1-based)
5 index_3d = ABS((ix - 1) + (iy - 1) * L + (iz - 1) * L * L + 1)
```

```
6 end function index_3d
```

Listing 2: Συνάρτηση μετατροπής 3D -> 1D δείκτη

Η χρήση αυτής της συνάρτησης εξασφαλίζει ασφαλή πρόσβαση σε όλα τα σημεία του πλέγματος και απλοποιεί την υλοποίηση των αλγορίθμων γειτονικότητας. Η τεχνική αυτή θα εξεταστεί πιο αναλυτικά στην ενότητα 3.2.

Εισαγωγή Παραμέτρων

Η αρχικοποίηση του πλέγματος πραγματοποιείται μέσω της υπορουτίνας `init`, η οποία ζητά από τον χρήστη τις βασικές παραμέτρους της προσομοίωσης μέσω του τερματικού:

```
1 print *, '#_Enter_L,_beta,_seed,_nsweep,_h(external_field),_
    start_(0_cold/1_hot):'
2 read *, L, beta, seed, nsweep, h, start
```

Listing 3: Εισαγωγή παραμέτρων από τον χρήστη

Ακολουθεί ο υπολογισμός του συνολικού αριθμού θέσεων και η δέσμευση μνήμης (allocation) για τον πίνακα `s`:

```
1 N = L * L * L
2 ALLOCATE(s(N))
3 if (.not. ALLOCATED(s)) then
4 print *, "Memory_allocation_for_s_failed."
5 stop
6 end if
```

Listing 4: Δέσμευση μνήμης και έλεγχος

Ο έλεγχος επιτυχούς δέσμευσης μνήμης (*memory allocation*) είναι κρίσιμος για την αξιοπιστία του κώδικα και προλαμβάνει σφάλματα σε μεγαλύτερες διαστάσεις πλέγματος.

Τύποι Αρχικοποίησης

Η επιλογή του τρόπου αρχικοποίησης του πλέγματος γίνεται βάσει της τιμής της μεταβλητής `start`, μέσω της εντολής `select case`. Παρέχονται δύο εναλλακτικές:

1. Ψυχρή αρχικοποίηση (cold start): Όλα τα spins τίθενται στην ίδια κατάσταση (π.χ. $\sigma = 1$):

```
1 case(0)
2 s = 1 ! Aligned state
```

Αντιπροσωπεύει μια πλήρως ευθυγραμμισμένη αρχική διαμόρφωση, που αντιστοιχεί σε ελάχιστη ενέργεια σε απουσία θερμικών διακυμάνσεων.

2. Θερμή αρχικοποίηση (hot start): Τα spins ανατίθενται τυχαία με ίσες πιθανότητες μεταξύ των τριών καταστάσεων, μέσω της χρήσης της γεννήτριας `drandom()`:

```
1 case(1)
2 do i = 1, N
3   if (drandom() < 1.0_dp / 3.0_dp) then
4     s(i) = 1
5   else if (drandom() < 2.0_dp / 3.0_dp) then
6     s(i) = 2
7   else
8     s(i) = 3
9   end if
10  end do
```

Listing 5: Θερμή αρχικοποίηση (τυχαίες καταστάσεις)

Η συνάρτηση `drandom()` προέρχεται από σημειώσεις του επιβλέποντος καθηγητή και χρησιμοποιείται με τη συγκατάθεσή του για την παραγωγή ομοιόμορφα κατανεμημένων τυχαίων αριθμών στο διάστημα $[0, 1)$.

Η δυνατότητα επιλογής μεταξύ `cold` και `hot start` επιτρέπει τη μελέτη της δυναμικής του συστήματος υπό διαφορετικές αρχικές συνθήκες και συμβάλλει στη διερεύνηση φαινομένων όπως η μετάβαση φάσης ή η υστέρηση[7].

3.2 Συνοριακές Συνθήκες

Για τη σωστή προσομοίωση του τρισδιάστατου μοντέλου Potts, είναι απαραίτητη η ορθή υλοποίηση των συνοριακών συνθηκών στο πλέγμα. Στην εργασία αυτή επιλέγονται **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.

Στην πράξη, οι περιοδικές συνοριακές συνθήκες επιβάλλουν ότι οι δείκτες που υπερβαίνουν τα όρια του πλέγματος επανέρχονται εντός του πλέγματος μέσω κυκλικής αντιστοίχισης, αποφεύγοντας έτσι τις επιδράσεις των άκρων.

Στην υλοποίηση, για την αποφυγή προβλημάτων με *αρνητικούς δείκτες*, που συνεπάγονται δείκτες εκτός εύρους των διανυσμάτων (allocatable arrays) στη Fortran, χρησιμοποιείται μια μονοδιάστατη αναπαράσταση του πλέγματος μέσω της συνάρτησης `index_3d`, η οποία αναφέρθηκε στην Υποενότητα 3.1. Με κατάλληλους μαθηματικούς χειρισμούς, όπως η χρήση της απόλυτης τιμής, η συνάρ-

τηση αυτή μετατρέπει τις τρισδιάστατες συντεταγμένες σε έναν γραμμικό δείκτη που λαμβάνει υπόψη τις περιοδικές συνοριακές συνθήκες.

Η χρήση αυτής της μεθόδου διευκολύνει την πρόσβαση στα στοιχεία του πλέγματος και διασφαλίζει ότι οι συνοριακές γειτονίες υλοποιούνται σωστά χωρίς να προκύπτουν μη αποδεκτοί δείκτες.

Η επιλογή των περιοδικών συνοριακών συνθηκών βασίζεται στη φυσική τους σημασία: επιτρέπουν τη μελέτη ενός ομοιογενούς και άπειρου συστήματος χωρίς σύνορα, μειώνοντας τις ανεπιθύμητες επιδράσεις των ακμών στη συμπεριφορά του συστήματος.

Τέλος, η ορθή υλοποίηση των συνοριακών συνθηκών είναι κρίσιμη για τη σταθερότητα και ακρίβεια του αλγορίθμου Metropolis που παρουσιάζεται στην επόμενη υποενότητα.

3.3 Αλγόριθμος Metropolis

Ο αλγόριθμος Metropolis αποτελεί βασικό εργαλείο για τη δειγματοληψία καταστάσεων σε Monte Carlo προσομοιώσεις συστημάτων. Στο πλαίσιο του τρισδιάστατου μοντέλου Potts με $q = 3$, χρησιμοποιείται για τη στατιστική εξερεύνηση του χώρου καταστάσεων με πιθανότητες σύμφωνες με την κατανομή Boltzmann επιτρέποντας την προσομοίωση της εξέλιξης του συστήματος προς θερμοδυναμική ισορροπία.

Σε κάθε βήμα του αλγορίθμου:

1. Επιλέγεται τυχαία ένας κόμβος (site) του πλέγματος.
2. Υπολογίζονται οι τρισδιάστατες συντεταγμένες του μέσω μετατροπής από μονοδιάστατο δείκτη, λαμβάνοντας υπόψη τις περιοδικές συνοριακές συνθήκες.
3. Προσδιορίζονται οι έξι πλησιέστεροι γείτονές του καθώς η αλληλεπίδραση μεταξύ των spins λαμβάνει υπόψη τους γειτονικούς κόμβους σε τρεις διαστάσεις (2 ανά άξονα). Οι περιοδικές συνοριακές συνθήκες υλοποιούνται μέσω του τελεστή MOD, ώστε οι δείκτες να επανέρχονται εντός του επιτρεπτού εύρους $[1, L]$. Για παράδειγμα, ο δείκτης $ix - 1$ υλοποιείται ως:

1	$XNN = \text{MOD}(ix - 2, L) + 1$
2	

Αυτό εξασφαλίζει ότι για $ix = 1$, ο γείτονας «αριστερά» είναι το στοιχείο L (κυκλική σύνδεση), αποτρέποντας την πρόσβαση σε μη έγκυρες θέσεις μνήμης και διατηρώντας τις περιοδικές συνοριακές συνθήκες σε όλες τις διαστάσεις του πλέγματος.

4. Υπολογίζεται η συνολική μεταβολή της ενέργειας του συστήματος από μια ενδεχόμενη αλλαγή του spin, η οποία περιλαμβάνει:

- την αλληλεπίδραση με τους γείτονες ($dE_{\text{interaction}}$), και
 - την επίδραση ενός εξωτερικού πεδίου (dE_{field}), το οποίο είναι **στο-χευμένα προκατειλημμένο** (*biased*) υπέρ της κατάστασης $s = 1$. Δηλαδή, το πεδίο ευνοεί τη μετάβαση σε αυτή την κατάσταση και αποθαρρύνει τις άλλες δύο.
5. Η αλλαγή της κατάστασης γίνεται αποδεκτή είτε αν η μεταβολή ενέργειας είναι αρνητική (ευνοϊκή), είτε με πιθανότητα $\exp(-\beta\Delta E)$ αν είναι θετική, σύμφωνα με το κριτήριο Metropolis.
 6. Σε περίπτωση αποδοχής, επιλέγεται νέα τυχαία τιμή για το spin από τις διαθέσιμες καταστάσεις $\{1, 2, 3\}$.

Η υλοποίηση αυτής της διαδικασίας πραγματοποιείται στη subroutine `met` στη γλώσσα Fortran, όπως φαίνεται στο ακόλουθο απόσπασμα:

```

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
    (ix, iy, iz)
11
12 ix = MOD(i - 1, L) + 1 ! X direction
13 iy = MOD((i - 1) / L, L) + 1 ! Y direction
14 iz = MOD(((i - 1) / (L * L)), L) + 1 ! Z direction
15
16 ! Calculation of neighboring spins (6 in total)
17 snn = 0
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
   κατάστασεις
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

```

Listing 6: Πλήρης υλοποίηση της υπορουτίνας met

Η χρήση των περιοδικών συνοριακών συνθηκών μέσω της MOD και της index_3d, σε συνδυασμό με την παρουσία εξωτερικού πεδίου, καθιστά την υλοποίηση κατάλληλη για τη μελέτη μεταβάσεων φάσης και φαινομένων συμμετρίας,

όπως η εμφάνιση προτιμώμενης φάσης σε χαμηλές θερμοκρασίες.

3.4 Εφαρμογή Εξωτερικού Μαγνητικού Πεδίου

Στην προηγούμενη ενότητα περιγράφηκε ο αλγόριθμος Metropolis και η ενσωμάτωσή του στο τρισδιάστατο μοντέλο Potts με $q = 3$. Ένα σημαντικό στοιχείο αυτής της υλοποίησης είναι η παρουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, το οποίο τροποποιεί τοπικά τη μεταβολή ενέργειας κατά τη διάρκεια των προσομοιώσεων. Το πεδίο αυτό εισάγει μια στοχευμένη προκατάληψη υπέρ της κατάστασης $s = 1$, επηρεάζοντας τόσο τη δυναμική των spin flips όσο και τα στατιστικά φυσικά μεγέθη που μετρώνται μετά από κάθε sweep. Σε αυτή την ενότητα παρουσιάζεται ο τρόπος με τον οποίο η επίδραση του πεδίου ενσωματώνεται στους υπολογισμούς της ενέργειας και της μαγνήτισης, με αναφορά στον σχετικό κώδικα.

Η μεταβολή ενέργειας λόγω του εξωτερικού πεδίου υπολογίζεται κατά τη διάρκεια κάθε βήματος του Metropolis και επηρεάζει άμεσα την πιθανότητα αποδοχής μιας αλλαγής spin. Παράλληλα, η συνεισφορά του πεδίου προστίθεται στην ολική ενέργεια του συστήματος μέσα στη συνάρτηση $E()$, η οποία καλείται μέσω της ρουτίνας `measure()`.

Συγκεκριμένα, για κάθε spin:

- Αν $s(i) = 1$, το πεδίο αφαιρεί ποσότητα h από τη συνολική ενέργεια (ευνοούμενη κατάσταση),
- Αν $s(i) \in \{2, 3\}$, προστίθεται ποσότητα h (ενεργειακή ποινή).

Παρακάτω φαίνεται το σχετικό κομμάτι του υπολογισμού:

