



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ
ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΠΡΟΠΤΥΧΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΣΠΟΥΔΩΝ
ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

**Αριθμητικός Υπολογισμός των Κρίσιμων
Εκθετών στο μαγνητικό μοντέλο 2D-Ising με
χρήση μεθόδου Monte Carlo**

**Δημήτρης Ευαγγέλου
Α.Μ.: 09100234**

Επιβλέπων Καθηγητής
Κωνσταντίνος Ν. Αναγνωστόπουλος

Αθήνα
Απρίλιος 2007

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

1. ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΦΥΣΙΚΗΣ	3
1.1. Στοιχεία θερμοδυναμικής συστήματος σε επαφή με δεξαμενή θερμότητας σε κατάσταση ισορροπίας	3
1.2. Το μοντέλο Ising	5
1.3. Οι ιδιότητες του μοντέλου Ising	6
1.4. Μικροσκοπική μελέτη της μεταβάσεως φάσης	11
2. ΜΕΘΟΔΟΣ MONTE CARLO	15
2.1. Διαδικασία Markov	15
2.1.1. Λόγοι αποδοχής	16
2.1.2. Ο αλγόριθμος Wolff	17
2.2. Τύπος πλέγματος	19
3. ΛΗΨΗ ΜΕΤΡΗΣΕΩΝ – ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΜΕΓΕΘΩΝ	22
3.1. Ισορροπία	22
3.2. Αυτοσυσχετισμός	23
3.2.1. Μέθοδος Jackknife	24
3.3. Χωρικός συσχετισμός σε 2D	25
3.4. Υπολογισμός μεγεθών	27
3.4.1. Μέθοδοι υπολογισμού του μήκους συσχετισμού ξ	28
4. ΔΙΕΝΕΡΓΕΙΑ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΩΝ-ΕΠΕΞΕΡΓΑΣΙΑ ΔΕΔΟΜΕΝΩΝ	32
4.1. Γενική διερεύνηση	32
4.1.1. Προσδιορισμός Κρίσιμης Θερμοκρασίας	37
4.2. Υπολογισμός Κρίσιμων Εκθετών στο πρότυπο 2D-Ising	40
4.2.1. Μέθοδος Απ' ευθείας Προσαρμογής Καμπύλης	40
4.2.2. Μέθοδος Κλιμάκωσης Μεγέθους Συστήματος (FSS)	51
4.3. Σύγκριση μεθόδων Απ' Ευθείας Προσαρμογής και FSS	60

ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Το μοντέλο 2D-Ising αποτελεί το πρώτο από τα μαγνητικά μοντέλα με μετάβαση φάσεως που επιλύθηκε ποτέ αναλυτικά (Lars Onsager 1944). Παρά την απλότητά του, έχει συμβάλλει τα μέγιστα στην κατανόηση των συνεχών μεταβάσεων φάσης, και αποτελεί δομικό λίθο για άλλα, περισσότερο ρεαλιστικά μοντέλα. Το γεγονός αυτό μας ωθεί να μελετήσουμε κάποιες από τις ιδιότητές του χρησιμοποιώντας ορισμένες υπολογιστικές μεθόδους.

Στην αρχή, διενεργούμε προσομοιώσεις σε διαφορετικά 2D-Ising συστήματα, συλλέγουμε δεδομένα και υπολογίζουμε τα βασικά θερμοδυναμικά μεγέθη (Μαγνήτιση, Μαγνητική Επιδεκτικότητα, Ενέργεια, Ειδική Θερμότητα) καθώς και το Μήκος Συσχετισμού και τη Συνάρτηση Συσχετισμού. Έπειτα προσδιορίζουμε την Κρίσιμη Θερμοκρασία του μοντέλου, και τους Κρίσιμους Εκθέτες (β, γ, ν, η) του με χρήση των υπολογιστικών μεθόδων Direct Fitting και της πιο πολύπλοκης Finite Size Scaling. Να υπενθυμίσουμε εδώ ότι οι αναφορές για τον υπολογιστικό προσδιορισμό του εκθέτη η είναι ιδιαίτερα δυσεύρετες, (σε αντίθεση με τις αντίστοιχες των υπολοίπων Κρίσιμων Εκθετών). Τα αποτελέσματα εξετάζονται ως προς τη συμφωνία τους με τα αντίστοιχα της αναλυτικής προσέγγισης όπως και μεταξύ τους, οπότε και αναδεικνύεται η υπεροχή της FSS σαν πρακτικότερη μέθοδος, συμπέρασμα που επαληθεύεται και από το πολύ μικρότερο υπολογιστικό φόρτο που απαιτεί. Η εκτέλεση της παραπάνω διαδικασίας χρήζει ιδιαίτερης προσοχής σε ορισμένα τεχνικά σημεία προς αποφυγή πιθανών λαθών είτε περιττής κατανάλωσης υπολογιστικών πόρων, και γι' αυτό τα τονίζουμε.

Για να κατανοήσω και να αναπτύξω το παραπάνω θέμα εργάστηκε με υπομονή ο επιβλέπων, Επίκουρος καθηγητής Κωνσταντίνος Αναγνωστόπουλος τον οποίο και ευχαριστώ, τόσο για την ανάπτυξη του θεωρητικού φορμαλισμού σε ορισμένα κομβικά σημεία της εργασίας, για την εκπαίδευση και τεχνική στήριξη που μου παρείχε πάνω στην αποδοτικότερη χρήση του Η/Υ, και τη γενικότερα εποικοδομητική για εμένα συνεργασία. Τέλος, ευχαριστώ συνολικά το Ε.Μ.Π. που με κατέστησε ικανό να πραγματευόμαι τόσο απαιτητικά πνευματικώς ζητήματα.

Δημήτρης Ευαγγέλου

Αθήνα 26-4-2007

1. ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΦΥΣΙΚΗΣ

1.1. Στοιχεία θερμοδυναμικής συστήματος σε επαφή με δεξαμενή θερμότητας σε κατάσταση ισορροπίας

Θεωρούμε σύστημα σταθερής θερμοκρασίας T και βαθμών ελευθερίας N . Ένα τέτοιο σύστημα μπορεί να βρεθεί σε οποιαδήποτε κατάσταση από το διακριτό σύνολο καταστάσεων $\{\mu\}$, κάθε μια των οποίων καταλαμβάνει κάποια ενέργεια E_μ που ανήκει στο διακριτό φάσμα ενεργειών $\{E_0, E_1, \dots, E_\mu, \dots\}$. Το σύστημα μεταβαίνει τυχαία από τη μια κατάσταση στην άλλη με τρόπο που καθορίζει η δυναμική του συμπεριφορά. Όταν βρεθεί **σε ισορροπία**, η (διακριτή) κατανομή πιθανότητας κατάληψης των καταστάσεων είναι η κατανομή Boltzmann:

$$p_\mu = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_\mu}, \text{ όπου } Z = \sum_\mu e^{-\beta E_\mu} \quad (1)$$

Η Z ή **συνάρτηση επιμερισμού** πέρα από σταθερά κανονικοποίησης των πιθανοτήτων, περιέχει όλη τη φυσική πληροφορία του συστήματος.

Η μέση τιμή μιας ποσότητας Q με τιμή Q_μ στην κατάσταση μ , θα δίδεται από τον τύπο:

$$\langle Q \rangle = \sum_\mu Q_\mu p_\mu = \frac{1}{Z} \sum_\mu Q_\mu e^{-\beta E_\mu} \quad (2)$$

Οπότε για την εσωτερική ενέργεια έχουμε:

$$\langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_\mu E_\mu e^{-\beta E_\mu} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_\mu e^{-\beta E_\mu} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial \log Z}{\partial \beta} \quad (3)$$

Για το τετράγωνο της ενέργειας:

$$\langle E^2 \rangle = \frac{1}{Z} \sum_\mu E_\mu^2 e^{-\beta E_\mu} = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \sum_\mu e^{-\beta E_\mu} = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} \quad (4)$$

Και για την τυπική της απόκλιση:

$$(\Delta E)^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} - \left[-\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right]^2 = \frac{\partial^2 \log Z}{\partial \beta^2} \quad (5)$$

Ασχολούμαστε τώρα με την ειδική θερμότητα. Από τη θερμοδυναμική γνωρίζουμε ότι $C = \frac{\partial E}{\partial T}$. Οπότε:

$$C = \frac{\partial E}{\partial \beta} \frac{\partial \beta}{\partial T} = (-k\beta^2) \left(-\frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} \right) = k\beta^2 \frac{\partial^2 \log Z}{\partial \beta^2} \quad (6)$$

Όμως $(6) \xrightarrow{(5)} C = \frac{\partial E}{\partial T} = k\beta^2 (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$ (7)

δηλαδή συνδέεται ένα μικροσκοπικό μέγεθος (στατιστική διακύμανση ενέργειας) με ένα θερμοδυναμικό (ειδική θερμότητα) γεφυρώνοντας τις δύο προσεγγίσεις.

Από τα παραπάνω βγαίνει ένα ακόμη πολύ σημαντικό συμπέρασμα που διαπιστώνεται και στο εκτελεστικό κομμάτι της εργασίας. Τα μεγέθη E, C είναι εκτατά (ανάλογα του N), όποτε μέσω της (7) έχουμε:

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{\sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}}{\langle E \rangle} = \frac{\sqrt{\frac{1}{k\beta^2} C}}{\langle E \rangle} \sim \frac{N^{1/2}}{N} \sim \frac{1}{\sqrt{N}} \quad (8)$$

δηλαδή αυξάνοντας τους βαθμούς ελευθερίας, μειώνεται η στατιστική σχετική διακύμανση της ενέργειας.

Ορίζεται **επιδεκτικότητα** χ του μεγέθους X στο συζυγές του πεδίο-παράμετρο του συστήματος Y , το μέγεθος:

$$\chi = \frac{\partial \langle X \rangle}{\partial Y} \quad (9)$$

Η σύζευξη των X, Y εκφράζεται ως επιπλέον όρος $-XY$ στην Hamiltonian του συστήματος. Τότε

$$(2) \xrightarrow{(Q=X)} \langle X \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} X_{\mu} e^{-\beta(\dots - X_{\mu} Y + \dots)} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \log Z}{\partial Y} \quad (10)$$

και $(10) \Rightarrow \chi = \frac{\partial \langle X \rangle}{\partial Y} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial^2 \log Z}{\partial Y^2} = \dots = \beta(\langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2)$ (11)

Η γραμμική αυτή σχέση είναι γνωστή ως “θεώρημα γραμμικής απόκρισης”.

Η επιδεκτικότητα ορίζεται και τοπικά, για ζεύγος (Y_i, x_i) , μιας πλεγματικής θέσης i με τοπικό πεδίο Y_i και μεταβλητή απόκρισης x_i ως:

$$\chi_i = \frac{\partial \langle x_i \rangle}{\partial Y_i} \quad (12)$$

Μπορεί να γενικευθεί ακόμη περισσότερο, ορίζοντας την επιδεκτικότητα της μεταβλητής x_i της πλεγματικής θέσης i , στο πεδίο Y_j της θέσης j :

$$\chi_{ij} = \frac{\partial \langle x_i \rangle}{\partial Y_j} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial^2 \log Z}{\partial Y_i \partial Y_j} \quad (13)$$

Αντικαθιστώντας $Z = \sum_{\mu} e^{-\beta(\dots - x_{\mu}^i Y_i + \dots)}$ προκύπτει:

$$\chi_{ij} = \frac{\beta}{Z} \sum_{\mu} x_{\mu}^i x_{\mu}^j e^{-\beta E_{\mu}} - \beta \left[\frac{1}{Z} \sum_{\mu} x_{\mu}^i e^{-\beta E_{\mu}} \right] \left[\frac{1}{Z} \sum_{\nu} x_{\nu}^j e^{-\beta E_{\nu}} \right] = \beta(\langle x_i x_j \rangle - \langle x_i \rangle \langle x_j \rangle) = \beta G_C^{(2)}(i, j) \quad (14)$$

Η συνάρτηση (14) ονομάζεται **connected correlation (ccf)**, και δείχνει το βαθμό συσχετισμού των μεταβλητών x_i, x_j . Όταν διακυμαίνονται στην ίδια κατεύθυνση λαμβάνει θετική τιμή (συσχετισμένες), όταν διακυμαίνονται σε αντίθετες κατευθύνσεις λαμβάνει αρνητική τιμή (αντισυσχετισμένες) και όταν λαμβάνει μηδενική τιμή τότε οι τιμές των x_i, x_j είναι μεταξύ τους ανεξάρτητες.

Αφού παρουσιάσαμε τις γενικές ιδιότητες των συστημάτων με σταθερά T, N, ήρθε η ώρα να εξειδικεύσουμε την συζήτηση στην περίπτωση που μας ενδιαφέρει.

1.2. Το μοντέλο Ising

Θεωρούμε πλέγμα (διακριτό χώρο) $\{i\}$, κάθε σημείο του οποίου καταλαμβάνεται από ένα spin (μαγνητικό δίπολο) $\{s_i\}$, το οποίο μπορεί να λαβαίνει μια εκ των τιμών $\{-1, +1\}$. Τα spins αλληλεπιδρούν:

- μεταξύ τους \rightarrow επιπλέον όρος $-J_{ij} s_i s_j$ στη Hamiltonian του συστήματος, J_{ij} η “δύναμη” της αλληλεπίδρασης
- με εξωτερικό μαγνητικό πεδίο \rightarrow επιπλέον όρος $-B_i s_i$ στην Hamiltonian, B_i η ένταση του πεδίου στη θέση i

Επομένως η γενική μορφή της Ising Hamiltonian είναι:

$$H_{\text{Ising}} = -\sum_{ij} J_{ij} s_i s_j - \sum_i B_i s_i \quad (15)$$

Στην εργασία αυτή μελετούμε την απλουστευμένη περίπτωση: $J_{ij} = J > 0$ με i, j γειτονικές πλεγματικές θέσεις και $B_i = B = 0$:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - B \sum_i s_i \quad (16)$$

Κατάσταση του συστήματος, είναι μια εκ των 2^N διαφορετικών δυνατών κατανομών τιμών στα spins του πλέγματος. Άρα η συνάρτηση επιμερισμού:

$$Z = \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \dots \sum_{s_N=\pm 1} e^{-\beta \left\{ -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - B \sum_i s_i \right\}} \quad (17)$$

Η **μαγνήτιση M** του συστήματος υπολογίζεται με αντικατάσταση της Z από την (17) στην (10) για $Y=B$, όμως βρίσκεται και ευκολότερα υπολογίζοντας τη μέση τιμή της σε πολλές καταστάσεις του συστήματος:

$$\langle M \rangle = \left\langle \sum_i s_i \right\rangle \quad (18)$$

Η **μαγνητική επιδεκτικότητα** χ μπορεί να υπολογιστεί με αντικατάσταση της Z από τη (17) στην (11), αλλά πιο εύκολα δια του υπολογισμού της μέσης τιμής των διακυμάνσεων της μαγνήτισης σε πολλές καταστάσεις:

$$\chi = \beta(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \quad (19)$$

Με παρόμοιο σκεπτικό θα υπολογιστούν και τα μεγέθη $\langle E \rangle, C$.

Αν αντικαταστήσουμε την γενική H_{Ising} από την (15) στη (13), προκύπτει η **spin-spin connected correlation function (ssccf)**:

$$G_C^{(2)}(i, j) = \langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle \quad (20)$$

1.3. Οι ιδιότητες του μοντέλου Ising

Το απλουστευμένο μοντέλο Ising έχει επιλυθεί αναλυτικά σε πλέγματα 1D και 2D, ενώ σε 3D πλέγμα δεν είναι επιλύσιμο. Από τις διαθέσιμες λύσεις και τις υπολογιστικές προσομοιώσεις που έχουν γίνει, έχει συναχθεί το συμπέρασμα ότι κινούμενοι στο φάσμα των θερμοκρασιών, στα πλέγματα 2D και 3D συντελείται μετάβαση φάσης ενώ αντιθέτως σε 1D δεν έχουμε μετάβαση φάσης. Η μετάβαση είναι από την παραμαγνητική φάση όπου $m = 0$ (υψηλές θερμοκρασίες), στη σιδηρομαγνητική φάση όπου $m \neq 0$ (χαμηλές θερμοκρασίες), και πραγματοποιείται στην περιοχή γύρω από κάποια **κρίσιμη θερμοκρασία** T_C χαρακτηριστική του αριθμού των διαστάσεων και της γεωμετρίας του πλέγματος. Η μετάβαση είναι 2^{ης} τάξεως, διότι η **παράμετρος τάξης** m είναι συνεχής συνάρτηση της θερμοκρασίας. Τη λέμε παράμετρο τάξης διότι η τιμή της εκφράζει το κατά πόσο το σύστημα είναι εύτακτο, λαμβάνοντας μέγιστη τιμή 1 (ομόρροπα spins \rightarrow φερρομαγνητική φάση) και ελάχιστη τιμή 0 (τυχαίως προσανατολισμένα spins \rightarrow παραμαγνητική φάση).

Η περιοχή θερμοκρασιών γύρω από την T_C , ονομάζεται **κρίσιμη περιοχή**. Τα φαινόμενα που λαμβάνουν χώρα σε αυτήν ονομάζονται **κρίσιμα φαινόμενα** και αποτελούν το επίκεντρο της μελέτης όσων ασχολούνται με το μοντέλο αυτό. Το ίδιο ισχύει και για εμάς.

Στο **2D-πλέγμα**, τα αποτελέσματα της αναλυτικής λύσης μας αποκαλύπτουν ότι η μαγνήτιση m είναι συνεχής συνάρτηση που λαμβάνει τιμή 0 σε θερμοκρασίες κάτω από β_C και 1 σε όλη σχεδόν την περιοχή πάνω από β_C . Στην περιοχή β_C^+ συμπεριφέρεται ως:

$$m \sim t^\beta \quad (21)$$

όπου $t = \frac{\beta_C - \beta}{\beta_C}$ η **ανηγμένη θερμοκρασία (reduced temperature)**

που εκφράζει τη σχετική απόσταση από το κρίσιμο σημείο, και β ο επονομαζόμενος **κρίσιμος εκθέτης** της μαγνήτισης.

Η **ενέργεια e** επίσης είναι συνεχής συνάρτηση της θερμοκρασίας.

Η **μαγνητική επιδεκτικότητα χ** αποκλίνει εκθετικά ως εξής:

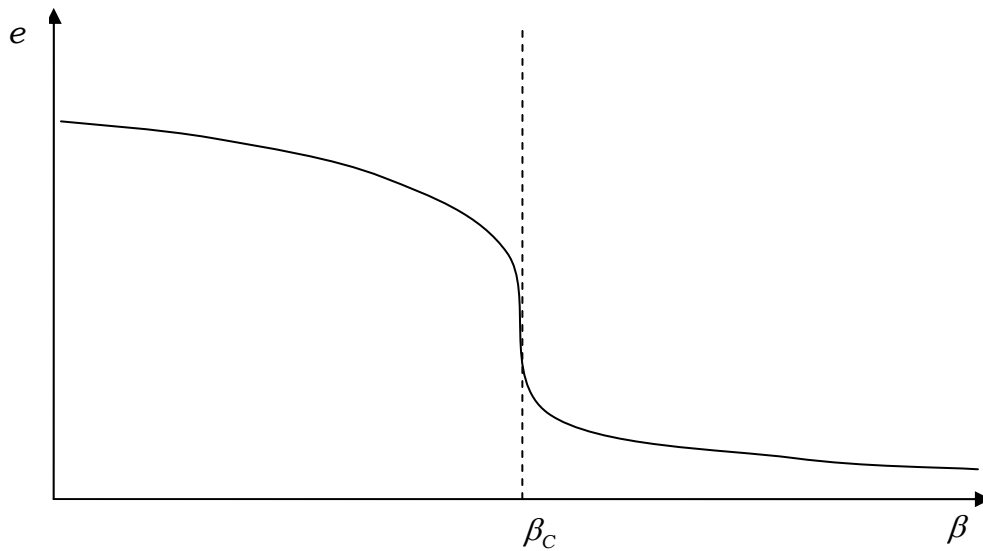
$$\chi \sim |t|^{-\gamma} \quad (22)$$

όπου γ ο κρίσιμος εκθέτης της μαγνητικής επιδεκτικότητας, άρα σημειώνει απειρισμό για $\beta = \beta_C$.

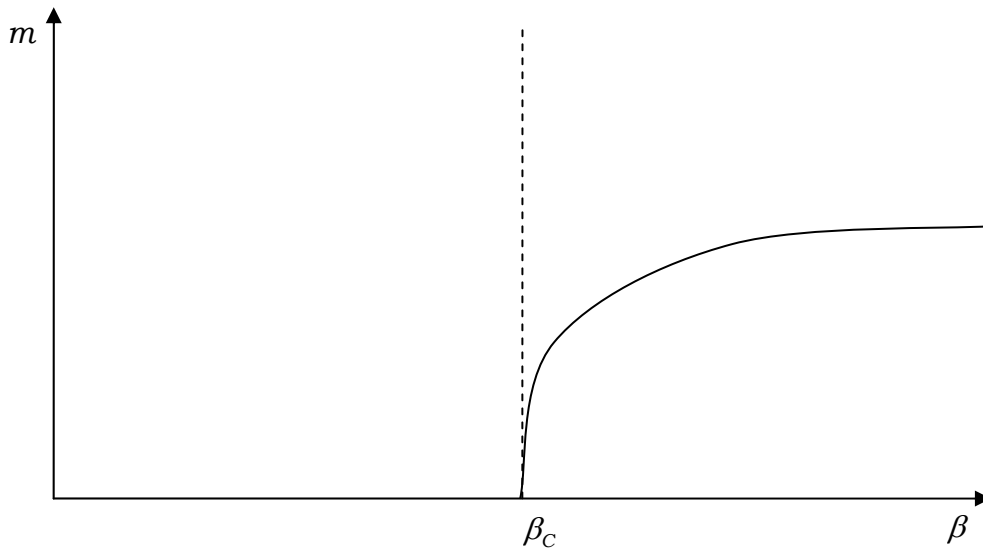
Η ειδική θερμότητα c αποκλίνει λογαριθμικά ως:

$$c \sim \ln|t| \quad (23)$$

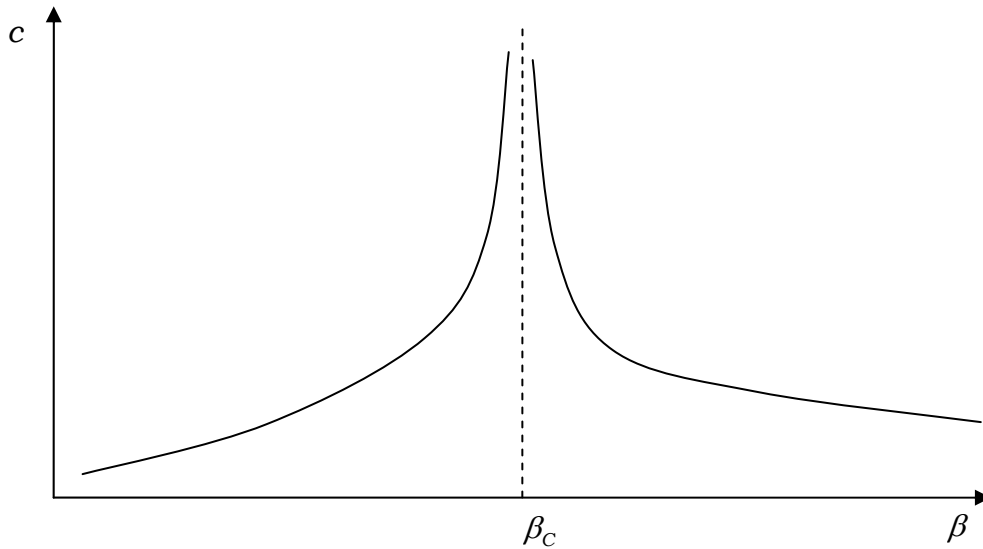
επομένως απειρίζεται στο $\beta = \beta_C$.



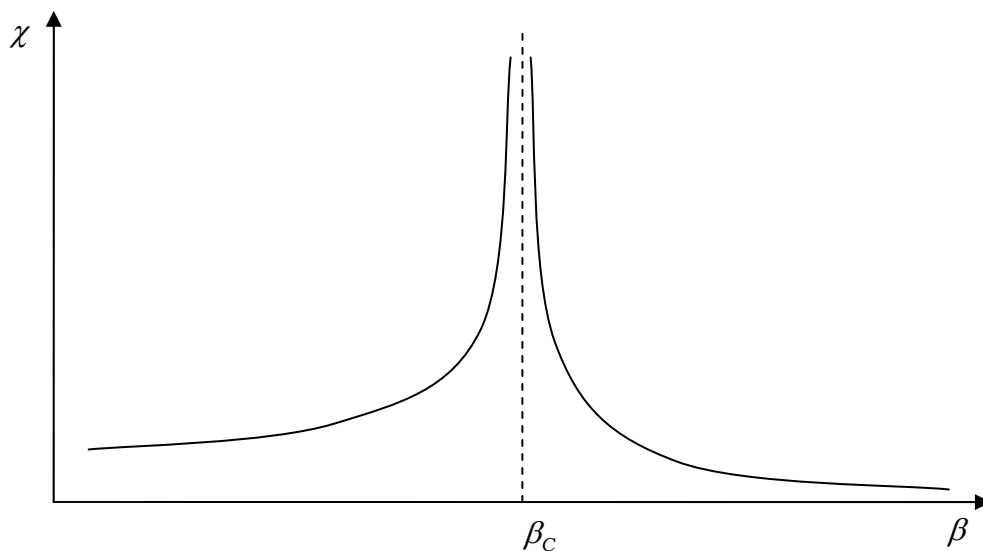
Σχήμα 1.1. Τυπική συμπεριφορά της Ενέργειας του συστήματος στο φάσμα των θερμοκρασιών.



Σχήμα 1.2. Τυπική συμπεριφορά της Μαγνήτισης στο φάσμα των θερμοκρασιών.



Σχήμα 1.3. Τυπική συμπεριφορά της Ειδικής Θερμότητας στο φάσμα των θερμοκρασιών.



Σχήμα 1.4. Τυπική συμπεριφορά της Μαγνητικής Επιδεκτικότητας στο φάσμα των θερμοκρασιών.

Η συνάρτηση $sscf$ παρουσιάζει κρίσιμη συμπεριφορά:

$$G(r) \sim \frac{e^{-\frac{r}{\xi}}}{r^{d-2+\eta}}, \quad |t| \ll 1, \quad r \gg 1 \quad (24)$$

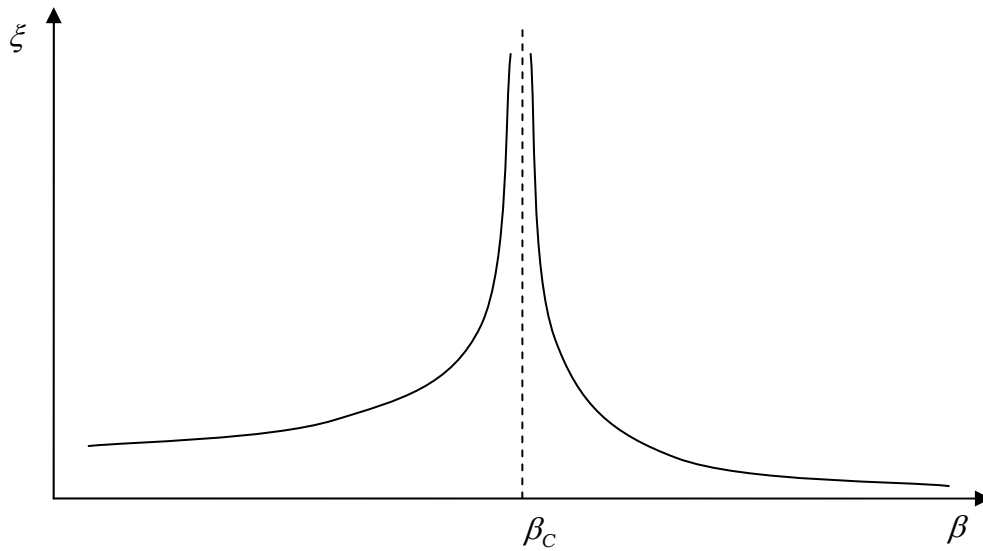
όπου d ο αριθμός των διαστάσεων του πλέγματος, η κρίσιμος εκθέτης και ξ το **μήκος συσχετισμού** που εκφράζει ένα μέτρο του μήκους εντός του οποίου δύο spins θα έχουν έντονα συσχετισμένες τιμές.