```
1 ! External field energy contribution
2 if (s(i) == 1) then
3 field_energy = field_energy - h ! Favor the preferred state
4 else
5 field_energy = field_energy + h ! Penalize the other states
6 end if
```

Listing 7: Συνεισφορά του εξωτερικού πεδίου στην ενέργεια

Ο συνολικός όρος της ενέργειας συνυπολογίζεται τελικά με:

```
1 Energy = real((-en + field_energy)/real(N,dp))
```

Η συνάρτηση $E()$ υπολογίζει τη μέση ενέργεια του συστήματος ανά spin, λαμβάνοντας υπόψη τόσο τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ γειτονικών spins όσο και τη συμβολή του εξωτερικού πεδίου. Συγκεκριμένα:

- Υπολογίζεται το άθροισμα των τιμών των γειτονικών spins (μόνο προς τη θετική φορά κάθε άξονα για αποφυγή διπλομέτρησης).

- Η αλληλεπίδραση υπολογίζεται σύμφωνα με τη δυναμική του Potts μοντέλου.
- Η εξωτερική συνεισφορά h προστίθεται ή αφαιρείται για κάθε site ανάλογα με την τιμή του spin.

Η τελική ενέργεια κανονικοποιείται ανά site. Το βασικό σώμα της συνάρτησης είναι:

```

1 function E() result(Energy)
2 real(dp) :: Energy
3 integer :: en, sum, i, nn
4 real(dp) :: field_energy
5
6 en = 0
7 field_energy = 0.0_dp
8
9 do i = 1, N
10 sum = 0
11 ! Sum of neighboring spins: only forward nn necessary in
    the sum
12 ! Check neighbors in the X direction
13 nn = index_3d(mod(i - 2, L) + 1, mod(i / L, L) + 1, mod(i / (
    L*L), L) + 1, L)
14 sum = sum + s(nn)
15 ! Check neighbors in the Y direction
16 nn = index_3d(mod(i - 2, L) + 1, mod(i / L, L) + 1, mod(i / (
    L*L), L) + 1, L)
17 sum = sum + s(nn)
18 ! Check neighbors in the Z direction
19 nn = index_3d(mod(i - 2, L) + 1, mod(i / L, L) + 1, mod(i / (
    L*L), L) + 1, L)
20 sum = sum + s(nn)
21
22 ! Interaction energy term (Potts interaction)
23 en = en + sum * s(i)
24
25 ! External field energy contribution
26 if (s(i) == 1) then
27 field_energy = field_energy - h
28 else
29 field_energy = field_energy + h
30 end if
31 end do

```

```

32
33 Energy = real((-en + field_energy)/real(N,dp))
34 end function E

```

Listing 8: Υπολογισμός ενέργειας ανά spin στη $E()$

Αντίστοιχα, η συνάρτηση $M()$ υπολογίζει τη συνολική μαγνήτιση του συστήματος ως τον μέσο όρο των τιμών των spins:

```

1 function M() result(Magn)
2 real(dp) :: Magn
3 Magn = SUM(s)/real(N,dp)
4 end function M

```

Listing 9: Υπολογισμός μαγνήτισης στη $M()$

Παρόλο που η τιμή του εξωτερικού πεδίου δεν εμφανίζεται ρητά σε αυτή τη συνάρτηση, το πεδίο επηρεάζει τη μαγνήτιση έμμεσα, καθώς αυξάνει τη συχνότητα εμφάνισης της κατάστασης $s = 1$ μέσω της παραμόρφωσης της θερμοδυναμικής ισορροπίας.

Τέλος, η ρουτίνα `cleanup` αποδεσμεύει τη δυναμικά εκχωρημένη μνήμη του πίνακα s , διασφαλίζοντας την απελευθέρωση των πόρων μετά το πέρας της προσομοίωσης:

```

1 subroutine cleanup
2 DEALLOCATE(s)
3 end subroutine cleanup

```

Listing 10: Αποδέσμευση μνήμης στη `cleanup`

Η σωστή διαχείριση της μνήμης είναι ιδιαίτερα σημαντική σε προσομοιώσεις μεγάλης κλίμακας, ειδικά όταν το σύστημα επαναλαμβάνεται για διαφορετικές θερμοκρασίες, μεγέθη πλέγματος ή τιμές του εξωτερικού πεδίου.

3.5 Τεχνική Επανασταθμίσεως Ferrenberg–Swendsen

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 β_0 και, χωρίς ανάγκη νέων προσομοιώσεων, παράγει εκτιμήσεις για ένα κοντινό πλήθος θερμοκρασιών β' μέσω αναπροσαρμογής των σχετικών πιθανοτήτων των καταστάσεων.

Η θεωρητική βάση της μεθόδου έχει παρουσιαστεί στο Κεφάλαιο 2, εδώ επικεντρωνόμαστε στην υπολογιστική υλοποίηση και στη διαδικασία μετα-ανάλυσης των δεδομένων.

Το πρόγραμμα εφαρμόζεται σε δεδομένα που έχουν παραχθεί από το κύριο πρόγραμμα Metropolis. Τα δεδομένα εισόδου είναι ένα αρχείο κειμένου με δύο στήλες (ενέργεια, μαγνήτιση) για κάθε sweep μετά τη θερμική εξισορρόπηση. Ο χρήστης καλείται να εισάγει:

- το όνομα του αρχείου,
- τη θερμοκρασία β_0 της αρχικής προσομοίωσης,
- το εύρος θερμοκρασιών για επανασταθμίσεις $[\beta_{\text{start}}, \beta_{\text{end}}]$,
- τον αριθμό γραμμών που θα αγνοηθούν λόγω thermalization.

Για κάθε νέα θερμοκρασία β' , υπολογίζεται η μεταβολή της θερμοκρασίας:

$$\Delta\beta = \beta' - \beta_0$$

και κάθε καταγραφή ενέργειας E_i επανασταθμίζεται μέσω ενός ειδικού βάρους:

$$w_i = e^{-\Delta\beta E_i}$$

Τα ειδικά βάρη χρησιμοποιούνται για να υπολογιστούν τα εξής μεγέθη σε κάθε β' :

$$\begin{aligned}\langle E \rangle_{\beta'} &= \frac{\sum_i E_i w_i}{\sum_i w_i} \\ \langle M \rangle_{\beta'} &= \frac{\sum_i M_i w_i}{\sum_i w_i} \\ C_v(\beta') &= \beta'^2 (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \\ \chi(\beta') &= \beta' (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \\ B_4 &= 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3\langle M^2 \rangle^2}\end{aligned}$$

Όλες οι τιμές που υπολογίζονται για τα παρατηρήσιμα σε κάθε βήμα δίνονται στο command prompt του χρήστη για άμεση πρόσβαση αλλά γράφονται και σε ένα αρχείο .dat για εν δυνάμει περαιτέρω επεξεργασία.

Η παρακάτω υλοποίηση σε Fortran εφαρμόζει τη μέθοδο:

```
1 program reweight_beta_input
2 implicit none
3 integer, parameter :: dp = selected_real_kind(15, 307)
4 integer :: i, n, ios
5 real(dp), allocatable :: E(:), M(:), weights(:)
6 real(dp) :: beta0, beta_prime, delta_beta
7 real(dp) :: beta_start, beta_end, beta_step
8 real(dp) :: E_avg, E2_avg, M_avg, M2_avg, Cv, chi, M4_avg,
   binder
```

```

9  real(dp)                                :: sum_w, sum_Ew, sum_E2w, sum_Mw, sum_M2w,
    sum_M4w
10 character(len=200)                      :: filename
11 integer                                  :: skip_lines
12
13 ! User input
14 print *, "Enter_output_filename:"
15 read(*, '(A)') filename
16 print *, "Enter_simulation_temperature_beta0:"
17 read(*, *) beta0
18 print *, "Enter_reweighting_beta_range_start,_end,_step:"
19 read(*, *) beta_start, beta_end, beta_step
20 print *, "Enter_number_of_lines_to_skip_(thermalization):"
21 read(*, *) skip_lines
22
23 ! Reading data
24 open(10, file=filename, status='old')
25 n = 0
26 do
27 read(10, *, iostat=ios)
28 if (ios /= 0) exit
29 n = n + 1
30 end do
31 close(10)
32 n = n - skip_lines
33 if (n ≤ 0) stop "Not_enough_data"
34 allocate(E(n), M(n))
35 open(10, file=filename)
36 do i = 1, skip_lines
37 read(10, *)
38 end do
39 do i = 1, n
40 read(10, *) E(i), M(i)
41 end do
42 close(10)
43
44 ! Output data are provided in the prompt but also saved in a .dat file
45 open(20, file="reweight_output.dat", status='replace')
46 write(20, '(A)') "#_beta'_____<E>_____Cv_____<M
    >_____Chi_____Binder_U_"
47 print *, "#_beta'_____<E>_____Cv_____<M>_____Chi_____
    _Binder_U_"
48
49 ! Reweighting
50 beta_step_idx = 0
51 do
52 beta_prime = beta_start + beta_step_idx * beta_step
53 if (beta_prime > beta_end + 1.0e-6_dp) exit
54
55 delta_beta = beta_prime - beta0
56 allocate(weights(n))

```