Το μήκος συσχετισμού ξ , επίσης αποκλίνει στην κρίσιμη περιοχή:

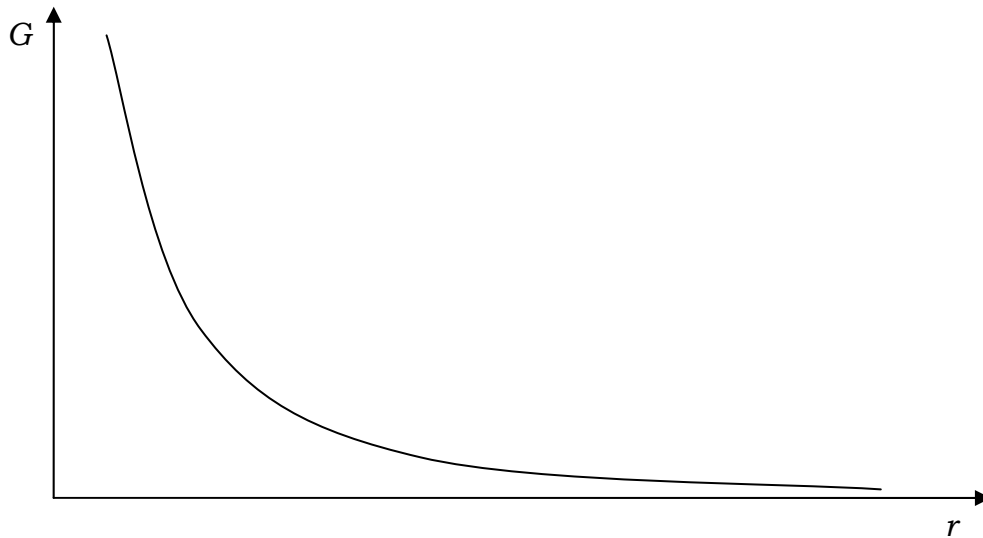
$$\xi \sim |t|^{-\nu} \quad (25)$$

με ν τον αντίστοιχο κρίσιμο εκθέτη. Παρατηρούμε ότι για $t = 0 \Rightarrow \beta = \beta_C$, $\xi \rightarrow \infty$ που έχει επίπτωση στην sscf:

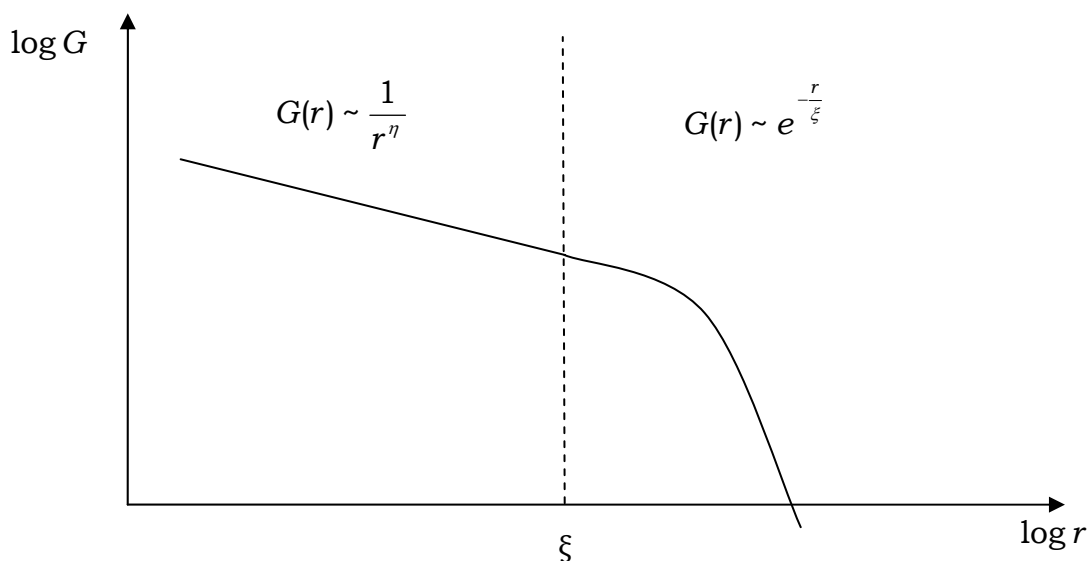
$$(24) \Rightarrow G(r) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}}, \quad r \gg 1 \quad (26)$$



Σχήμα 1.5. Τυπική συμπεριφορά του Μήκους Συσχετισμού στο φάσμα των θερμοκρασιών.



Σχήμα 1.6. Τυπική μορφή της Συνάρτησης Συσχετισμού (sscf).



Σχήμα 1.7. Διάκριση περιοχών τιμών για την sscf με βάση την υπεριοχύουσα συναρτησιακή της συμπεριφορά.

Οι τιμές όλων των κρίσιμων εκθετών έχουν υπολογισθεί αναλυτικά για το 2D-Ising. Επίσης, έχει υποτεθεί ότι και το 3D-Ising μοντέλο συμπεριφέρεται κατά τον τρόπο που υποδηλώνουν οι σχέσεις (21)-(22), (24)-(26) στην κρίσιμη περιοχή, έτσι έχουν προσδιοριστεί και σε αυτό οι κρίσιμοι εκθέτες προσεγγιστικά. Συγκεντρώνουμε κάποια αποτελέσματα στον επόμενο πίνακα:

Φυσική Ποσότητα	Κρίσιμος Εκθέτης	Τιμή εκθέτη	
		d=2 (αναλυτικά)	d=3 (προσεγγιστικά)
Ειδική Θερμότητα	α	-	0.104 ± 0.003
Μαγνητική Επιδεκτικότητα	γ	$7/4$	1.2385 ± 0.0015
Μαγνήτιση	β	$1/8$	0.325
Μήκος συσχετισμού	ν	1	$0.632 \pm 0.001 \pm 0.025$
Συνάρτηση Συσχετισμού	η	$1/4$	0.039 ± 0.004

Πίνακας 1.1. Κρίσιμοι εκθέτες σε συστήματα 2D και 3D Ising (πηγή [6]).

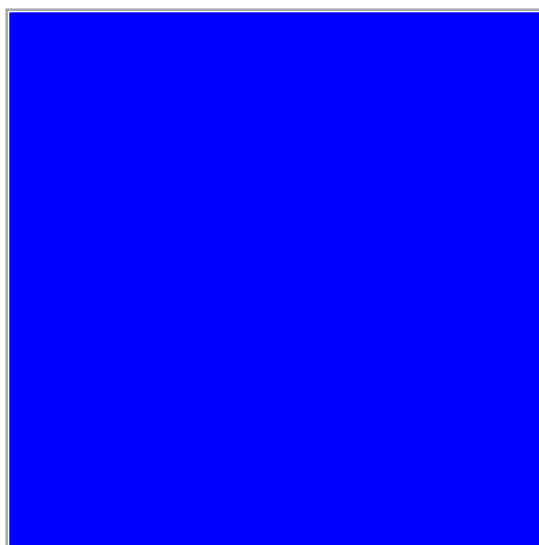
Η κρίσιμη περιοχή στο θερμοκρασιακό φάσμα έχει μια πολύ σημαντική ιδιότητα. Διατηρεί ανεξάρτητους τους κρίσιμους εκθέτες της από πλήθος χαρακτηριστικών παραμέτρων του συστήματος, όπως η γεωμετρία του πλέγματος ή η δύναμη της αλληλεπίδρασης J . Με άλλα λόγια, μια ολόκληρη ομάδα από διαφορετικά μοντέλα υπακούει τις ίδιες εξισώσεις (21) έως (26). Ο όρος που συνοψίζει τα παραπάνω λέγεται **παγκοσμιότητα (universality)**, και η ομάδα των συστημάτων με κοινή κρίσιμη συμπεριφορά, **ομάδα παγκοσμιότητας (universality class)**.

Από αυτό μπορούμε να ωφεληθούμε ως εξής: να εξάγουμε αποτελέσματα στο απλούστερο δυνατό από τα μοντέλα μιας ομάδας, και αυτομάτως θα έχουμε χαρακτηρίσει και την υπόλοιπη ομάδα στην οποία ενδέχεται να ανήκει και κάποιο πραγματικό φυσικό σύστημα. Για να κατανοήσουμε γιατί συμβαίνει η παγκοσμιότητα, πρέπει να εξετάσουμε τα κρίσιμα φαινόμενα μικροσκοπικά.

1.4. Μικροσκοπική μελέτη της μεταβάσεως φάσης

Η δυναμική εξέλιξη του συστήματος χαρακτηρίζεται από δύο τάσεις. Η μία είναι να προσπαθούν τα spins να επηρεάζουν το ένα το άλλο, και οικοδομείται στη στοιχειώδη αλληλεπίδραση ανάμεσα σε γείτονες-spins. Η δεύτερη είναι να μην επικοινωνούν μεταξύ τους που απορρέει από την απορρόφηση ποσών ενέργειας από την δεξαμενή θερμότητας με αποτέλεσμα τη διέγερση τους σε καταστάσεις υψηλότερης ενέργειας από τη δέσμια με τους γείτονές τους. Ας δούμε ένα παράδειγμα:

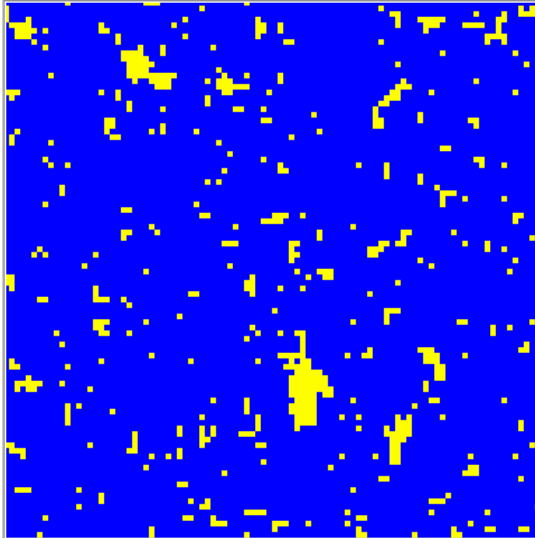
Θεωρούμε 2D-πλέγμα τετραγωνικής συμμετρίας με $J = 1$ και αρχική θερμοκρασία $T = 0$ (ή $\beta = \infty$). Κάθε spin δέχεται μόνο την επίδραση των γειτονικών του, που το καθλώνουν σε ομόρροπη με αυτά κατεύθυνση. Το σύστημα παρουσιάζει πλήρη τάξη που εκδηλώνεται μακροσκοπικά με εμφάνιση μέγιστης δυνατής μαγνήτισης.



Σχήμα 1.8. Το σύστημα για θερμοκρασία $T=0$. Όλα τα spins ομόρροπα.

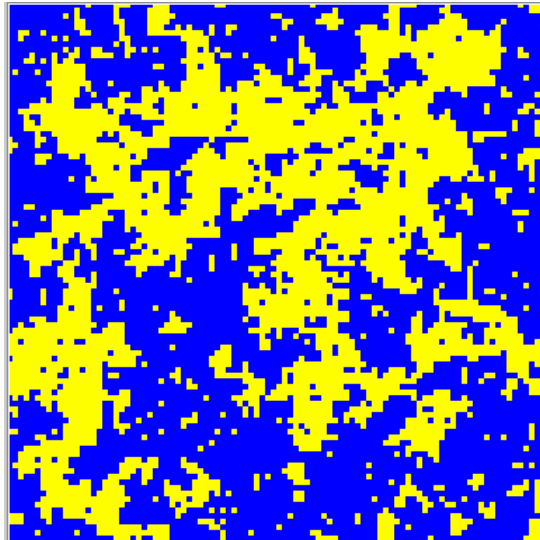
Αυξάνουμε τη θερμοκρασία σε $T = 2.100$ (ή $\beta = 0.4762$). Για κάθε spin υπάρχει μια μικρή πιθανότητα να αντιτεθεί στην κατεύθυνση που ορίζουν τα γειτονικά του, προκαλώντας αύξηση στην ενέργεια. Αν το επιτύχει, αυτομάτως δημιουργεί ευνοϊκότερες προϋποθέσεις γι' αυτά ώστε να το ακολουθήσουν, με μικρότερο ενεργειακό κόστος, μια και θα έχουν ένα λιγότερο γείτονα-δεσμότη.

Η διαδικασία μπορεί να συνεχιστεί και σε πιο εξωτερικά στρώματα ως προς το αρχικό spin (ή πυρήνα) δημιουργώντας μια ολόκληρη γειτονιά από ανεστραμμένα spins που ονομάζουμε **σμήνος (cluster)**.



Σχήμα 1.9 $T=2.100$. Τα πρώτα μικρά σμήνη σχηματίζονται.

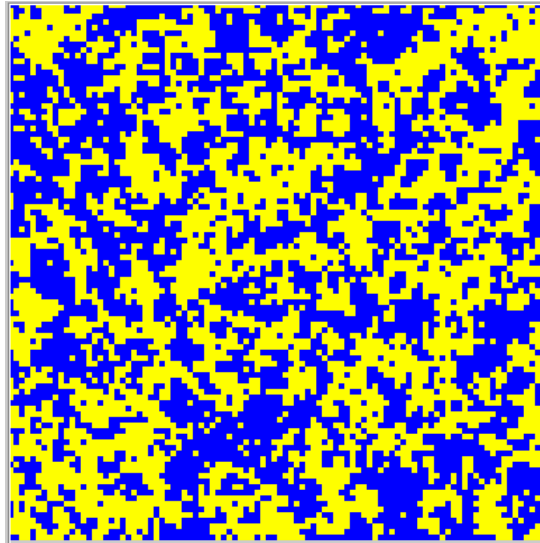
Με άλλα λόγια, σμήνος είναι μια ομάδα spins μέσα σε ένα εύτακτο περιβάλλον, που αλλάζει κατεύθυνση προκαλώντας διακύμανση στην τιμή της ενέργειας και της μαγνήτισης του συστήματος. Αυξάνοντας κλιμακωτά τη θερμοκρασία, το μέγεθος των σμηνών ολοένα αυξάνεται. Ομοίως οι διακυμάνσεις στην ενέργεια (μεγαλύτερο σμήνος \rightarrow μεγαλύτερη επιφάνεια-σύνορο ανάμεσα στα spins σμήνους και τα εξωτερικά γειτονικά \rightarrow περισσότεροι σπασμένοι δεσμοί), και τη μαγνήτιση (μεγαλύτερο σμήνος \rightarrow περισσότερα “μαγνητάκια” αλλάζουν φορά). Η αύξηση αυτή συνεχίζεται μέχρι την κρίσιμη θερμοκρασία $T = T_c = 2.269$ (ή $\beta = 0.4407$).



Σχήμα 1.10. $T=T_c=2.269$. Δε διακρίνεται η φορά της μαγνήτισης του συστήματος όταν ήταν παγωμένο.

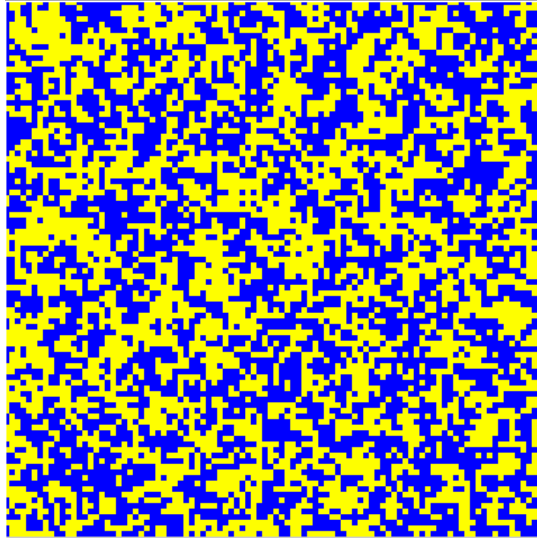
Τώρα οι δύο ανταγωνιζόμενες τάσεις έχουν ισοδύναμη ισχύ: η μια έχει διατηρήσει την τάξη τοπικά όμως, στις γειτονίες των spins που δεν άλλαξαν κατεύθυνση όσο και στα σμήνη, αλλά η δεύτερη έχει καταφέρει

να δημιουργήσει τόσο πολλά και μεγάλα σμήνη ώστε δε διακρίνεται ποια ήταν η φορά της μαγνήτισης όταν επικρατούσε απόλυτη τάξη. Επομένως δεν έχει νόημα να διακρίνουμε τις γειτονιές, είναι όλες σμήνη. Αυξάνουμε και άλλο τη θερμοκρασία σε $T = 3.100$ (ή $\beta = 0.3226$). Τα μέγιστου δυνατού μεγέθους σχηματισμένα σμήνη απειλούνται να διαλυθούν από την ίδια τάση που τα δημιούργησε: στο εσωτερικό τους υπάρχει μεγάλη πια πιθανότητα κάποιο spin να αναστραφεί συμπαρασύροντας και κάποια που το περιβάλλουν, δημιουργώντας ένα νέο μικρότερο σμήνος υποβαθμίζοντας έτσι το μητρικό.



Σχήμα 1.11. $T=3.100$. Υπερίσχυση της τάσεως αυτονομίας των spins με συνέπεια την κατάτμηση των μεγάλων σμηνών σε μικρότερα.

Αυξάνοντας κλιμακωτά τη θερμοκρασία, όλο και περισσότερα spins θα γίνονται πυρήνες σμηνών, τα μεγέθη των σμηνών θα μειώνονται και στο όριο $T = \infty$ (ή $\beta = 0$) θα έχουμε τόσα σμήνη όσα και spins με το ελάχιστο δυνατό μέγεθος του ενός spin. Θα επικρατεί απόλυτη αταξία που εκδηλώνεται μακροσκοπικά με μηδενική μαγνήτιση.



Σχήμα 1.12. $T=\infty$. Κάθε spin λαμβάνει τυχαία φορά. Δεν αλληλεπιδρά με κανένα άλλο spin.

Το μέγεθος των σμηνών ποσοτικοποιείται από το μήκος συσχετισμού ξ .

2. ΜΕΘΟΔΟΣ MONTE CARLO

2.1. Διαδικασία Markov

Θεωρούμε σύστημα σταθερής θερμοκρασίας T και βαθμών ελευθερίας N . Η πιθανότητα να βρίσκεται τη χρονική στιγμή t σε κάποια κατάσταση μ από το διακριτό σύνολο καταστάσεων $\{\mu\}$, είναι $w_\mu(t)$. Μπορεί να μεταβαίνει από αρχική κατάσταση μ σε τελική ν με πιθανότητα $P(\mu \rightarrow \nu)$ που ονομάζεται **πιθανότητα μεταβάσεως** από την μ στην ν . Η θεμελιώδης παραδοχή που κάνουμε είναι ότι το σύστημά μας είναι “Μαρκοβιανό” που σημαίνει:

- Οι $P(\mu \rightarrow \nu)$ είναι σταθερές στο χρόνο
- Μια $P(\mu \rightarrow \nu)$ εξαρτάται μονάχα από τα χαρακτηριστικά των καταστάσεων μ, ν , και όχι από την έως τώρα τροχιά του συστήματος στο χώρο των καταστάσεων.

Το σύστημα θα ικανοποιεί τη *συνθήκη εργοδικότητας* (condition of ergodicity): όταν βρίσκεται σε κάποια κατάσταση μ , οποιαδήποτε άλλη κατάσταση ν είναι προσβάσιμη από αυτό μετά από πεπερασμένο αριθμό μεταβάσεων. Ακόμη θα ισχύει:

$$\frac{dw_\mu}{dt} = \sum_\nu [w_\nu(t)P(\nu \rightarrow \mu) - w_\mu(t)P(\mu \rightarrow \nu)] \quad (1)$$

ή ότι σε χρονική στιγμή t , ο ρυθμός άφιξης του συστήματος στην κατάσταση μ μείον το ρυθμό αναχώρησής του από την κατάσταση μ σε κάποια άλλη, ισούται με το ρυθμό μεταβολής της πιθανότητάς του να βρίσκεται στην κατάσταση μ τη χρονική στιγμή t .

Οποιαδήποτε χρονική στιγμή, το σύστημα πρέπει να είναι σε κάποια από τις καταστάσεις $\{\mu\}$:

$$\sum_\mu w_\mu(t) = 1 \quad (2)$$

και να πραγματοποιεί νέα μετάβαση σε κατάσταση ν , χωρίς να αποκλείεται η τρέχουσα κατάσταση μ :

$$\sum_\nu P(\mu \rightarrow \nu) = 1 \quad (3)$$

Η εξίσωση (1) είναι 1^{ης} τάξεως με πραγματικές παραμέτρους $P(\mu \rightarrow \nu)$, οι $w_\mu(t)$ λαμβάνουν τιμή ανάμεσα σε 0 και 1 σύμφωνα με τη (2) και όπως μπορεί να αποδειχθεί, στο όριο $t \rightarrow \infty$:

$$0 = \sum_\nu [p_\nu P(\nu \rightarrow \mu) - p_\mu P(\mu \rightarrow \nu)] \quad (4)$$

$$\sum_\mu p_\mu = 1 \quad (5)$$

Οι εξισώσεις (4),(5) υποδηλώνουν ότι το σύστημα έχει περιέλθει σε *δυναμική ισορροπία*, δηλαδή καταλαμβάνει καταστάσεις σύμφωνα με την κατανομή πιθανότητας p_μ ανά σταθερή χρονική περίοδο, και όχι για κάθε t (limit cycle). Ως συνέπεια, δεν είναι δυνατό να αναπαράγει την κατανομή πιθανοτήτων Boltzmann όταν η περίοδος αυτή είναι διάφορη του 1. Θέτουμε την επιπλέον ικανή (όχι αναγκαία) *συνθήκη λεπτομερούς ισοζύγησης* (detailed balance condition):

$$p_\mu P(\mu \rightarrow \nu) = p_\nu P(\nu \rightarrow \mu) \quad (6)$$

ή ισοδύναμα ότι το σύστημα είναι συμμετρικό στο μετασχηματισμό $t \rightarrow -t$. Πλέον το σύστημα βρίσκεται σε **ισορροπία** και υπόκειται στη στατιστική Boltzmann:

$$p_\mu = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_\mu}, \text{ όπου } Z = \sum_\mu e^{-\beta E_\mu} \quad (7)$$

Τότε έχουμε:

$$(6) \xrightarrow{(7)} \frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} \quad (8)$$

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑ: Αν θέλουμε να φτιάξουμε μια Μαρκοβιανή διαδικασία-αλγόριθμο, η οποία σε σύστημα θερμοκρασίας T , βαθμών ελευθερίας N , με δυνατές καταστάσεις $\{\mu\}$, να ενεργοποιεί μια κατάσταση ν δοθείσης καταστάσεως μ κατά τρόπο ώστε για άπειρες τέτοιες μεταβάσεις η συχνότητα εμφάνισης κάθε κατάστασης να συγκλίνει στην προβλεπόμενη από τη στατιστική Boltzmann, αρκεί να επιλέξουμε πιθανότητες μετάβασης $P(\mu \rightarrow \nu)$ που να υπόκεινται στις σχέσεις (3), (8) και να ικανοποιούν τη συνθήκη εργοδικότητας.

2.1.1. Λόγοι αποδοχής

Συνηθίζεται να αναλύουμε τις πιθανότητες μετάβασης:

$$P(\mu \rightarrow \nu) = g(\mu \rightarrow \nu) A(\mu \rightarrow \nu) \quad (9)$$

όπου: $g(\mu \rightarrow \nu)$ η *πιθανότητα επιλογής* της μετάβασης (Selection Probability) ή, δεδομένης αρχικής κατάστασης μ , η πιθανότητα να επιλεγεί από τη διαδικασία ως υποψήφια τελική κατάσταση η ν , και $A(\mu \rightarrow \nu)$ ο *λόγος αποδοχής* της μετάβασης (Acceptance Ratio) ή, δεδομένου ότι επιλέχθηκε η μετάβαση $\mu \rightarrow \nu$, η διαδικασία θα την πραγματοποιήσει με πιθανότητα $A(\mu \rightarrow \nu)$.

Συνεπώς:

$$(8) \xrightarrow{(9)} e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} = \frac{g(\mu \rightarrow \nu) A(\mu \rightarrow \nu)}{g(\nu \rightarrow \mu) A(\nu \rightarrow \mu)} \quad (10)$$

Παρατηρούμε ότι ο λόγος $\frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)}$ μπορεί να λάβει οποιαδήποτε τιμή από 0 έως ∞ , που σημαίνει ότι είμαστε σε θέση να επιλέξουμε όποιο ζεύγος $g(\mu \rightarrow \nu)$, $g(\nu \rightarrow \mu)$ επιθυμούμε. Αφότου το κάνουμε, πρέπει να

μεγιστοποιήσουμε και τις αντίστοιχες πιθανότητες $A(\mu \rightarrow \nu)$, $A(\nu \rightarrow \mu)$ ώστε το σύστημα να κάνει μεταβάσεις συχνότερα, άρα να εξελίσσεται ταχύτερα. Γνωρίζουμε ότι λαμβάνουν τιμή από 0 έως 1, οπότε συμφέρει να θέσουμε τη μεγαλύτερη από τις δύο ίση με 1 και την μικρότερη όσο πρέπει ώστε να ικανοποιείται η (10).

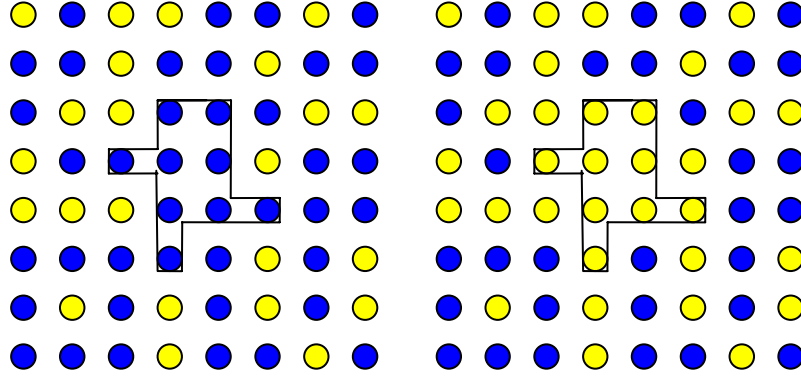
Τα παραπάνω είναι ένας εύκολος τρόπος να δημιουργήσουμε αλγόριθμο με τις επιθυμητές *πιθανότητες μετάβασης*. Η απ' ευθείας εύρεσή του είναι γενικώς δύσκολη διαδικασία. Το τμήμα που πληρώνουμε είναι η ενδεχόμενη καθυστέρηση στην εξέλιξη του συστήματος λόγω απόρριψης κάποιων από τις μεταβάσεις.

2.1.2. Ο αλγόριθμος Wolff

Είναι ο αλγόριθμος που χρησιμοποιούμε στην εργασία μας. Τα βήματά του είναι τα εξής:

- I. Διάλεξε τυχαία ένα spin από το πλέγμα. Το spin αυτό είναι ο πυρήνας ενός νέου σμήνους.
- II. Για κάθε γειτονικό spin, έλεγξε αν είναι ομόροπο και πρόσθεσε το στο σμήνος με πιθανότητα P_{add} .
- III. Για κάθε spin που προστέθηκε, επανάλαβε το προηγούμενο βήμα και στα γειτονικά του έως ότου να έχουν εξετασθεί για συμπερίληψη όλα τα γειτονικά στο σμήνος spins, αντιμετωπίζοντας ως εξής δύο ιδιαίτερες περιπτώσεις:
 - Spin που απερρίφηθη σε προηγούμενη επανάληψη, μπορεί να επανεξεταστεί σε επόμενη αν αυτό προκύψει.
 - Spin που συμπεριλήφθηκε σε προηγούμενη επανάληψη, δεν θα το επανεξετάσουμε σε επόμενη αν αυτό προκύψει.
- IV. Ανάστρεψε το σμήνος.

Πρέπει να προσδιοριστεί η P_{add} . Έστω οι δύο καταστάσεις μ, ν που φαίνονται στο σχήμα:



Σχήμα 2.1. Καταστάσεις μ (αριστερά), ν (δεξιά) και ένα σμήνος για αναστροφή.