```

57
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
    statistics, which effectively zero out the weights
67
68 sum_w = sum(weights)
69 if (sum_w < 1.0e-12_dp) then
70 print *, "Warning:_sum_of_weights_near_zero_at_beta_", beta_prime
71 write(20, '(A)') "#_WARNING:_poor_statistics_at_beta=_ " // trim(adjustl(
    to_string(beta_prime)))
72 end if
73
74 sum_Ew = sum(E * weights)
75 sum_E2w = sum((E**2) * weights)
76 sum_Mw = sum(M * weights)
77 sum_M2w = sum((M**2) * weights)
78 sum_M4w = sum((M**4) * weights)
79
80 E_avg = sum_Ew / sum_w
81 E2_avg = sum_E2w / sum_w
82 Cv = (E2_avg - E_avg**2) * (beta_prime**2)
83
84 M_avg = sum_Mw / sum_w
85 M2_avg = sum_M2w / sum_w
86 chi = (M2_avg - M_avg**2) * beta_prime
87
88 M4_avg = sum_M4w / sum_w
89 binder = 1.0_dp - M4_avg / (3.0_dp * M2_avg**2)
90
91 print '(F10.6,_2X,_F16.12,_2X,_F16.12,_2X,_F16.12,_2X,_F16.12)', &
92 beta_prime, E_avg, Cv, M_avg, chi, binder
93
94     write(20, '(F12.8,_2X,_F20.15,_2X,_F20.15,_2X,_F20.15,_2X,_F20.15)')
        beta_prime, E_avg, Cv, M_avg, chi, binder
95
96 deallocate(weights)
97 beta_step_idx = beta_step_idx + 1
98 end do
99
100 close(20)
101 deallocate(E, M)
102
103 contains
104

```

```

105 ! Supporting function for warning messages
106 function to_string(x) result(str)
107 real(dp), intent(in) :: x
108 character(len=50) :: str
109 write(str, '(F12.6)') x
110 end function to_string
111
112 end program reweight_beta_input

```

Η έξοδος του προγράμματος περιλαμβάνει πίνακα με τιμές T' , $\langle E \rangle$, C_v , $\langle M \rangle$, χ και B_4 για κάθε θερμοκρασία του εύρους.

4 Διαχείριση και Ανάλυση Δεδομένων

4.1 Οργάνωση Υπολογισμών και Αυτόματη Εκτέλεση

Η παραγωγή των δεδομένων για τη μελέτη μοντέλου πραγματοποιήθηκε μέσω ενός αυτοματοποιημένου bash script, το οποίο εκτελεί διαδοχικά την κύρια εξομείωση Monte Carlo και τα απαραίτητα στατιστικά υποπρογράμματα ανάλυσης. Στόχος του script είναι να διασφαλιστεί η συνεπής, επαναλήψιμη και αποδοτική διεξαγωγή υπολογισμών για ένα εύρος παραμέτρων.

Πιο συγκεκριμένα, το script εκτελεί τις εξής ενέργειες:

- Ορίζει τα μεγέθη πλέγματος που θα εξεταστούν ($L \in \{40, 50, 60, 70\}$) και τις τιμές του εξωτερικού πεδίου $h \in [0.00050, 0.00095]$ με βήμα 0.00005.
- Για κάθε ζεύγος παραμέτρων (L, h):
 1. Εκτελείται το κύριο πρόγραμμα Monte Carlo (rot_emf), με είσοδο τις τιμές των παραμέτρων μέσω redirection. Το πρόγραμμα παράγει αρχείο εξόδου `outL{L}h{h}.txt`, το οποίο περιλαμβάνει τα δύο κύρια παρατηρήσιμα, ενέργεια και μαγνήτιση.
 2. Το ίδιο αρχείο επεξεργάζεται με το πρόγραμμα autoco, το οποίο υπολογίζει τους χρόνους αυτοσυσχέτισης για κάθε παρατηρούμενο. Το αποτέλεσμα αποθηκεύεται στο αρχείο `autocoL{L}h{h}.txt`.
 3. Από το αρχείο εξόδου, εξάγεται η κατάλληλη στήλη και εφαρμόζεται η μέθοδος *Jackknife* για την εκτίμηση του στατιστικού σφάλματος. Για να διασφαλιστεί ότι το σύστημα έχει φτάσει σε στατιστική ισορροπία, αγνοούνται οι πρώτες 4000 μετρήσεις, οι οποίες αντιστοιχούν στο *equilibration phase* του συστήματος [3]. Το αποτέλεσμα αποθηκεύεται στο αρχείο `err_avgL{L}h{h}.txt`.

Η ονοματοδοσία των αρχείων εξόδου είναι πλήρως παραμετροποιημένη ώστε να αντανakλά τις αντίστοιχες τιμές των παραμέτρων L και h , γεγονός που διευκολύνει την αναγνώριση, ταξινόμηση και επεξεργασία των δεδομένων.

Πίνακας 4.1: Περιγραφή αρχείων εξόδου για κάθε run

Όνομα αρχείου	Περιεχόμενο
outL{L}h{h}.txt	Πλήρες σύνολο μετρήσεων παρατηρησίμων (ενέργεια, μαγνητίσεις, κ.ά.)
autocoL{L}h{h}.txt	Χρόνοι αυτοσυσχέτισης για κάθε observable
err_avgL{L}h{h}.txt	Εκτίμηση σφάλματος με μέθοδο Jackknife

Το πλήρες script παρατίθεται παρακάτω:

```

1 L_values=(40 50 60 70)
2 h_values=(0.00050 0.00055 0.00060 0.00065 0.00070 0.00075
   0.00080 0.00085 0.00090 0.00095)
3
4 for L in "${L_values[@]"; do
5 for h in "${h_values[@]"; do
6
7 # Μορφοποίηση της τιμής του h για χρήση στο όνομα αρχείου
8 hlabel=$(LC_NUMERIC=C printf "%.5f" "$h" | sed 's/\./p/')
9
10 # Τυχαίος seed για κάθε run
11 seed=$((10000 + RANDOM % 90000))
12
13 # Ορισμός ονομάτων αρχείων εξόδου
14 outfile="outputs/data/outL${L}h${hlabel}.txt"
15 autocofile="outputs/data/autocoL${L}h${hlabel}.txt"
16 errfile="outputs/data/err_avgL${L}h${hlabel}.txt"
17
18 # Εκτέλεση της κύριας προσομοίωσης
19 echo -e "${L}\n0.5495\n${seed}\n20000\n${h}\n0" | ./pot_emf >
   "$outfile"
20
21 # Υπολογισμός χρόνων αυτοσυσχέτισης
22 tail -n +3 "$outfile" | ./autoco > "$autocofile"
23
24 # Υπολογισμός σφάλματος μέσω Jackknife στήλη( 2: πχ..
   μαγνητίση)

```