Το σύστημα θα κάνει τη μετάβαση $\mu \rightarrow \nu$ αν αναστρέψουμε το σμήνος που περικλείει η συνεχής γραμμή. Αντίστοιχα και για τη μετάβαση $\nu \rightarrow \mu$. Έστω πραγματοποιούμε τις δύο μεταβάσεις με τρόπο ώστε το αρχικό spin-πυρήνας και η πορεία με την οποία προστίθενται τα spins στο σμήνος να είναι κοινά. Τότε αν m το πλήθος των δεσμών που σπάνε κατά την $\mu \rightarrow \nu$ και n το πλήθος των δεσμών που σπάνε κατά την $\nu \rightarrow \mu$, θα ισχύει $g(\mu \rightarrow \nu) = A(1 - P_{add})^m$ και $g(\nu \rightarrow \mu) = A(1 - P_{add})^n$ όπου A εξαρτάται από την πορεία δημιουργίας του σμήνους και $1 - P_{add}$ η πιθανότητα να μην προστεθεί κάποιο spin σε αυτό. Τότε:

$$(10) \rightarrow (1 - P_{add})^{m-n} \frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} \quad (11)$$

Επίσης ισχύει
$$E_\nu - E_\mu = 2J(m - n) \quad (12)$$

διότι κατά την $\mu \rightarrow \nu$, για κάθε δεσμό που σπάει η ενέργεια αυξάνεται κατά $+2J$ και για κάθε έναν που δημιουργείται μειώνεται κατά $-2J$ οπότε:

$$(11) \xrightarrow{(12)} \frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = [e^{2\beta J} (1 - P_{add})]^{n-m} \quad (13)$$

Θέτουμε $P_{add} \equiv 1 - e^{-2\beta J}$ ώστε το δεξιό μέλος να είναι σταθερό (ίσο με 1) ανεξάρτητο από τις παραμέτρους της μετάβασης, και επιλέγουμε $A(\mu \rightarrow \nu) = 1 \quad \forall \mu, \nu$ ως βέλτιστη επιλογή.

Ο αλγόριθμος ικανοποιεί τη συνθήκη της εργοδικότητας, διότι, δεδομένης της πιθανότητας για κάθε spin να επιλεγεί ως πυρήνας σμήνους ενός μέλους με σκοπό την αλλαγή της φοράς του, θα υπάρχει και η δυνατότητα κατάλληλης διαδοχής τέτοιων μεταβάσεων που θα οδηγήσουν το σύστημα στην επιθυμητή κατάσταση σε πεπερασμένο πλήθος βημάτων.

2.2. Τύπος πλέγματος

Έχοντας αποφασίσει σε πόσες διαστάσεις εκτείνεται το μοντέλο μας, πρέπει να επιλέξουμε τα γεωμετρικά του χαρακτηριστικά και τις συνοριακές του συνθήκες. Ενδεικτικές περιπτώσεις συμμετρίας πλέγματος σε 2D είναι η *τετραγωνική* (square), η *τριγωνική* (triangular), η *εξαγωνική* (honeycomb) κλπ, ενώ σε 3D η *κυβική* (cubic), η *πλεύρο-κεντρομένη κυβική* (fcc), η *βάση-κεντρομένη κυβική* (bcc) κλπ. Η τελική μας επιλογή δεν θα επηρεάσει καθόλου τα εξαγόμενα φυσικά αποτελέσματα διότι, όπως έχουμε αναφέρει η *παγκοσμιότητα* ως ιδιότητα του μοντέλου οδηγεί σε κοινή *κρίσιμη συμπεριφορά* για συστήματα διαφορετικής γεωμετρίας με ίδια διάσταση πλέγματος.

Επίσης περιορισμοί στη μνήμη και τον χρόνο εκτέλεσης δε μας επιτρέπουν να προσομοιώσουμε συστήματα με πολύ μεγάλο πλήθος βαθμών ελευθερίας, επομένως το πλέγμα μας θα έχει πεπερασμένο πλήθος πλεγματικών σημείων. Μπορούμε όμως να προσεγγίσουμε τη συμπεριφορά του απείρου συστήματος από ένα πεπερασμένο, εφαρμόζοντας περιοδικές συνοριακές συνθήκες, καθιστώντας έτσι όλα τα πλεγματικά σημεία ισοδύναμα. Οι δημοφιλέστερες περιπτώσεις περιοδικών σ.σ. είναι *τοροϊδείς σ.σ.* και *ελικοειδείς σ.σ.* Τις αποτυπώνουμε σε τετραγωνικά πλέγματα 16 πλεγματικών θέσεων:

1	2	3	4	5	1	2	3	4	5
6	7	8	9	10	6	7	8	9	10
11	12	13	14	15	11	12	13	14	15
16	17	18	19	20	16	17	18	19	20
21	22	23	24	25	21	22	23	24	25
1	2	3	4	5					
6	7	8	9	10					
11	12	13	14	15					
16	17	18	19	20					
21	22	23	24	25					

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
16	17	18	19	20	21	22	23	24	25
21	22	23	24	25	1	2	3	4	5
1	2	3	4	5					
6	7	8	9	10					
11	12	13	14	15					
16	17	18	19	20					
21	22	23	24	25					

Σχήμα 2.2. Τοροϊδείς συνοριακές συνθήκες (πάνω) και ελικοειδείς συνοριακές συνθήκες (κάτω), σε τετραγωνικό πλέγμα γραμμικής διάστασης $L=5$.

Σε τοροϊδείς σ.σ. κινούμενοι οριζόντια η κάθετα, συναντούμε ανά σταθερή περίοδο βημάτων ίση με \sqrt{N} την πλεγματική θέση από την οποία ξεκινήσαμε. Σε ελικοειδείς σ.σ. κινούμενοι κάθετα συναντούμε την αρχική μας θέση ανά σταθερή περίοδο βημάτων \sqrt{N} , όμως οριζόντια θα πρέπει να κάνουμε \sqrt{N} βήματα συν 1 προς τα πάνω αλλοιώνοντας ελαφρά την περιοδικότητα. Με το τρικ αυτό επιτυγχάνεται η γρηγορότερη προσπέλαση στις τιμές των spins από τον υπολογιστή, όμως εισάγεται

και ένα μικρό συστηματικό σφάλμα με βασικότερη επίπτωση στον υπολογισμό της $ssccf$. Πιο συγκεκριμένα, έστω θέλουμε να προσδιορίσουμε την $G(2)$ δια του συσχετισμού στα ζεύγη s_{19}, s_{21} σε οριζόντια διεύθυνση και s_{19}, s_4 σε κάθετη. Πρέπει να ισχύει $G(2) = \langle s_{19}s_{21} \rangle - \langle s_{19} \rangle \langle s_{21} \rangle = \langle s_{19}s_4 \rangle - \langle s_{19} \rangle \langle s_4 \rangle$ αθροίζοντας σε όλες τις δυνατές καταστάσεις. Ταυτόχρονα όμως έχουμε $\langle s_{19}s_4 \rangle - \langle s_{19} \rangle \langle s_4 \rangle = G(3)$ και $\langle s_{19}s_{21} \rangle - \langle s_{19} \rangle \langle s_{21} \rangle = G(\sqrt{10})$ άρα $G(3) = G(\sqrt{10})$ που δεν ισχύει. Βέβαια, το σφάλμα αυτό είναι ανεπαίσθητο, ιδιαίτερα για μεγάλα πλέγματα ώστε υπερκαλύπτεται από το στατιστικό, μια και τα διαθέσιμα δείγματα είναι πολύ μικρότερα από τις 2^N καταστάσεις, τόσο μικρά που πρακτικά $G(r, hor) \neq G(r, ver)$ πάντοτε. Δικαιολογείται έτσι η ευρεία χρήση των ελικοειδών σ.σ.

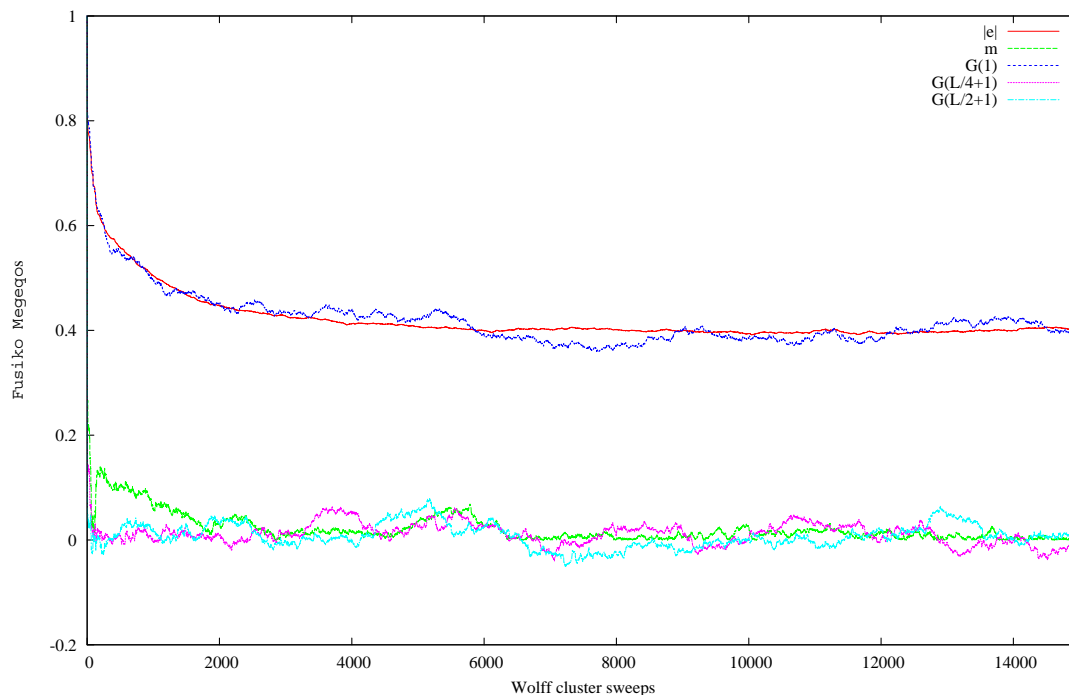
Στην εργασία μας επιλέξαμε 2D τετραγωνικό πλέγμα με τοροϊδείς σ.σ.

3. ΛΗΨΗ ΜΕΤΡΗΣΕΩΝ – ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΜΕΓΕΘΩΝ

3.1. Ισορροπία

Έχουμε αναφέρει ότι ένα σύστημα θα βρεθεί σε **ισορροπία** αφότου εξελιχθεί για μεγάλο χρονικό διάστημα ώστε οι πιθανότητες $w_\mu(t)$ να συγκλίνουν σε σταθερές τιμές p_μ , που είναι οι πιθανότητες Boltzmann. Έκτοτε, θα βρίσκεται τον περισσότερο καιρό σε ένα μικρό υποσύνολο καταστάσεων των οποίων η ενέργεια, η μαγνήτιση και η $sccf$ θα λαμβάνουν τιμές γύρω από μια σταθερή-μέση τιμή και με μικρή διασπορά. Η τελευταία πρόταση αποτελεί κριτήριο για να αποφανθούμε αν το σύστημα έχει ισορροπήσει.

Παραδείγματος χάρη, για πλέγμα γραμμικής διάστασης $L=200$ ($N=200^2$), αρχική κατάσταση “παγωμένη” (όλα τα spins ομόρροπα) και σε θερμοκρασία $\beta=0.3000$, μια δυνατή εξέλιξη των μεγεθών m , $|e|$, $G(1)$, $G(L/4+1)$, $G(L/2+1)$ είναι:



Διάγραμμα 3.1. Εξισορρόπηση συστήματος με $L=200$, $\beta=0.3000$ και “παγωμένη” αρχική κατάσταση.

Ως μονάδα χρόνου χρησιμοποιούμε μια πλήρη επανάληψη του αλγορίθμου Wolff, που συνεπάγεται τη δημιουργία ενός σμήνους (κατά Wolff) και την αναστροφή του. Παρατηρούμε ότι για $t=15000$ και άνω, όλα τα μεγέθη διακυμαίνονται γύρω από μια σταθερή τιμή. Άρα, από τη στιγμή αυτή κι έπειτα (για άπειρο χρόνο), το σύστημα βρίσκεται σε ισορροπία.

3.2. Αυτοσυσχετισμός

Έστω, θέλουμε να λάβουμε μετρήσεις ενός μεγέθους του συστήματος σε συγκεκριμένες χρονικές στιγμές. Η ποσότητα της συνολικής πληροφορίας που θα αποκομίσουμε θα εξαρτηθεί από το βαθμό ανεξαρτησίας μεταξύ των λαμβανόμενων τιμών, η οποία απορρέει από το βαθμό ανεξαρτησίας μεταξύ των αντίστοιχών τους καταστάσεων. Οι καταστάσεις τείνουν να μην συσχετίζονται όταν μεσολαβεί μεγάλος αριθμός ενδιάμεσων μεταβάσεων οπότε η τελική κατάσταση δεν θυμίζει την αρχική. Επομένως συμφέρει η λήψη κάθε μέτρησης να γίνεται ανά χρονική περίοδο αρκετή ώστε το σύστημα να προλαβαίνει να αποαυτοσυσχετίζεται. Η περίοδος αυτή προσδιορίζεται από τη *συνάρτηση αυτοσυσχετισμού* (time displaced autocorrelation function) της υπό μελέτη ποσότητας, η διακριτή μορφή της οποίας είναι:

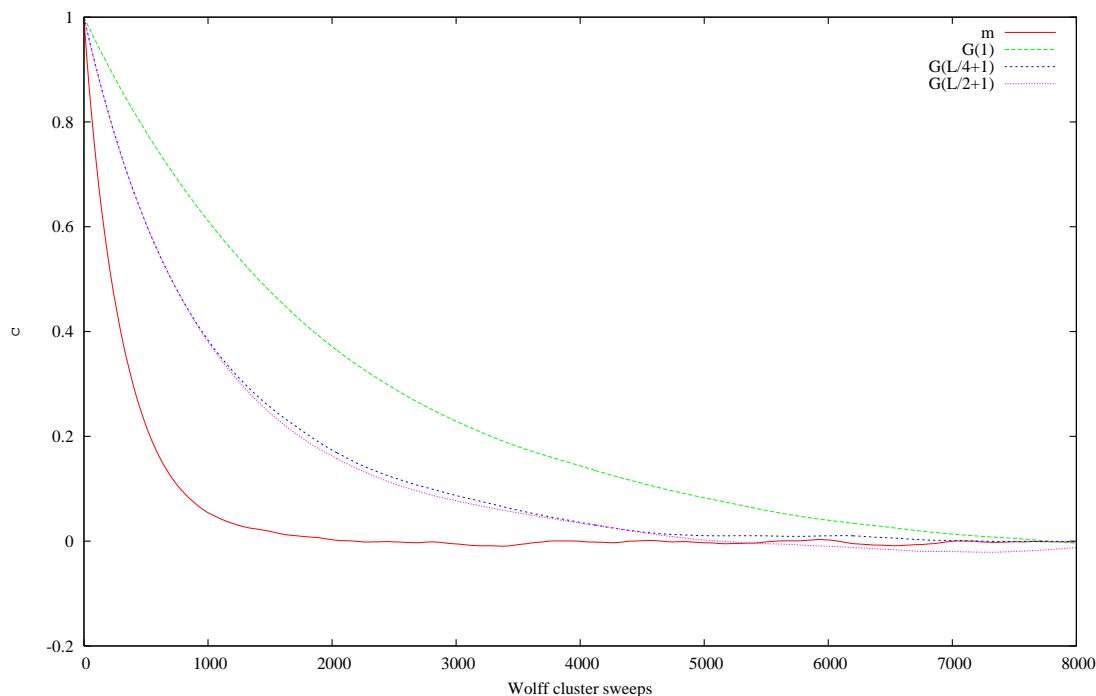
$$\chi(t) = \frac{1}{t_{\max} - t} \sum_{t'=0}^{t_{\max}-t} a(t')a(t'+t) - \frac{1}{t_{\max} - t} \sum_{t'=0}^{t_{\max}-t} a(t') \times \frac{1}{t_{\max} - t} \sum_{t'=0}^{t_{\max}-t} a(t'+t) \quad (1)$$

όπου $a(t)$ η τιμή του μεγέθους τη χρονική στιγμή t με $0 \leq t \leq t_{\max}$ και t_{\max} η τελευταία στιγμή όπου λάβαμε μέτρηση. Η εκτίμηση της $\chi(t)$ βελτιώνεται όταν $t_{\max} \rightarrow \infty$ διότι η ολοκλήρωση γίνεται σε μεγαλύτερο διάστημα. Συνήθως αποδεικνύεται ότι:

$$\chi(t) \sim e^{-t/\tau} \text{ για } t \gg 1 \quad (2)$$

όπου τ ο **χρόνος συσχετισμού**, ή μέτρο του χρονικού μήκους εντός του οποίου δύο μετρούμενες τιμές θα είναι έντονα συσχετισμένες.

Για παράδειγμα, ο αυτοσυσχετισμός των μεγεθών m , $G(1)$, $G(L/4+1)$, $G(L/2+1)$ σε σύστημα με $L = 200$ και $\beta = 0.3265$ (με χρήση αλγορίθμου Wolff) αποτυπώνεται στο διάγραμμα:



Διάγραμμα 3.2. Αυτοσυσχετισμός βασικών μεγεθών σε σύστημα με $L=200$, $\beta=0.3265$.

Παρατηρούμε ότι οι καμπύλες ξεκινούν από μέγιστη τιμή 1, βαίνουν φθίνουσες, και τείνουν ασυμπτωτικά στον οριζόντιο άξονα για μεγάλα t όπως η $e^{-t/\tau}$.

Ο χρόνος συσχετισμού χαρακτηρίζει εκτός από τη φυσική του συστήματος και τη δυναμική του συμπεριφορά. Απλός τρόπος να υπολογιστεί, είναι προσδιορίζοντας την τετμημένη του σημείου στο οποίο η καμπύλη έχει πέσει στο e^{-1} της αρχικής της τιμής. Ο συσχετισμός σβήνει για χρόνους μεγαλύτερους από 2τ , που σημαίνει ότι αν επιλεγεί ως η περίοδος λήψης των μετρήσεων, το τελικό σετ θα περιλαμβάνει ασυσχέτιστες τιμές. Όμως δεν είναι πάντοτε γνωστός ο χρόνος αυτός, επομένως καλό θα ήταν να είχαμε κάποιο τρόπο να προσδιορίσουμε την αβεβαιότητα της μέσης τιμής του δείγματός μας, η οποία θα περιείχε την επιπλέον συνιστώσα του αυτοσυσχετισμού των τιμών του. Την δουλειά αυτή μπορεί να υλοποιήσει η μέθοδος υπολογισμού σφαλμάτων *jackknife*.

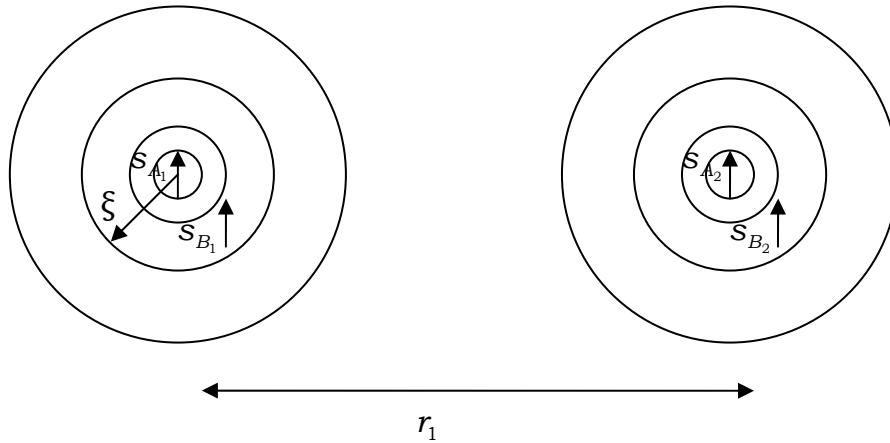
3.2.1. Μέθοδος Jackknife

Έστω $\{a_i\}$ το σύνολο n μετρήσεων που ελήφθησαν με περίοδο Δt (σε βήματα του αλγορίθμου Wolff). Υπολογίζουμε τη μέση τιμή \bar{a}_1 , του συνόλου $\{a_i\}_{i=1}$. Ακόλουθα υπολογίζουμε τη μέση τιμή \bar{a}_2 του συνόλου $\{a_i\}_{i=2}$, και συνεχίζοντας καταλήγουμε με ένα σύνολο $\{\bar{a}_i\}$ n μέσων όρων. Υπολογίζουμε και το μέσο όρο όλων των μετρήσεων \bar{a} , και το σφάλμα jackknife υπολογίζεται ως:

$$\delta a = \sqrt{\sum_{i=1}^n (\bar{a}_i - \bar{a})^2} \quad (3)$$

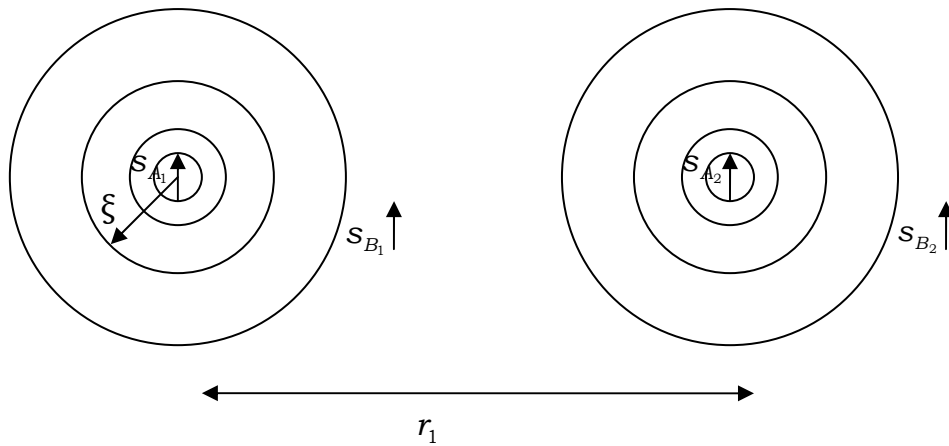
3.3. Χωρικός συσχετισμός σε 2D

Έχουμε αναφέρει ότι στο σύστημα δημιουργούνται σμήνη με τυπική ακτίνα ξ που εξαρτάται από τη θερμοκρασία. Έτσι, σε περιοχή ακτίνας ξ γύρω από κάποιο κεντρικό spin, η πιθανότητα ταύτισης της τιμής κάθε άλλου spin ανήκοντος στην περιοχή αυτή με την τιμή του κεντρικού spin είναι μεγάλη. Αυτή η τοπική ομοιογένεια στο spin οδηγεί σε ομοιογένεια κι άλλων μεγεθών παράγωγών του spin, όπως του $s_i s_j$. Ας δούμε ένα παράδειγμα. Έστω δύο spins s_{A_1}, s_{A_2} που απέχουν μεταξύ τους $r_1 > 2\xi$ όπως δείχνει το σχήμα:



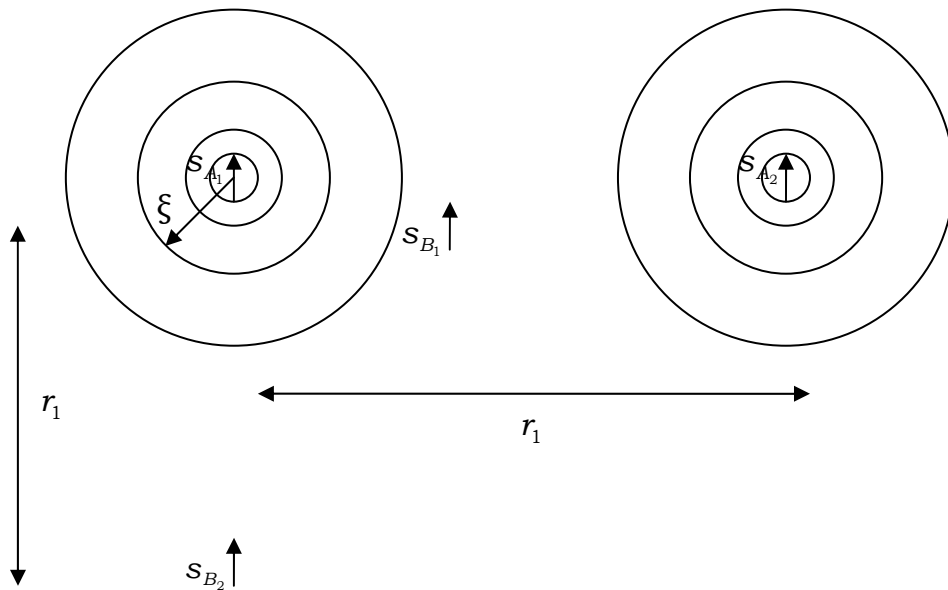
Σχήμα 3.1. Ο συσχετισμός των ζευγών s_{A_1}, s_{B_1} και s_{A_2}, s_{B_2} , οδηγεί σε συσχετισμό ανάμεσα στα γινόμενα $s_{A_1} s_{A_2}$ και $s_{B_1} s_{B_2}$.

Λαμβάνουμε την πρώτη μέτρηση $a_1 = s_{A_1} s_{A_2}$. Έστω δύο ακόμα spins s_{B_1}, s_{B_2} που απέχουν επίσης r_1 μεταξύ τους και βρίσκονται κοντά στα s_{A_1}, s_{A_2} αντίστοιχα. Η πιθανότητα να ισχύει $s_{B_1} = s_{A_1}$ είναι μεγάλη (πυκνές καμπύλες ίσης πιθανότητας στο σημείο του s_{B_1}) όπως και για το ζεύγος s_{B_2}, s_{A_2} . Επομένως η μέτρηση $a_2 = s_{B_1} s_{B_2}$ είναι πολύ πιθανό να ταυτίζεται με την a_1 , δηλαδή a_1, a_2 συσχετισμένες. Ανάλογα συμπεράσματα ισχύουν και όταν $r_1 < 2\xi$ οπότε οι καμπύλες ίσης πιθανότητας αλληλεπιδρούν. Έστω τώρα τα s_{B_1}, s_{B_2} βρίσκονται μακριά ως προς τα s_{A_1}, s_{A_2} :



Σχήμα 3.2. Ο μη-συσχετισμός των ζευγών s_{A_1}, s_{B_1} και s_{A_2}, s_{B_2} , οδηγεί σε ανεξάρτητες τιμές $s_{A_1}s_{A_2}$ και $s_{B_1}s_{B_2}$.

Ο συσχετισμός εντός των ζευγών s_{A_1}, s_{B_1} και s_{A_2}, s_{B_2} είναι μηδενικός, άρα, με βάση τα παραπάνω, οι μετρήσεις $a_1 = s_{A_1}s_{A_2}$ και $a_2 = s_{B_1}s_{B_2}$ είναι ανεξάρτητες μεταξύ τους. Τέλος, στην περίπτωση του σχήματος:



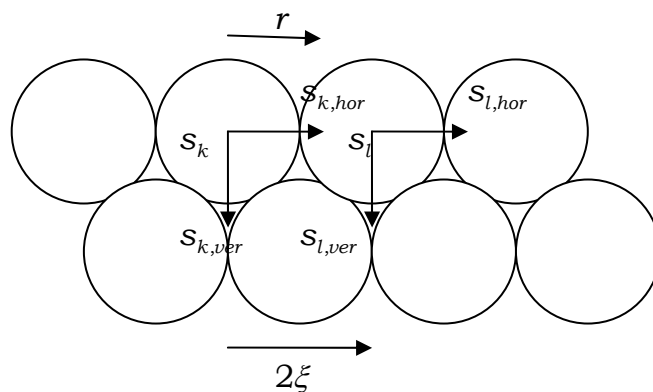
Σχήμα 3.3. Ο μη-συσχετισμός του ζεύγους s_{A_2}, s_{B_2} , οδηγεί σε ανεξάρτητες τιμές $s_{A_1}s_{A_2}$ και $s_{B_1}s_{B_2}$.

s_{B_1} συσχετισμένο με s_{A_1} , αλλά s_{B_2} μη-συσχετισμένο με s_{A_2} δηλαδή διακυμαίνεται ανεξάρτητα από το s_{A_2} (και από το s_{A_1} φυσικά). Άρα το γινόμενο $s_{B_1}s_{B_2}$ διακυμαίνεται ανεξάρτητα από το $s_{A_1}s_{A_2}$, δηλαδή a_1, a_2 ανεξάρτητες.

Επομένως για να λάβουμε όσο το δυνατό πιο ανεξάρτητες μετρήσεις $s_i s_j$, με r την μεταξύ τους απόσταση:

- Επιλέγουμε spins s_k ομοιόμορφα στην έκταση του πλέγματος με ελάχιστη απόσταση 2ξ μεταξύ τους,
- Για κάθε spin s_k μετράμε: $s_k s_{k,hor}$ με $s_{k,hor}$ να απέχει r σε οριζόντια διεύθυνση από το s_k , και $s_k s_{k,ver}$ με $s_{k,ver}$ να απέχει r σε κάθετη διεύθυνση από το s_k .
- Υπολογίζουμε το μέσο όρο και το σφάλμα με τη jackknife.