```

25 tail -n +4001 "$outfile" | awk '{print_$2}' | ./jack > "
    $errfile"
26
27 echo "Done:_L=${L},_h=${h}_->_$outfile,_$autocofile,_$errfile
    "
28
29 done
30 done

```

Listing 11: Αυτοματοποιημένο script παραγωγής και επεξεργασίας δεδομένων

Το script αυτό αποτέλεσε τη βάση για τη συστηματική παραγωγή και ανάλυση των δεδομένων που παρουσιάζονται στο επόμενο κεφάλαιο. Η οργάνωση των runs και η σαφής δομή των αρχείων επέτρεψαν την αποδοτική μεταγενέστερη ανάλυση, όπως η εφαρμογή της μεθόδου Ferrenberg–Swendsen και η παραγωγή γραφικών παραστάσεων.

4.2 Ανάλυση Δεδομένων και Προσδιορισμός Κρίσιμης Συμπεριφοράς

4.2.1 Post-processing μέσω της μεθόδου Ferrenberg–Swendsen

Μετά την παραγωγή των αρχικών μετρήσεων για όλα τα ζεύγη παραμέτρων (L, h) , η επεξεργασία των δεδομένων συνεχίστηκε με την εφαρμογή της μεθόδου Ferrenberg–Swendsen (FS). Η μέθοδος αυτή επιτρέπει την ανακατασκευή θερμοδυναμικών μεγεθών ως συνάρτηση της θερμοκρασίας, χρησιμοποιώντας τις μετρήσεις από μία μόνο τιμή θερμοκρασίας, μέσω της στατιστικής επαναστάθμισης (reweighting).

Για κάθε αρχείο εξόδου `outL{L}h{h}.txt`, εφαρμόστηκε η μέθοδος FS με στόχο τον υπολογισμό θερμοδυναμικών ποσοτήτων όπως:

- η ειδική θερμότητα $C(T)$,
- η μαγνητική επιδεκτικότητα $\chi(T)$,
- ο συντελεστής Binder B_4

Η ανάλυση πραγματοποιήθηκε *χειροκίνητα* (manual post-processing), εκτελώντας το σχετικό πρόγραμμα FS σε κάθε αρχείο εξόδου. Για κάθε τιμή του εξωτερικού πεδίου h και κάθε μέγεθος συστήματος L , εντοπίστηκε η αντίστροφη θερμοκρασία $\beta_{\max}$ στην οποία η επιδεκτικότητα χ μεγιστοποιείται. Η θερμοκρασία αυτή θεωρήθηκε ως εκτιμητής για την κρίσιμη θερμοκρασία του συστήματος (αντίστροφη) $\beta_c(h)$, για δεδομένο L . Για τη διαδικασία αυτή πραγματοποιήθηκαν αρκετές επαναλήψεις του προγράμματος βελτιώνοντας κάθε φορά την επιλογή

του εύρους των θερμοκρασιών για κάθε σετ τιμών (L, h) ώστε να γίνει με ακρίβεια ο εντοπισμός της θερμοκρασίας που αντιστοιχεί στο μέγιστο χ . Επίσης εξέχουσας σημασίας για την αξιοπιστία των αποτελεσμάτων ήταν και η επιλογή του αριθμού των γραμμών δεδομένων που προσπερνάει ο αλγόριθμος μέχρι την κατάσταση θερμικής ισορροπίας του συστήματος, για το λόγο αυτό εξετάστηκαν για κάθε ζεύγος (L, h) και οι χρόνοι αυτοσυσχέτισης από τα αντίστοιχα αρχεία `autocoL{L}h{h}.txt`.

Τα αποτελέσματα της ανάλυσης οργανώθηκαν σε πίνακες ανά L και h , και πρόκειται να χρησιμοποιηθούν στο επόμενο κεφάλαιο για τη γραφική απεικόνιση της εξάρτησης των κρίσιμων θερμοκρασιών από το εξωτερικό πεδίο και την εξαγωγή φυσικών συμπερασμάτων.

4.2.2 Οργάνωση αποτελεσμάτων και καταγραφή κρίσιμων θερμοκρασιών

Ο εντοπισμός των τιμών $\beta_c(h)$ από τα μέγιστα της μαγνητικής επιδεκτικότητας αποτέλεσε βασικό βήμα για την κατανόηση της συμπεριφοράς του συστήματος υπό την επίδραση εξωτερικού πεδίου. Τα αποτελέσματα οργανώθηκαν σε πίνακες όπου για κάθε συνδυασμό τιμών (L, h) καταγράφεται η αντίστοιχη θερμοκρασία στην οποία παρατηρείται η μέγιστη απόκριση του συστήματος καθώς και οι ίδιες οι τιμές της μέγιστης μαγνητικής επιδεκτικότητας χ_m αλλά και ο συντελεστής Binder B_4 στις τιμές αυτές.

Πίνακας 4.2: Κρίσιμες θερμοκρασίες $\beta_c(h)$ για διάφορα μεγέθη L και τιμές εξωτερικού πεδίου h

Εξωτερικό πεδίο h	Θερμοκρασία αιχμής επιδεκτικότητας $\beta_c(h)$ για:			
	L=40	L=50	L=60	L=70
0.00055	0.54978	0.54972	0.54970	0.54969
0.00060	0.54969	0.54967	0.54965	0.54963
0.00065	0.54959	0.54956	0.54954	0.54952
0.00070	0.54956	0.54953	0.54948	0.54947
0.00075	0.54946	0.54945	0.54941	0.54936
0.00080	0.54937	0.54936	0.54933	0.54932
0.00085	0.54928	0.54927	0.54925	0.54924
0.00090	0.54922	0.54919	0.54918	0.54917

Πίνακας 4.3: Μέγιστα της μαγνητικής επιδεκτικότητας ανά μονάδα όγκου $\frac{\chi_m}{V}$ για διάφορα μεγέθη L και τιμές εξωτερικού πεδίου h

Εξωτερικό πεδίο h	Μέγιστο μαγνητικής επιδεκτικότητας $\frac{\chi_m}{V}$ για:			
	L=40 ($\cdot 10^{-9}$)	L=50 ($\cdot 10^{-9}$)	L=60 ($\cdot 10^{-9}$)	L=70 ($\cdot 10^{-9}$)
0.00060	12.96	8.11	3.31	2.07
0.00065	9.65	5.35	3.07	1.93
0.00070	8.79	3.80	2.49	1.84
0.00075	5.83	3.43	2.45	1.34
0.00080	4.21	2.53	1.85	1.12
0.00085	4.17	2.43	1.78	1.09
0.00090	3.36	2.09	1.63	0.93

Πίνακας 4.4: Συντελεστές Binder B_4 για διάφορα μεγέθη L και τιμές εξωτερικού πεδίου h

Εξωτερικό πεδίο h	Συντελεστής Binder B_4 για:			
	L=40 ($\cdot 10^{-9}$)	L=50 ($\cdot 10^{-9}$)	L=60 ($\cdot 10^{-9}$)	L=70 ($\cdot 10^{-9}$)
0.00060	4.82	3.85	2.98	2.06
0.00065	6.55	5.35	4.71	3.65
0.00070	7.82	6.96	6.19	5.24
0.00075	8.20	8.29	8.11	7.53
0.00080	9.47	10.02	10.16	10.51
0.00085	10.56	11.88	11.91	13.69

Οι τιμές αυτές θα χρησιμοποιηθούν για την παραγωγή γραφικών παραστάσεων της μορφής $\frac{\chi_m}{V}(h)$, $\beta_c(h)$ και $B_4(h)$.

Στη συνέχεια για σταθερή τιμή του εξωτερικού πεδίου $h=0.00060$ πραγματοποιήθηκαν επιπλέον προσομοιώσεις και επανασταθμίσεις για διάφορες τιμές μεγέθους πλέγματος από $L=35$ έως $L=75$, ώστε να υπάρχουν ικανοποιητικά αρκετά δεδομένα για τη γραφική μελέτη της σχέσης $\beta_c(L)$.

Πίνακας 4.5: Κρίσιμες θερμοκρασίες β_c για διάφορα μεγέθη πλέγματος L για την τιμή του εξωτερικού πεδίου $h=0.00060$

Μέγεθος πλέγματος L	Θερμοκρασία αιχμής επιδεκτικότητας β_c
35	0.549713
40	0.549687
45	0.549675
50	0.549667
55	0.549661
60	0.549649
65	0.549642
70	0.549631

4.3 Παραγωγή Γραφικών Παραστάσεων

Η γραφική απεικόνιση των σχέσεων των μεγεθών που υπολογίστηκαν στα προηγούμενα στάδια της ανάλυσης αποτελεί για την ερμηνεία της κρίσιμης συμπεριφοράς του συστήματος. Όλα τα διαγράμματα δημιουργήθηκαν μέσω της γλώσσας gnuplot, χρησιμοποιώντας κατάλληλα scripts που αξιοποιούν τα δεδομένα που παρουσιάστηκαν και στους πίνακες της προηγούμενης παραγράφου.

Διάγραμμα $\chi_L(h)$ για διάφορα μεγέθη πλέγματος Το πρώτο script δημιουργεί το διάγραμμα των μεγίστων της μαγνητικής επιδεκτικότητας χ_L ως συνάρτηση του εξωτερικού πεδίου h για διαφορετικά μεγέθη πλέγματος $L \in \{40, 50, 60, 70\}$. Τα δεδομένα προέρχονται από το αρχείο `b_h_xL_tables.dat` 4.2, το οποίο περιλαμβάνει για κάθε h την αντίστοιχη μέγιστη τιμή της επιδεκτικότητας για κάθε L .

```
1 set terminal pngcairo size 1200,900 enhanced font 'Helvetica
  ,12'
2 set output 'chi_vs_h_with_fit.png'
3
4 set title "Susceptibility_Peak_X_{L,m}_per_volume_vs_External
  _Field_h"
5 set xlabel "h_(External_Field)"
6 set ylabel "Susceptibility_Peak_in_units_of_volume_X_{L,m}_/_
  V_(10^{−9})"
7 set key top left
8 set grid
9
10 # Define line styles for consistency
11 set style line 1 lc rgb "#e377c2" pt 7 ps 1.5 lt 1 lw 2 #
  Magenta
12 set style line 2 lc rgb "#ff7f0e" pt 7 ps 1.5 lt 1 lw 2 # Red
13 set style line 3 lc rgb "#2ca02c" pt 7 ps 1.5 lt 1 lw 2 #
  Green
14 set style line 4 lc rgb "#7f7f7f" pt 7 ps 1.5 lt 1 lw 2 #
  Dark Gray
15
16 # Setting range
17 set xrange [0.00060 : 0.00090]
18 set yrange [0 :14]
19
20 # Plot raw data
21 plot \
22 'b_h_xL_tables.dat' every ::2 using 1:6 with points linestyle
```

```

1 title "L=40_data", \
23 'b_h_xL_tables.dat' every ::2 using 1:6 smooth bezier
   linestyle 1 notitle, \
24 'b_h_xL_tables.dat' every ::2 using 1:7 with points linestyle
   2 title "L=50_data", \
25 'b_h_xL_tables.dat' every ::2 using 1:7 smooth bezier
   linestyle 2 notitle, \
26 'b_h_xL_tables.dat' every ::2 using 1:8 with points linestyle
   3 title "L=60_data", \
27 'b_h_xL_tables.dat' every ::2 using 1:8 smooth bezier
   linestyle 3 notitle, \
28 'b_h_xL_tables.dat' every ::2 using 1:9 with points linestyle
   4 title "L=70_data", \
29 'b_h_xL_tables.dat' every ::2 using 1:9 smooth bezier
   linestyle 4 notitle

```

Listing 12: Παραγωγή διαγράμματος $\chi_L(h)$ για διάφορα L

Διάγραμμα $\beta_c(h)$ για διάφορα μεγέθη πλέγματος Το δεύτερο script, ομοίως με το πρώτο script, χρησιμοποιεί τα αντίστοιχα δεδομένα από το αρχείο `b_h_xL_tables.dat` 4.3 και δημιουργεί το διάγραμμα των αντίστροφων θερμοκρασιών όπου εμφανίζεται η αιχμή της επιδεκτικότητας β_c ως συνάρτηση του εξωτερικού πεδίου h για διαφορετικά μεγέθη πλέγματος $L \in \{40, 50, 60, 70\}$. Η διαφορά όμως είναι ότι στο script αυτό γίνεται γραμμικό fit βάσει της θεωρήσης ότι η σχέση $\beta_c(h)$ παρουσιάζει γραμμική συμπεριφορά κοντά στις κρίσιμες θερμοκρασίες (κάτι που γενικά δεν ισχύει). [1]

```

1
2 set terminal pngcairo size 2400,1800 enhanced font 'Helvetica
  ,20'
3 set output 'b_vs_h_linear_fit.png'
4
5 set title "Inverse_Temperature_β_vs_External_Field_h"
6 set xlabel "h_(External_Field)"
7 set ylabel "β_(Inverse_Temperature)"
8 set key bottom left
9 set grid
10
11 # Define line styles for consistency
12 set style line 1 lc rgb "#e377c2" pt 7 ps 1.5 lt 1 lw 2 #
  Magenta
13 set style line 2 lc rgb "#ff7f0e" pt 7 ps 1.5 lt 1 lw 2 # Red

```

```

14 set style line 3 lc rgb "#2ca02c" pt 7 ps 1.5 lt 1 lw 2 #
    Green
15 set style line 4 lc rgb "#7f7f7f" pt 7 ps 1.5 lt 1 lw 2 #
    Dark Gray
16
17 # Linear fit functions
18 f40(x) = a40*x + b40
19 f50(x) = a50*x + b50
20 f60(x) = a60*x + b60
21 f70(x) = a70*x + b70
22
23 # Fit data from line 3 onward (skip headers and garbage)
24 fit f40(x) 'b_h_xL_tables.dat' every ::2 using 1:2 via a40,
    b40
25 fit f50(x) 'b_h_xL_tables.dat' every ::2 using 1:3 via a50,
    b50
26 fit f60(x) 'b_h_xL_tables.dat' every ::2 using 1:4 via a60,
    b60
27 fit f70(x) 'b_h_xL_tables.dat' every ::2 using 1:5 via a70,
    b70
28
29 # Setting range
30 set xrange [0.00060 : 0.00090]
31 set yrange [0.5491 : 0.5497]
32
33
34 # Plot raw data + linear fit lines
35 plot \
36 'b_h_xL_tables.dat' every ::2 using 1:2 with points linestyle
    1 title "L=40_data", \
37 f40(x) linestyle 1 notitle, \
38 'b_h_xL_tables.dat' every ::2 using 1:3 with points linestyle
    2 title "L=50_data", \
39 f50(x) linestyle 2 notitle, \
40 'b_h_xL_tables.dat' every ::2 using 1:4 with points linestyle
    3 title "L=60_data", \
41 f60(x) linestyle 3 notitle, \
42 'b_h_xL_tables.dat' every ::2 using 1:5 with points linestyle
    4 title "L=70_data", \
43 f70(x) linestyle 4 notitle

```

Listing 13: Παραγωγή διαγράμματος $\beta_c(h)$ για διάφορα L

Η χρήση της εντολής `every :: 2` εξασφαλίζει την παράλειψη γραμμών σχολίων ή τίτλων στις πρώτες σειρές του αρχείου. Οι στήλες 6 έως 9 του αρχείου αντιστοιχούν στις μέγιστες επιδεκτικότητες για τις τιμές $L = 40, 50, 60, 70$ αντίστοιχα. Ο χρωματικός διαχωρισμός και η χρήση χαρακτηριστικών σημείων (markers) διευκολύνει την ανάγνωση του διαγράμματος.

Διάγραμμα $\beta(L)$ για σταθερό εξωτερικό πεδίο Το script αυτό χρησιμοποιεί τα δεδομένα του αρχείου `b_h60.dat` 4.5 και δημιουργεί το διάγραμμα των θερμοκρασιών όπου εμφανίζεται η αιχμή της επιδεκτικότητας β ως συνάρτηση του μεγέθους του πλέγματος L όσο αυτές σταδιακά αυξάνονται για σταθερή τιμή του εξωτερικού πεδίου $h=0.00060$. Επειδή οι θερμοκρασίες όπου η μαγνητική επιδεκτικότητα μεγιστοποιούνται θεωρήθηκαν απλά ως εκτιμητές της κρίσιμης θερμοκρασίας και λαμβάνοντας υπόψιν τους νόμους κλιμάκωσης εφόσον η περιοχή θερμοκρασιών και εξωτερικού πεδίου βρίσκεται κοντά στο πραγματικό κρίσιμο σημείο δεύτερης τάξης, η σχέση που συνδέει τα δύο μεγέθη παίρνει τη μορφή

$$\beta^*(L) = \beta_c + a \cdot L^{-1/\nu},$$

, όπου β_c είναι η πραγματική κρίσιμη αντίστροφη θερμοκρασία, ν είναι ο εκθέτης του μήκους συσχέτισης, και το a είναι μία μη καθολική σταθερά. Οπότε στο παρακάτω script εφαρμόζεται επαναληπτική διαδικασία προσαρμογής της σχέσης στα δεδομένα, ενώ ταυτόχρονα γίνεται προσέγγιση της σταθεράς ν μέσω του fitting.