Το σχήμα απεικονίζει τα παραπάνω:



Σχήμα 3.4. Ενδεικμένος τρόπος λήψης μετρήσεων $(s_i s_j)_r$ από κατάσταση του συστήματος, με σκοπό τη μεγιστοποίηση της ανεξαρτησίας τους.

Κατά τον τρόπο αυτό υπολογίσαμε την $sscf$ υπό τη διαφορά ότι χωρίζαμε το πλέγμα σε περιοχές τυπικής διάστασης μικρότερης από 2ξ σε ορισμένες θερμοκρασίες, κρίνοντας ότι θα αποκομίσουμε περισσότερη πληροφορία με αρκετές συσχετισμένες μετρήσεις απ' ότι με λιγότερες ανεξάρτητες.

3.4. Υπολογισμός μεγεθών

Για να υπολογίσουμε μια σειρά από μεγέθη σε σύστημα 2D τετραγωνικού πλέγματος γραμμικής διάστασης L και θερμοκρασίας β :

- I. Ορίζουμε αυθαίρετα στο σύστημα μια αρχική κατάσταση και το αφήνουμε για αρκετό χρόνο να εξελιχθεί μέχρι να ισορροπήσει.
- II. Ανά τακτά χρονικά διαστήματα παίρνουμε μετρήσεις των μεγεθών που επιθυμούμε. Αναφέρουμε τα μεγέθη αυτά:

- **Ενέργεια/δεσμό:**

$$e = -\frac{1}{2N} \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j \quad (4)$$

όπου $\langle i,j \rangle$ αναφέρεται σε γειτονικά spins που θα συνεισφέρουν ένα όρο στο άθροισμα, και $N = L^2$ οι βαθμοί ελευθερίας. Συνολικά οι δεσμοί είναι $2N$, εξ' ου και ο παρανομαστής.

▪ **Μαγνήτιση/spin:**

$$m = \frac{1}{N} \sum_i s_i \quad (5)$$

▪ **Αποσυνδεδεμένη συνάρτηση συσχετισμού (dcf):**

$$s_i s_j(r) = \frac{1}{N_{of_couples}} \sum_{(k,l)_r} s_k s_l \quad (6)$$

όπου $(k,l)_r$ αναφέρεται σε πολλά διαφορετικά ζεύγη spins με μεταξύ τους απόσταση r και $N_{of_couples}$ το πλήθος τους.

III. Υπολογίζουμε τους μέσους όρους που θα αποτελέσουν και τις τελικές μας εκτιμήσεις. Ο μέσος όρος της *dcf*, είναι η ποσότητα $\langle s_i s_j \rangle$. Αφαιρώντας της $\langle m \rangle^2$ ($= \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle$), παίρνουμε τη *ssccf*.

IV. Με βάση τα παραπάνω αποτελέσματα, υπολογίζουμε τα παράγωγα μεγέθη:

▪ **Ειδική θερμότητα/spin:**

$$c = 4\beta^2 [\langle e^2 \rangle - \langle e \rangle^2] \quad (7)$$

▪ **Μαγνητική επιδεκτικότητα/spin:**

$$\chi = \beta [\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2] \quad (8)$$

▪ **Μήκος συσχετισμού:** Διαθέτουμε τρεις τρόπους υπολογισμού του, στους οποίους αφιερώνουμε την επόμενη παράγραφο.

3.4.1. Μέθοδοι υπολογισμού του μήκους συσχετισμού ξ

Το ξ εξάγεται από τη *ssccf* στην εκάστοτε θερμοκρασία. Από την ακριβή λύση του μοντέλου γνωρίζουμε ότι συνδέονται μεταξύ τους ως:

$$G(r) \sim \frac{e^{-\frac{r}{\xi}}}{r^{d-2+\eta}}, \quad |t| \ll 1, \quad r \gg 1 \quad (9)$$

κοντά στη β_C , ενώ επί της β_C :

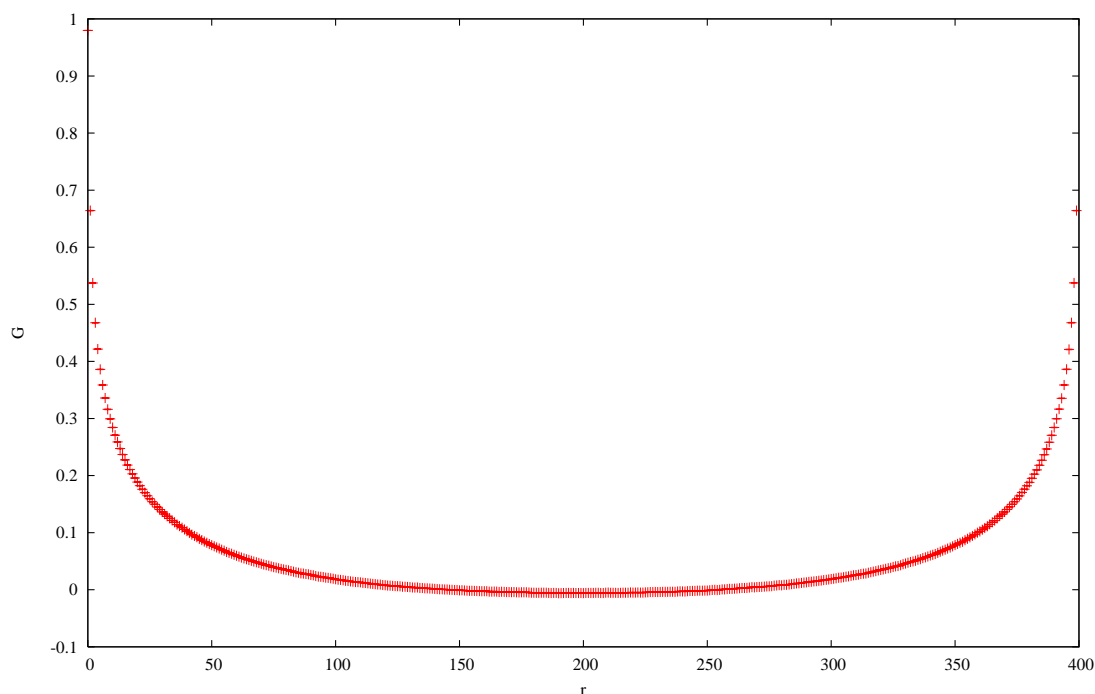
$$G(r) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}}, \quad r \gg 1 \quad (10)$$

διότι $\lim_{\beta \rightarrow \beta_C} \xi = \infty$.

Όπως φαίνεται, δεν είναι δυνατόν να έχουμε $\xi \rightarrow \infty$ σε πεπερασμένων διαστάσεων σύστημα, αλλά $\xi \leq L$. Επομένως ο τύπος (9) θα εφαρμόζεται σε όλη τη κρίσιμη περιοχή. Ο παραπάνω περιορισμός στην τιμή του ξ , είναι μια από τις πολλές συνέπειες που αντιμετωπίζουμε όταν

δουλεύουμε σε πεπερασμένα συστήματα, που τις ονομάζουμε **finite size effects (fse)**.

Η $ssccf$ όπως τη μετρήσαμε για $L = 400, \beta = 0.4373$ είναι:



Διάγραμμα 3.3. Συνάρτηση συσχέτισης συστήματος με $L=400, \beta=0.4373$ και περιοδικές συνοριακές συνθήκες.

Παρατηρούμε ότι φθίνει ασυμπτωτικά στο διάστημα $[0, \frac{L}{2}]$, αλλά μετά ανέρχεται με τροχιά κατοπτρικά συμμετρική στην προηγούμενη στο διάστημα $[\frac{L}{2}, L]$, που δεν το προβλέπει η (9). Η αιτία είναι ότι αν τοποθετήσουμε δύο σημεία του πλέγματος σε απόσταση $d > \frac{L}{2}$, λόγω τοροϊδών σ.σ. θα έχουν πλησιάσει σε απόσταση $L - d < \frac{L}{2}$. Έτσι, κάθε μέτρηση $s_i s_j(d)$ θα ταυτίζεται με τη $s_i s_j(L - d)$, που συνεπάγεται ότι $G(d) = G(L - d)^*$. Αυτή είναι μια από τις συνέπειες όταν εργαζόμαστε σε περιοδικά πλέγματα, που τις ονομάζουμε **periodic boundary effects (pbe)**. Στο εξής λέγοντας **fse**, θα συμπεριλαμβάνουμε μαζί τα **fse** και τα **pbe**. Ας υπολογίσουμε τώρα το ξ . Οι τρόποι που θα εξετάσουμε είναι τρεις:

* Η ισότητα ισχύει αν αθροίσουμε σε όλες τις καταστάσεις του συστήματος, ειδάλλως τα μέλη θα είναι περίπου ίσα.

I. *Απ' ευθείας προσαρμογή καμπύλης (direct fitting)*: Προσαρμόζουμε τη βέλτιστη καμπύλη $f(x) = c \left(\frac{e^{-r/\xi}}{r^\eta} + \frac{e^{-(L-r)/\xi}}{(L-r)^\eta} \right) + correction$ τριών παραμέτρων ξ, η, c και μιας παραμέτρου-διόρθωσης *correction*, σε όλα τα σημεία της *ssccf* πλην του πρώτου ($r = 0, G(0) = 1 \pm 0$) (σταθερό σε όλες τις θερμοκρασίες), διότι δεν ανταποκρίνεται στην οριακή σχέση (9) $\Rightarrow \lim_{r \rightarrow 0^+} G(r) = \infty$. Η προσθήκη της *correction* παραβαίνει τον θεωρητικό φορμαλισμό αλλά βελτιώνει την προσαρμογή εξαλείφοντας ορισμένες συστηματικές επιδράσεις (που δεν λαμβάνει υπ' όψη η (9)). Π.χ. για τα σημεία μας υπολογίζουμε $\xi_{fit} = 57.31 \pm 1.23$. Το σφάλμα προέκυψε από τη μεταβολή της ξ_{fit} για μικρές παραλλαγές του διαστήματος προσαρμογής.

$$\text{II. } \xi_2 = \frac{L}{2\pi} \sqrt{\frac{\tilde{G}(0)}{\tilde{G}(1)} - 1} \quad (\text{πηγή [4]}): \quad (11)$$

όπου $\tilde{G}(k)$, $k = 0, \dots, L-1$ ο μετασχηματισμός Fourier της $G(r)$.

$$\text{Στηρίζεται στην υπόθεση } G(r) \sim e^{-\frac{r}{\xi}}, \quad |t| \ll 1, \quad r \gg 1 \quad (12)$$

για το άπειρο σύστημα, οπότε στο πεπερασμένο με περιοδικές σ.σ. προστίθεται ακόμα ένας όρος που εκφράζει την αλληλεπίδραση των spins από απόσταση $L-r$:

$$G(r) \sim e^{-\frac{r}{\xi}} + e^{-\frac{L-r}{\xi}} = e^{-\frac{r}{\xi}} + \frac{e^{-\frac{L/2}{\xi}} e^{-\frac{r}{\xi}}}{e^{-\frac{L/2}{\xi}}} = \frac{e^{-\frac{r-L/2}{\xi}} + e^{-\frac{r-L/2}{\xi}}}{e^{-\frac{L/2}{\xi}}} \Rightarrow$$

$$G(r) \sim \cosh\left(\frac{r-L/2}{\xi}\right) \quad (13)$$

Το σφάλμα υπολογίζεται:

$$\delta\xi_2 = \frac{L^2}{8\pi^2} \frac{1}{\xi_2 \cdot \tilde{G}(1)} \sum_0^{L-1} \delta G_i \left[1 - \frac{\tilde{G}(0)}{\tilde{G}(1)} \cos\left(\frac{2\pi r_i}{L}\right) \right] \quad (14)$$

Για το παράδειγμά μας $\xi_2 = 25.73 \pm 0.49$

$$\text{III. } \xi_3 = \left[\frac{\sum_1^{L/2-1} r_i^2 G_i}{\sum_1^{L/2-1} G_i} \right]^{1/2} \quad (\text{πηγή [5]}): \quad (15)$$

Επίσης στηρίζεται στην υπόθεση $G(r) \sim e^{-r/\xi}$, $|t| \ll 1$, $r \gg 1$. Το σφάλμα δίνεται:

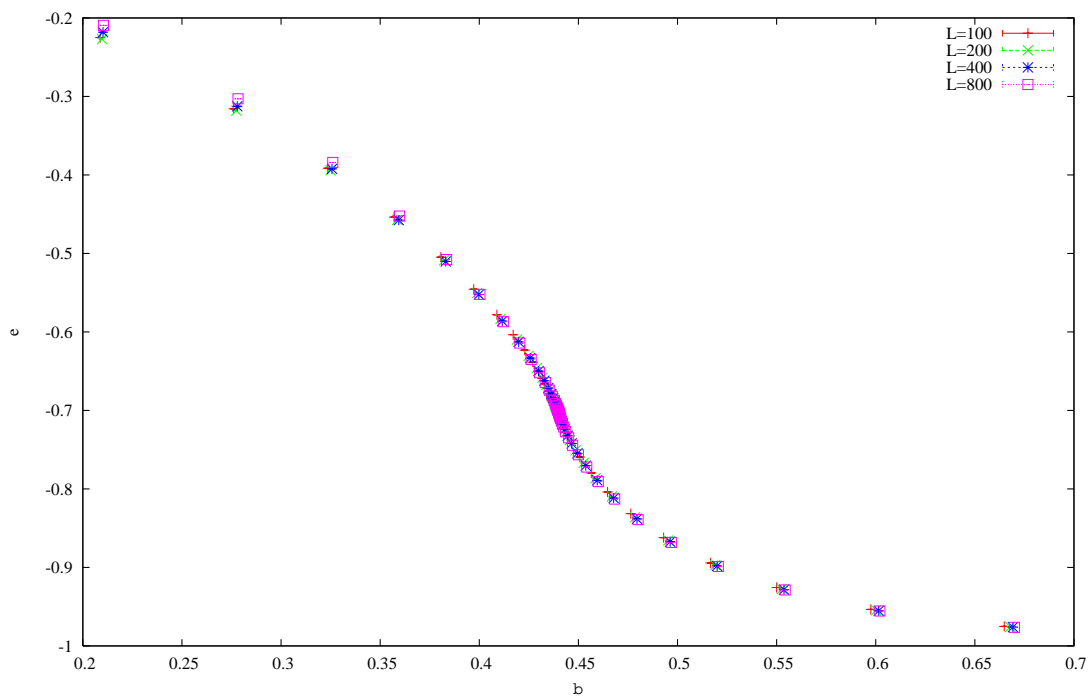
$$\delta\xi_3 = \frac{1}{2\xi_3 \cdot \sum_1^{L/2-1} G_i} \sum_1^{L/2-1} \delta G_i [r_i^2 - \xi_3^2] \quad (16)$$