```

1
2 # Output settings
3 set terminal pngcairo enhanced size 800,600 font "Helvetica
  ,12"
4 set output "beta_star_fit.png"
5
6 set xlabel "Lattice_size_L"
7 set ylabel "β_(inverse_temperature)"
8 set title "Finite-Size_Scaling_of_Susceptibility_Peak_β()"
9 set grid
10
11 # Define scaling function: beta*(L) = beta_c + a * L^{-1/nu}
12 f(L) = beta_c + a * L**(-1.0/nu)
13
14 # Initial parameter guesses
15 beta_c = 0.54930      # Example guess (adjust based on your
  data)
16 a = 0.060
17 nu = 0.40
18 # Fit your data file (make sure your data file has columns: L

```

```

    beta_star)
19 FIT_MAXITER = 50
20 fit f(x) 'b_h60.dat' using 1:2 via beta_c, a, nu
21
22 # Plot data points and fit curve
23 plot 'b_h60.dat' using 1:2 with points pt 7 ps 1.5 lc rgb "
    blue" title "Data", \
24 f(x) with lines lw 2 lc rgb "red" title sprintf("Fit:_beta_c
    =%.4f,_nu=%.4f", beta_c, nu)

```

Listing 14: Παραγωγή διαγράμματος $\beta(L)$ για $h=0.00060$

Διάγραμμα $B_4(h)$ για διάφορα μεγέθη πλέγματος Το τελευταίο script χρησιμοποιεί τα αντίστοιχα δεδομένα από το αρχείο `B4_h.dat` 4.4 και δημιουργεί το διάγραμμα των συντελεστών Binder B_4 ως συνάρτηση του εξωτερικού πεδίου h για διαφορετικά μεγέθη πλέγματος $L \in \{40, 50, 60, 70\}$. Σύμφωνα με τη θεωρία κοντά στην κρίσιμη θερμοκρασία, η σχέση εξωτερικού πεδίου και σταθεράς Binder είναι γραμμική και οι ευθείες για τα διάφορα μήκη πλέγματος τέμνονται σε ένα κοινό σημείο κρίσιμης τιμής του εξωτερικού πεδίου, στο script γίνεται κατάλληλο γραμμικό fitting για κάθε μήκος L μέσω των αντίστοιχων σημείων, και στη συνέχεια προσεγγιστική εύρεση του σημείου τομής.

```

1
2 # Set output to PNG
3 set terminal pngcairo size 1000,800 enhanced font 'Arial,12'
4 set output 'binder_plot.png'
5
6 # Set titles and labels
7 set title "Binder_Cumulant_vs_External_Field"
8 set xlabel "h_(external_field)"
9 set ylabel "B4_(binder-cum)"
10
11 set datafile missing "NaN"
12 set key outside
13 set key top left
14
15 # Define styles
16 set style line 1 lc rgb "#e377c2" lt 1 dt 1 pt 7 ps 1.5 lw
    2
17 set style line 2 lc rgb "#bcbd22" lt 2 dt 2 pt 5 ps 1.5 lw
    2
18 set style line 3 lc rgb "#7f7f7f" lt 3 dt 3 pt 9 ps 1.5 lw
    2

```

```

19 set style line 4 lc rgb "#8c564b" lt 4 dt 4 pt 11 ps 1.5 lw
    2
20
21 # Define linear fitting functions
22 f1(x) = m1*x + c1
23 f2(x) = m2*x + c2
24 f3(x) = m3*x + c3
25 f4(x) = m4*x + c4
26
27 # Fit lines to data
28 FIT_LIMIT = 1e-12
29 fit f1(x) 'B4_h.dat' using 1:2 skip 1 via m1,c1
30 fit f2(x) 'B4_h.dat' using 1:3 skip 1 via m2,c2
31 fit f3(x) 'B4_h.dat' using 1:4 skip 1 via m3,c3
32 fit f4(x) 'B4_h.dat' using 1:5 skip 1 via m4,c4
33
34 # Estimate intersection points for pairs
35 x12 = (c2 - c1) / (m1 - m2)
36 x13 = (c3 - c1) / (m1 - m3)
37 x14 = (c4 - c1) / (m1 - m4)
38 x23 = (c3 - c2) / (m2 - m3)
39 x24 = (c4 - c2) / (m2 - m4)
40 x34 = (c4 - c3) / (m3 - m4)
41
42 # Take average as estimate of common crossing point
43 x_avg = (x12 + x13 + x14 + x23 + x24 + x34) / 6
44 y_avg = f1(x_avg) # or f2(x_avg), f3(x_avg), they should all
    be close
45
46 # Annotate crossing point
47 set label sprintf("Estimated_crossing_point:_h_=%.6f,_B4_=_
    %.6f", x_avg, y_avg) at graph 0.05, 0.9 font ",10" tc rgb
    "black"
48 set arrow from x_avg, y_avg to x_avg, y_avg nohead lc rgb "
    black" lw 2 dt 2
49
50 # Load stats from all columns you use
51 stats 'B4_h.dat' using 1 skip 1 name "X"
52 stats 'B4_h.dat' using 2 skip 1 name "Y1"
53 stats 'B4_h.dat' using 3 skip 1 name "Y2"
54 stats 'B4_h.dat' using 4 skip 1 name "Y3"
55 stats 'B4_h.dat' using 5 skip 1 name "Y4"

```

```

56
57
58
59 set xrange [0.00060 : 0.00085]
60 set yrange [2 :14]
61
62
63 # Plot all
64 plot \
65 'B4_h.dat' using 1:2 skip 1 with points ls 1 title 'L=40_Data
    ', \
66 f1(x) with lines ls 1 notitle, \
67 'B4_h.dat' using 1:3 skip 1 with points ls 2 title 'L=50_Data
    ', \
68 f2(x) with lines ls 2 notitle, \
69 'B4_h.dat' using 1:4 skip 1 with points ls 3 title 'L=60_Data
    ', \
70 f3(x) with lines ls 3 notitle, \
71 'B4_h.dat' using 1:5 skip 1 with points ls 4 title 'L=70_Data
    ', \
72 f4(x) with lines ls 4 notitle \

```

Listing 15: Παραγωγή διαγράμματος $B_4(h)$ για διάφορα L

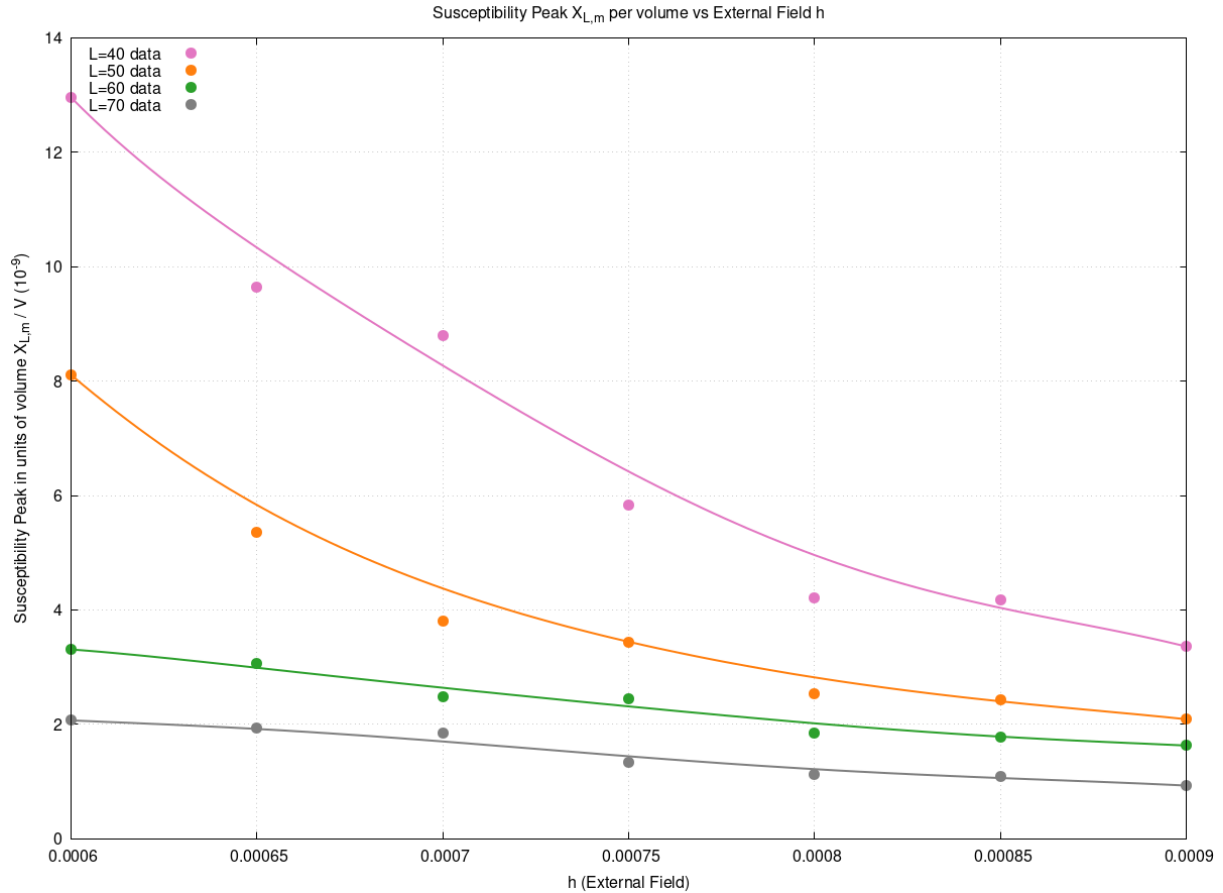
5 Αποτελέσματα και Συζήτηση

Στο παρόν κεφάλαιο αναλύονται τα αριθμητικά αποτελέσματα που προέκυψαν από την προσομοίωση του τρισδιάστατου μοντέλου Potts με τρεις καταστάσεις ($q = 3$) υπό την επίδραση εξωτερικού πεδίου h , όπως αυτά προέκυψαν μέσω των προσομοιώσεων με τους αλγορίθμους Metropolis και Ferrenberg–Swendsen και τα σχετικά διαγράμματα των θερμοδυναμικών μεγεθών που κατασκευάστηκαν τα οποία παρουσιάζονται και αξιολογούνται.

Η ανάλυση που ακολουθεί αποσκοπεί αφενός στην ποιοτική κατανόηση της κρίσιμης συμπεριφοράς του συστήματος, και αφετέρου στην ποσοτική εκτίμηση κρίσιμων μεγεθών και σταθερών μέσω μεθόδων όπως η *ανάλυση πεπερασμένου μεγέθους* (finite size scaling). Συγκεκριμένα, μελετώνται κρίσιμα σημεία τόσο στις κανονικές όσο και στις *rotated* συντεταγμένες, εκτιμώνται κρίσιμες σταθερές όπως η ν (που σχετίζεται με την καθολικότητα του συστήματος), καθώς και νέες σταθερές σύζευξης στις *rotated* συντεταγμένες.

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

Ξεκινάμε την παρουσίαση των αριθμητικών αποτελεσμάτων με τη μελέτη του διαγράμματος της μαγνητικής επιδεκτικότητας (per volume) $\chi_{L,m}$ ως προς το εξωτερικό πεδίο h , για διάφορα μήκη συστήματος $L = 40, 50, 60, 70$. Στο συγκεκριμένο διάγραμμα, το μέγεθος χ αντιστοιχεί στα μέγιστα (peaks) της επιδεκτικότητας που υπολογίστηκαν για κάθε τιμή h .



Σχήμα 1: Μαγνητική επιδεκτικότητα (ανά μονάδα όγκου) $\chi_{L,m}$ ως προς το εξωτερικό πεδίο h , για διάφορες τιμές του μήκους συστήματος L .

Από τις καμπύλες που προκύπτουν, παρατηρούνται τα εξής:

1. Καθώς το εξωτερικό πεδίο h αυξάνεται, η επιδεκτικότητα $\chi(h)$ μειώνεται σημαντικά. Το γεγονός αυτό είναι αναμενόμενο, καθώς η αύξηση του εξωτερικού πεδίου τείνει να ευθυγραμμίσει το σύστημα, μειώνοντας τις θερμικές διακυμάνσεις της μαγνήτισης, και κατά συνέπεια την επιδεκτικότητα.
2. Με την αύξηση του μεγέθους του συστήματος L , η επιδεκτικότητα $\chi(h)$ εμφανίζει συνολικά μικρότερες τιμές ενώ παράλληλα, μειώνεται και ο ρυθμός μεταβολής της ως προς το h , δηλαδή η παράγωγος $d\chi/dh$ φθίνει.
3. Για μεγάλες τιμές L , η καμπύλη της επιδεκτικότητας συγκλίνει σε μία σχεδόν οριζόντια μορφή, με πολύ μικρές τιμές για χ , γεγονός που υποδηλώνει την προσέγγιση προς το θερμοδυναμικό όριο. Αυτή η ασυμπτωτική συμπεριφορά υποδηλώνει ότι, για επαρκώς μεγάλα L , η επιδεκτικότητα $\chi(h)$ καθίσταται πρακτικά ανεξάρτητη του μεγέθους συστήματος. Η παρατήρηση αυτή ενισχύει την πιθανότητα εμφάνισης *data collapse*, δηλαδή την ύπαρξη καθολικής καμπύλης στην οποία μπορούν να αναχθούν τα δεδομένα για διαφορετικά L μέσω κατάλληλης ανακλιμάκωσης. Επιπλέον, οι μικρές και σχεδόν σταθερές τιμές της επιδεκτικότητας σε περιοχές ισχυρού εξωτερικού

πεδίου αντανακλούν τη φυσική κατάσταση του συστήματος, όπου η μαγνήτιση είναι πλέον μονοσήμαντα ευθυγραμμισμένη με το πεδίο. Στην περιοχή αυτή, η επίδραση των θερμικών διακυμάνσεων έχει ουσιαστικά κατασταλεί, και οι αποκρίσεις του συστήματος σε μεταβολές του h είναι αμελητέες, οδηγώντας σε αμελητέες μεταβολές της μαγνήτισης — άρα και της επιδεκτικότητας.

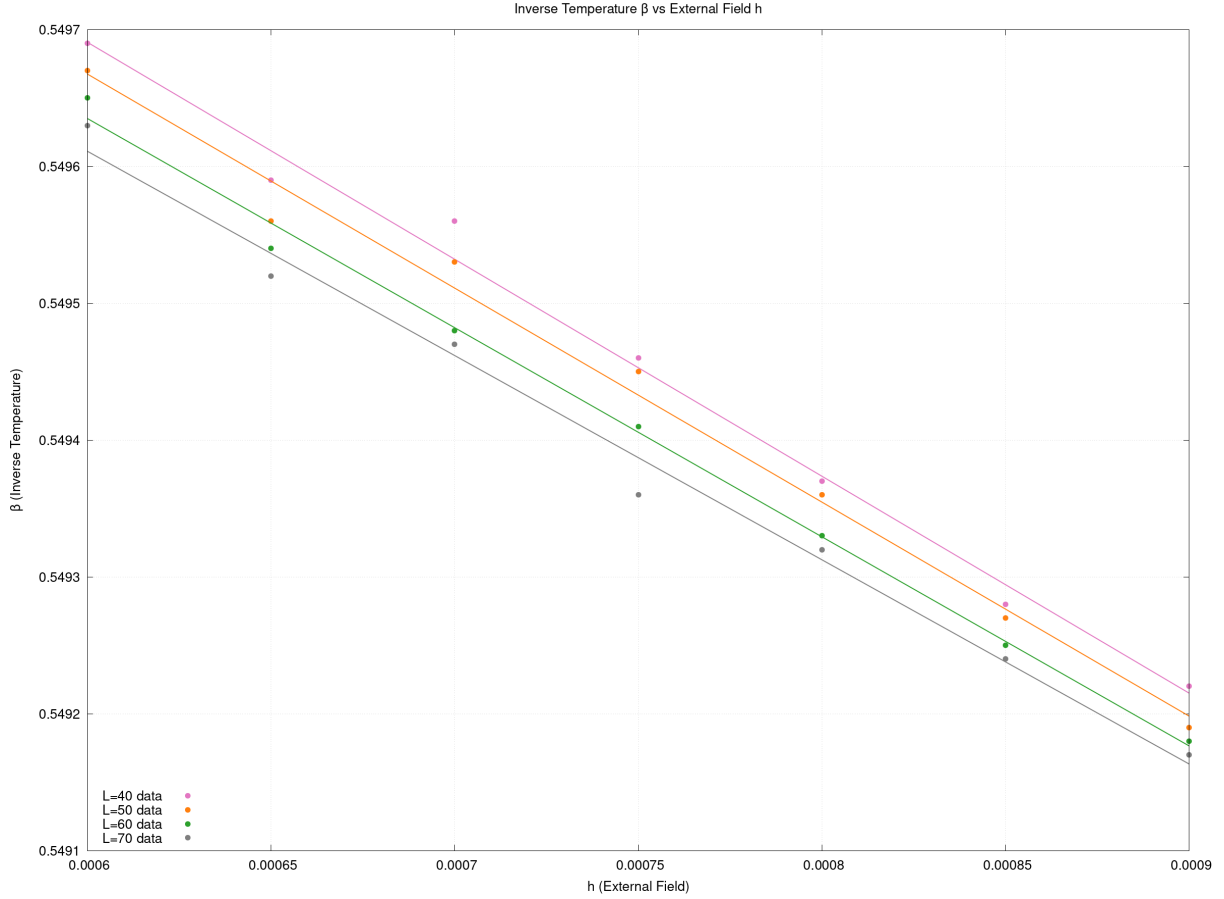
Οι παρατηρήσεις αυτές αποτελούν μια πρώτη, ποιοτική ερμηνεία, για την κατανόηση της συμπεριφοράς του συστήματος σε διαφορετικές τιμές του εξωτερικού πεδίου h και του μεγέθους του συστήματος.

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

Στην παρούσα ενότητα παρουσιάζονται και μελετούνται οι καμπύλες της συνάρτησης $\beta(h)$ για διάφορα μεγέθη συστήματος $L = 40, 50, 60, 70$. Οι τιμές του β αντιστοιχούν στα μέγιστα (peaks) της μαγνητικής επιδεκτικότητας χ για κάθε τιμή του εξωτερικού πεδίου h .

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 (slope) των ευθειών.

Όπως έχει τονιστεί στην θεωρία, 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.



Σχήμα 2: Γραμμική προσαρμογή των τιμών $\beta(h)$, όπως αυτές προκύπτουν από τα μέγιστα της επιδεκτικότητας, για διάφορα μεγέθη συστήματος $L = 40, 50, 60, 70$. Οι κλίσεις των ευθειών συγκλίνουν καθώς αυξάνεται το L , δίνοντας τη δυνατότητα εκτίμησης της παραγώγου $\frac{d\beta_c(h)}{dh}$ κοντά στο κρίσιμο σημείο.

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

$$r = \frac{1}{-1.493} \approx -0.670.$$

Επιπλέον, λόγω της προϋπόθεσης

$$\langle \delta \tilde{E} \cdot \delta \tilde{M} \rangle = 0,$$

μπορεί να δειχθεί ότι η δεύτερη coupling σταθερά ικανοποιεί την

$$s = -r = 0.670,$$

εντός των ορίων του στατιστικού σφάλματος.

Απόδειξη ότι: $r = -s$ **υπό την προϋπόθεση** $\langle \delta \tilde{M} \cdot \delta \tilde{E} \rangle = 0$

Έχουμε τους γραμμικούς μετασχηματισμούς:

$$\tilde{M} = M + sE, \quad \tilde{E} = E + rM$$

Υπολογίζουμε τις διακυμάνσεις:

$$\delta X = X - \langle X \rangle \quad \text{for } X \in \{M, E\}$$

$$\delta \tilde{M} = \tilde{M} - \langle \tilde{M} \rangle = \delta M + s\delta E$$

$$\delta \tilde{E} = \tilde{E} - \langle \tilde{E} \rangle = \delta E + r\delta M$$

Επειδή:

$$\langle \delta \tilde{M} \cdot \delta \tilde{E} \rangle = 0$$

Υπολογίζουμε την έκφραση:

$$\begin{aligned} \langle \delta \tilde{M} \cdot \delta \tilde{E} \rangle &= \langle (\delta M + s\delta E)(\delta E + r\delta M) \rangle \\ &= \langle \delta M \cdot \delta E \rangle + r\langle \delta M^2 \rangle + s\langle \delta E^2 \rangle + sr\langle \delta E \cdot \delta M \rangle \\ &= (1 + sr)\langle \delta M \cdot \delta E \rangle + r\langle \delta M^2 \rangle + s\langle \delta E^2 \rangle \end{aligned}$$

Άρα

$$(1 + sr)\langle \delta M \cdot \delta E \rangle + r\langle \delta M^2 \rangle + s\langle \delta E^2 \rangle = 0 \quad (1)$$

Αυτή η εξίσωση πρέπει να ισχύει για **όλες** τις τυχαίες μεταβλητές M και E , δηλαδή όλες τις τιμές των:

- - $\langle \delta M \cdot \delta E \rangle$ (συνδιακύμανση),
- - $\langle \delta M^2 \rangle$ (διακύμανση του M),
- - $\langle \delta E^2 \rangle$ (διακύμανση του E).

Όλες οι παραπάνω ποσότητες είναι ανεξάρτητες, οπότε ο μόνος τρόπος η εξίσωση (1) να ισχύει **ταυτοτικά** είναι μόνο εάν οι συντελεστές μηδενίζουν το δεξί μέλος για οποιαδήποτε τιμή των μεταβλητών.

Αυτό συμβαίνει μόνο εάν όλοι οι συντελεστές είναι μηδενικοί (**αδύνατο**) ή αν γίνει η κατάλληλη επιλογή των σταθερών:

$$\boxed{r = -s}$$

Συνολικά, η παραπάνω μελέτη επιτρέπει να γίνει εκτίμηση των coupling σταθερών r και s που καθορίζουν τις νέες rotated συντεταγμένες στην περιοχή του κρίσιμου σημείου. Αυτό σημαίνει ότι, εφόσον προσδιοριστεί το κρίσιμο σημείο στο επίπεδο των μεταβλητών (β, h) , στη συνέχεια εντοπίζεται και στο επίπεδο των rotated μεταβλητών (τ, ξ) .

5.3 Εκτίμηση της κρίσιμης θερμοκρασίας β_c και του εκθέτη συσχέτισης ν

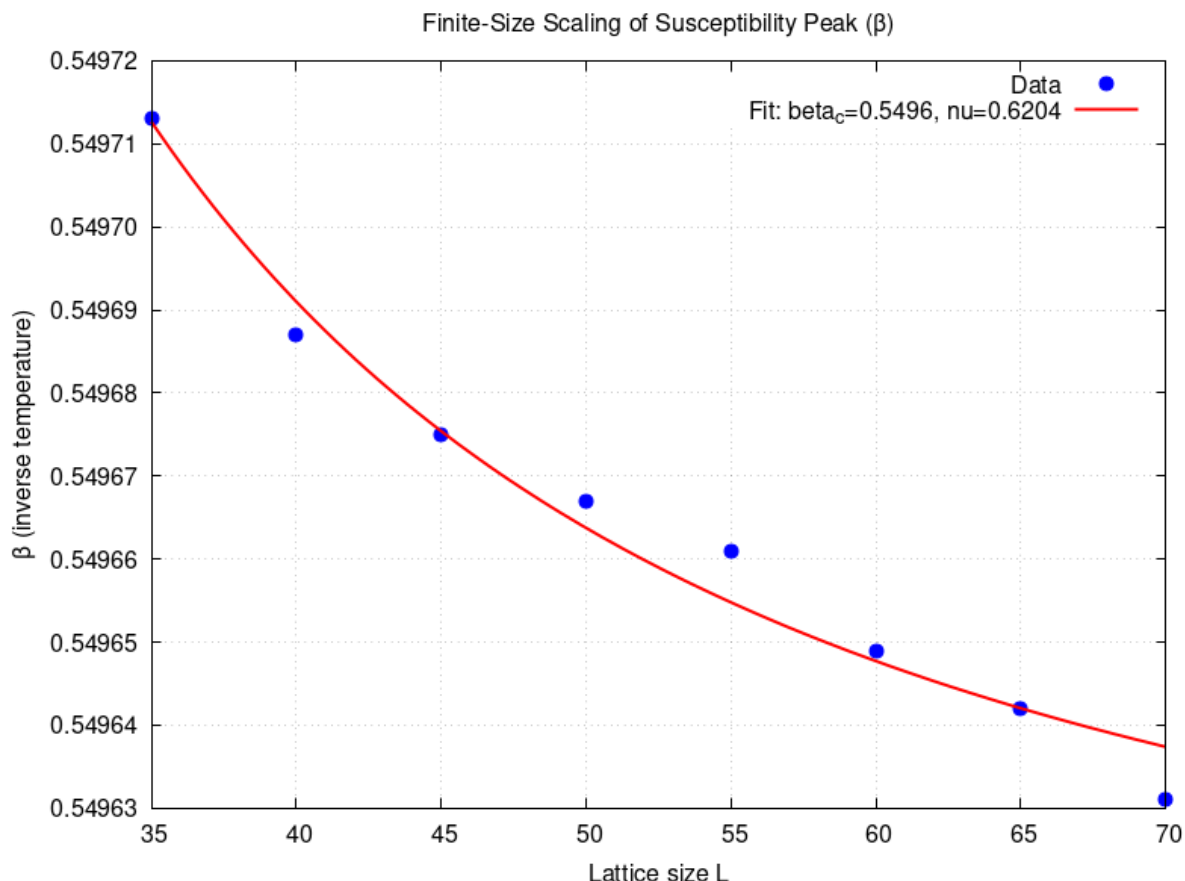
Σε αυτή την ενότητα μελετάται η εξάρτηση της θερμοδυναμικής μεταβλητής β από το μέγεθος του συστήματος L , για σταθερή τιμή του εξωτερικού πεδίου $h = 0.00060$, η οποία βρίσκεται κοντά στο κρίσιμο σημείο. Για κάθε τιμή του L , η αντίστοιχη τιμή του β προκύπτει από το μέγιστο της μαγνητικής επιδεκτικότητας χ , όπως έχει περιγραφεί προηγουμένως.

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:

$$\beta^*(L) = \beta_c + a \cdot L^{-1/\nu},$$

όπου a είναι μια σταθερά και ν είναι ο κρίσιμος εκθέτης που περιγράφει τη συμπεριφορά του μήκους συσχέτισης $\xi \sim |T - T_c|^{-\nu}$ [9].

Για την ανάλυση, πραγματοποιήθηκε προσαρμογή των δεδομένων $\beta^*(L)$ με βάση την παραπάνω εξίσωση, μέσω επαναληπτικής αριθμητικής μεθόδου. Ξεκινώντας από τυχαίες αρχικές εκτιμήσεις για τις παραμέτρους β_c και ν , πραγματοποιήθηκε βελτιστοποίηση των τιμών ώστε να ελαχιστοποιείται το τετραγωνικό σφάλμα της προσαρμογής.



Σχήμα 3: Διάγραμμα της θερμοκρασίας β^* ως προς το μήκος του συστήματος L , για σταθερό εξωτερικό πεδίο $h = 0.00060$. Η συνεχής γραμμή αντιστοιχεί στην βέλτιστη προσαρμογή σύμφωνα με το μοντέλο κλιμάκωσης (**scaling model**) .

Από τη διαδικασία αυτή προέκυψαν οι εκτιμήσεις:

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

Η τιμή της κρίσιμης θερμοκρασίας (αντίστροφης), μαζί με την κρίσιμη τιμή του εξωτερικού πεδίου που θα εκτιμηθεί στη συνέχεια, θα δώσουν το ζεύγος των περιστραμένων συντεταγμένων του κρίσιμου σημείου (τ_c, ξ_c) μέσω των σταθερών coupling και τα συνολικά αποτελέσματα θα εκτιμηθούν σε σύγκριση με τις αναμενόμενες τιμές.

Αυτό που αξίζει να σημειωθεί είναι ότι η τιμή του κρίσιμου εκθέτη $\nu \approx 0.62$ που προέκυψε από την προσαρμογή είναι πολύ κοντά στη θεωρητική τιμή $\nu \approx 0.630$, η οποία είναι γνωστή για το τρισδιάστατο μοντέλο Potts με $q = 3$.

Αυτό αποτελεί ισχυρή ένδειξη ότι η προσομοίωση αποδίδει σωστά την κρίσιμη συμπεριφορά του συστήματος, ενισχύοντας την εμπιστοσύνη στην ανάλυση πεπερασμένου μεγέθους. Το κρίσιμο σημείο, επομένως, φαίνεται να ανήκει στην τάξη καθολικότητας *universality class* του τρισδιάστατου μοντέλου Potts για $q = 3$ και κατεπέκταση το υπό μελέτη σύστημα θα παρουσιάζει κοινή κρίσιμη συμπεριφορά

με διαφορετικά φυσικά συστήματα που όμως μοιράζονται τις ίδιες συμμετρίες διαστασιμότητα.

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

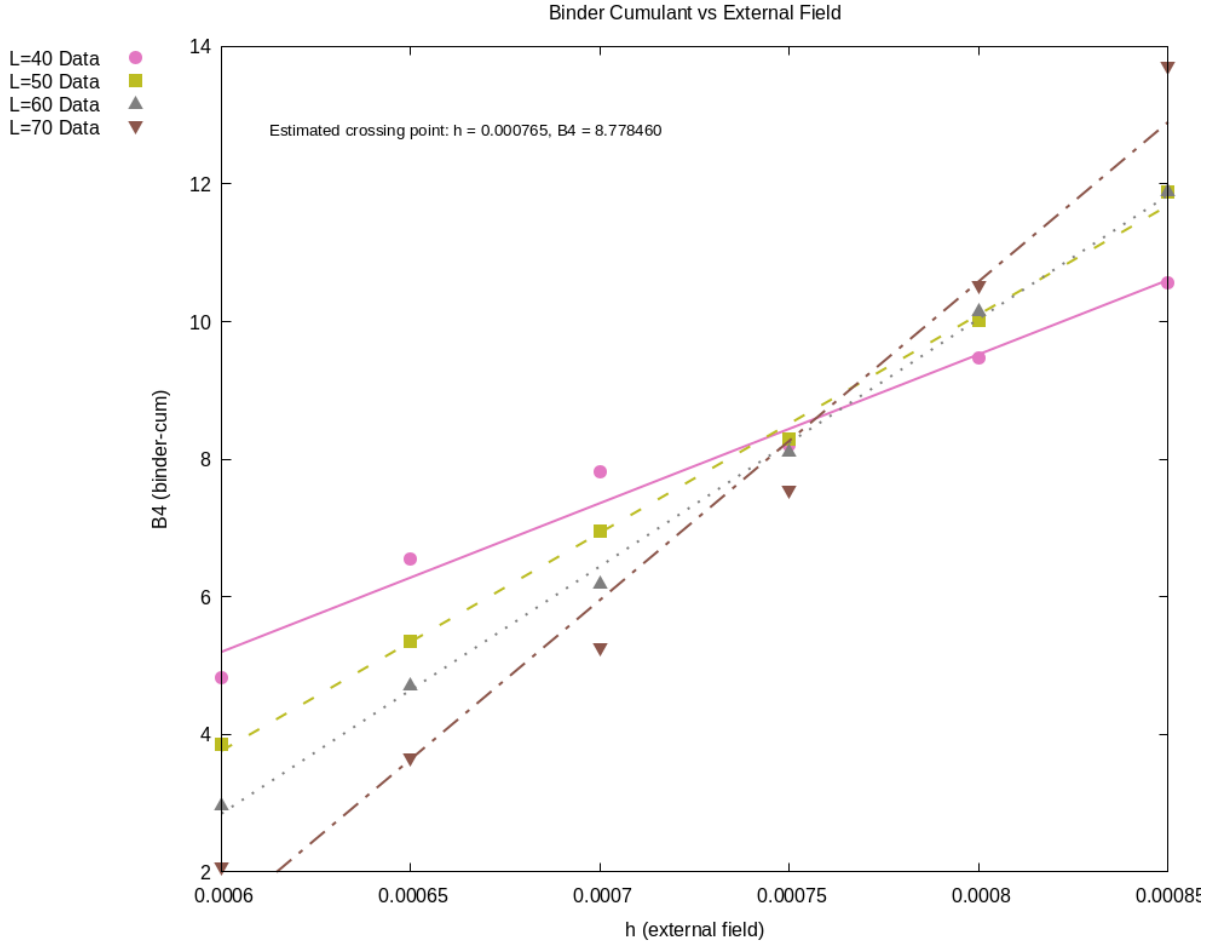
Σε αυτή την ενότητα μελετάται η συμπεριφορά της ποσότητας Binder cumulant $B_4(h)$ για διαφορετικά μεγέθη συστήματος $L = 40, 50, 60, 70$, ως συνάρτηση του εξωτερικού πεδίου h . Το Binder cumulant ορίζεται ως:

$$B_4 = \frac{\langle M^4 \rangle}{\langle M^2 \rangle^2},$$

και χρησιμοποιείται ευρέως για τον προσδιορισμό κρίσιμων σημείων μετάβασης φάσης, καθώς συγκλίνει σε καθολική τιμή στο θερμοδυναμικό όριο.

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 .

Ακολουθώντας αυτή την προσέγγιση, εφαρμόστηκε γραμμική προσαρμογή (fit) στις καμπύλες $B_4(h)$ για κάθε μέγεθος συστήματος, και εντοπίστηκε το σημείο τομής των αντίστοιχων ευθειών.



Σχήμα 4: Καμπύλες του Binder cumulant $B_4(h)$ για διαφορετικά μήκη συστήματος L . Η τομή των γραμμικών προσαρμογών υποδεικνύει την κρίσιμη τιμή του εξωτερικού πεδίου h_c .

Η τομή αυτή αποτελεί εκτίμηση για την κρίσιμη τιμή του εξωτερικού πεδίου, η οποία προσδιορίστηκε ως:

$$h_c \approx 0.000765.$$

Με τον υπολογισμό αυτό, έχει πλέον προσδιοριστεί το κρίσιμο σημείο στο επίπεδο των μεταβλητών (β, h) , και μπορεί στη συνέχεια να χρησιμοποιηθεί για την ανακατασκευή του στο πεδίο των rotated μεταβλητών (τ, ξ) .

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

Από τις προηγούμενες ενότητες προκύπτει η εκτίμηση:

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

καθώς και οι coupling σταθερές:

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

Ο μετασχηματισμός στο επίπεδο των rotated μεταβλητών (τ, ξ) δίνεται από τις σχέσεις:

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

Επειδή $rs \approx -0.449$, η παράμετρος κανονικοποίησης είναι:

$$\frac{1}{1-rs} \approx \frac{1}{1.449} \approx 0.69.$$

Υπολογίζοντας τις συντεταγμένες του κρίσιμου σημείου στο rotated σύστημα:

$$\begin{aligned} \tau_c &= \frac{1}{1-rs}(\beta_c - s h_c) \approx 0.69 \times (0.5496 - 0.670 \cdot 0.000765) \approx 0.69 \times 0.5491 \approx 0.379, \\ \xi_c &= \frac{1}{1-rs}(h_c - r \beta_c) \approx 0.69 \times (0.000765 + 0.670 \cdot 0.5496) \approx 0.69 \times 0.368 \approx 0.254. \end{aligned}$$

Η θέση του κρίσιμου σημείου έχει πλέον προσδιοριστεί τόσο στο σύστημα (β, h) όσο και στο (τ, ξ) , επιβεβαιώνοντας τη συνέπεια της μεθοδολογίας και τη στατιστική ακρίβεια της προσαρμογής.

Για τη σύγκριση με τη βιβλιογραφία, σύμφωνα με τη μελέτη των Karsch και Stickan [14], η ακριβής τιμή του κρίσιμου σημείου για το τρισδιάστατο $q = 3$ Potts μοντέλο εκτιμάται ως:

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

Η προσομοίωση οδηγεί σε σχετική απόκλιση 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. Επιπλέον, ενισχύει την τοποθέτηση του υπό μελέτη συστήματος στην τάξη καθολικότητας του τρισδιάστατου $q = 3$ Potts μοντέλου.

Συμπεράσματα

Στην παρούσα εργασία μελετήθηκε η κρίσιμη συμπεριφορά ενός συστήματος που αναμένεται να ανήκει στην καθολική τάξη του τρισδιάστατου μοντέλου Potts με $q = 3$. Η μελέτη βασίστηκε σε αριθμητικά δεδομένα από προσομοιώσεις Monte Carlo και αναλύθηκε με εργαλεία πεπερασμένου μεγέθους και θεωρίας κλιμάκωσης, με στόχο να επιβεβαιωθεί η κρίσιμη συμπεριφορά του συστήματος και η ένταξή του στη συγκεκριμένη τάξη καθολικότητας.

Με βάση δεδομένα από προσομοιώσεις, προσδιορίστηκε το κρίσιμο σημείο μετάβασης φάσης στο επίπεδο των θερμοδυναμικών μεταβλητών (β, h) , καθώς και στις περιστραμμένες συντεταγμένες (τ, ξ) , που περιγράφουν τη φυσική διεύθυνση των κρίσιμων διακυμάνσεων. Παράλληλα, υπολογίστηκαν οι σταθερές σύζευξης r και s , που συνδέουν τις δύο βάσεις παραμέτρων μέσω γραμμικού μετασχηματισμού.

Η εκτίμηση του κρίσιμου εκθέτη ν , μέσω της μελέτης της κλιμακούμενης συμπεριφοράς του $\beta^*(L)$, απέδωσε τιμή πολύ κοντά στην αναμενόμενη θεωρητική, ενισχύοντας την αξιοπιστία της προσομοίωσης. Επιπλέον, ο προσδιορισμός του κρίσιμου εξωτερικού πεδίου h_c μέσω του Binder cumulant επιβεβαίωσε με ανεξάρτητο τρόπο την τοποθεσία του κρίσιμου σημείου.

Συνολικά, τα αποτελέσματα της παρούσας εργασίας υποστηρίζουν την ένταξη του συστήματος στην ίδια καθολική τάξη με το τρισδιάστατο μοντέλο Potts για $q = 3$, υποδηλώνοντας ότι η κρισιμότητα του συστήματος διέπεται από τους ίδιους εκθέτες. 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.

Πιθανές προεκτάσεις της παρούσας εργασίας περιλαμβάνουν τη μελέτη μεγαλύτερων συστημάτων, την αριθμητική διερεύνηση δυναμικών εκθετών ή ακόμη και την επέκταση της ανάλυσης σε άλλες τάξεις καθολικότητας, με στόχο την πληρέστερη κατανόηση της καθολικής συμπεριφοράς κοντά σε κρίσιμα σημεία.

Αναφορές

- [1] F. Y. Wu. “The Potts model”. Στο: *Reviews of Modern Physics* 54.1 (1982), σσ. 235–268.
- [2] Alan M. Ferrenberg και Robert H. Swendsen. “Optimized Monte Carlo data analysis”. Στο: *Physical Review Letters* 63.12 (1989), σσ. 1195–1198.
- [3] M. E. J. Newman και G. T. Barkema. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Oxford University Press, 1999.
- [4] R. B. Potts. “Some generalized order-disorder transformations”. Στο: *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* 48.1 (1952), σσ. 106–109.
- [5] J. M. Yeomans. *Statistical Mechanics of Phase Transitions*. Oxford University Press, 1992.
- [6] C. M. Fortuin και P. W. Kasteleyn. “On the random-cluster model: I. Introduction and relation to other models”. Στο: *Physica* 57.4 (1972), σσ. 536–564.
- [7] H. Eugene Stanley. *Introduction to phase transitions and critical phenomena*. Oxford University Press, 1971.
- [8] M. E. Fisher και A. N. Berker. “Scaling theory for first-order transitions”. Στο: *Phys. Rev. B* 26 (1982), σσ. 2507–2513.
- [9] D. P. Landau και K. Binder. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. 5th. Cambridge University Press, 2021.
- [10] Kurt Binder και Dieter W. Heermann. “Monte Carlo Simulation in Statistical Physics”. Στο: *Springer Series in Solid-State Sciences* 80 (1988).
- [11] Kurt Binder. “Finite size scaling analysis of Ising model block distribution functions”. Στο: *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter* 43.2 (1981), σσ. 119–140.
- [12] Mehran Kardar. *Statistical Physics of Particles*. Cambridge University Press, 2007.
- [13] N. Metropolis κ.ά. “Equation of State Calculations by Fast Computing Machines”. Στο: *Journal of Chemical Physics* 21.6 (1953), σσ. 1087–1092.
- [14] F. Karsch και S. Stickan. “The three-dimensional, three-state Potts model in an external field”. Στο: *Phys. Lett. B* 488 (2000), σσ. 319–325.