Στο παράδειγμά μας $\xi_3 = 33.34 \pm 0.99$

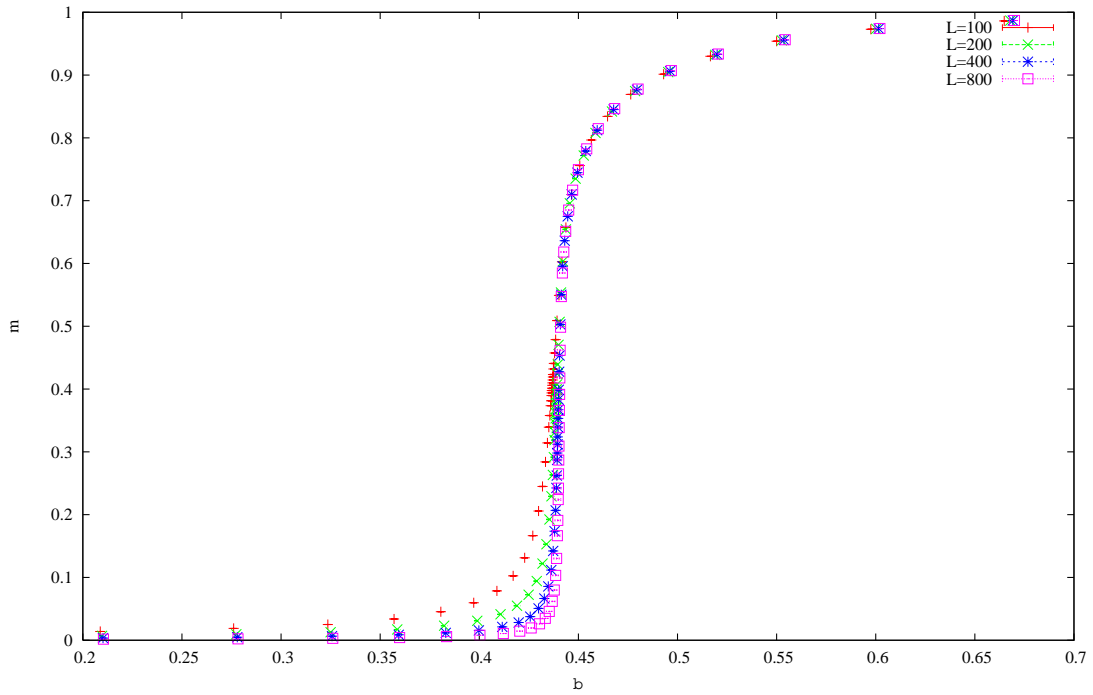
4. ΔΙΕΝΕΡΓΕΙΑ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΩΝ- ΕΠΕΞΕΡΓΑΣΙΑ ΔΕΔΟΜΕΝΩΝ

4.1. Γενική διερεύνηση

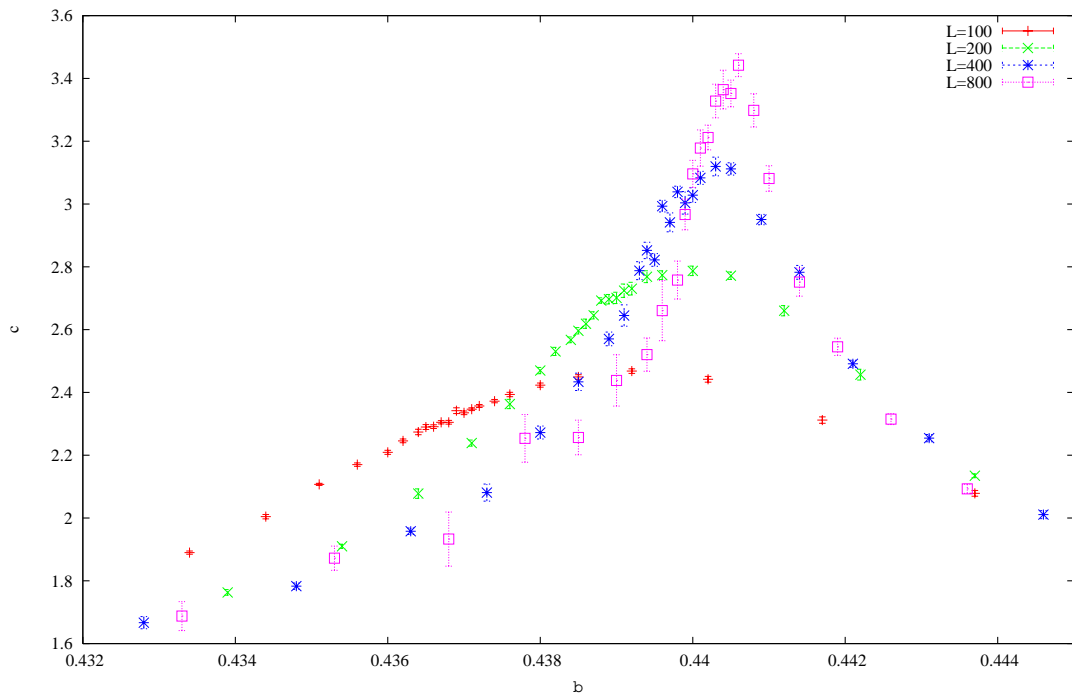
Σε πλέγματα διαφόρων μεγεθών, για διάφορες θερμοκρασίες υπολογίσαμε τα μεγέθη e, m, c, χ (από 10^5 μη-ανεξάρτητες μετρήσεις των απαιτούμενων μεγεθών). Τα αποτελέσματα παριστάνονται στα αντίστοιχα διαγράμματα:



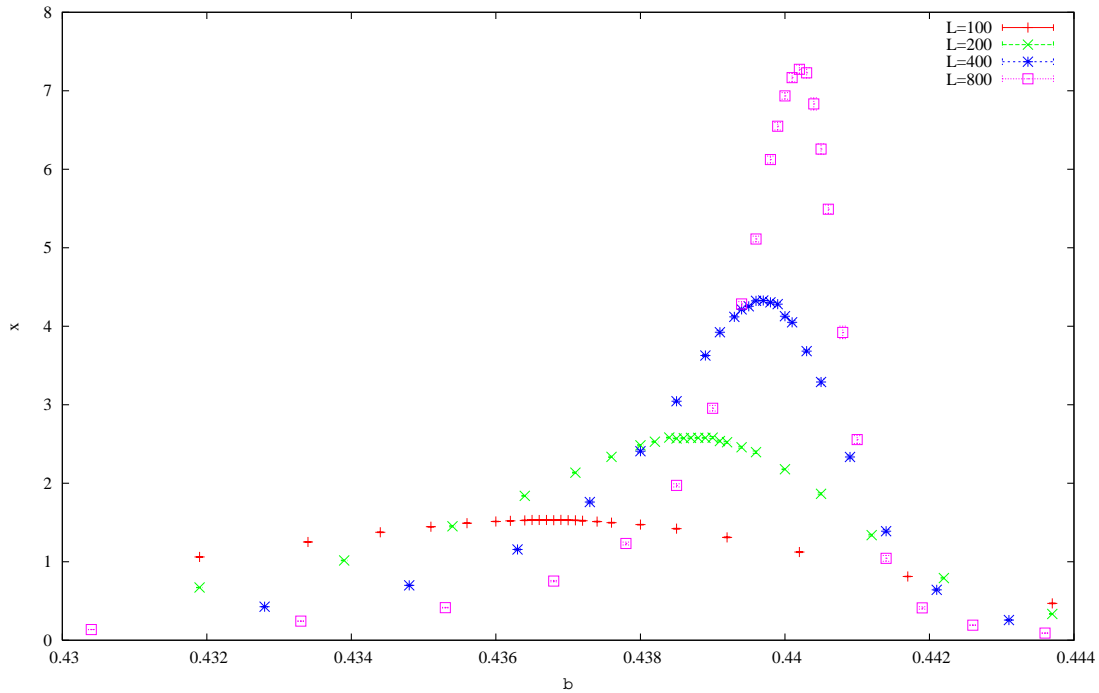
Διάγραμμα 4.1. Ενέργεια/δεσμό συναρτήσει της θερμοκρασίας, για διάφορα μεγέθη συστήματος.



Διάγραμμα 4.2. Μαγνήτιση/spin συναρτήσει της θερμοκρασίας, για διάφορα μεγέθη συστήματος.



Διάγραμμα 4.3. Ειδική θερμότητα/spin συναρτήσει της θερμοκρασίας, για διάφορα μεγέθη συστήματος.



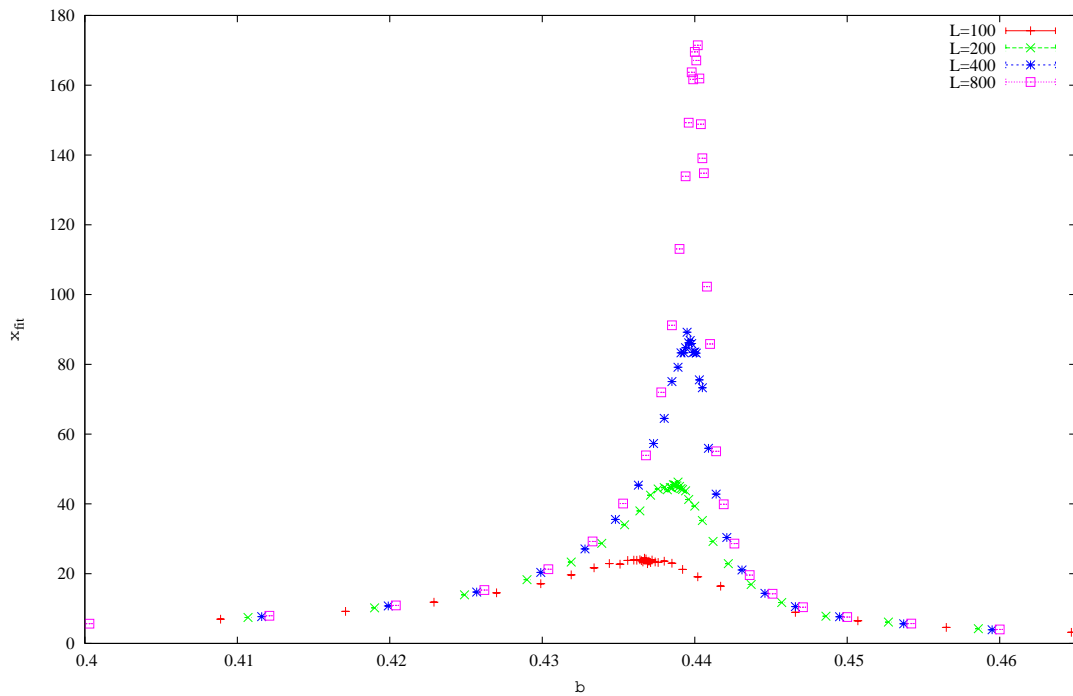
Διάγραμμα 4.4. Μαγνητική Επιδεκτικότητα/spin συναρτήσει της θερμοκρασίας, για διάφορα μεγέθη συστήματος.

Τα συναγόμενα συμπεράσματα είναι πολλά:

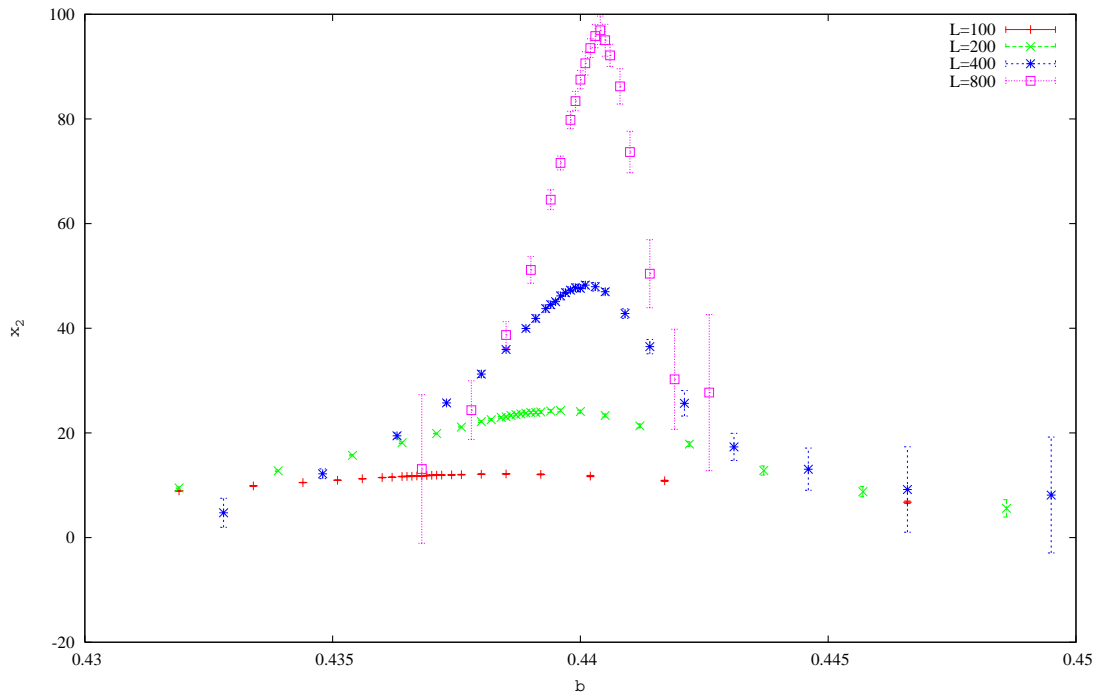
- Οι καμπύλες όλων των διαγραμμάτων τείνουν να αποκτήσουν τη μορφή της αντίστοιχης γι' αυτές ιδανικής καμπύλης του απείρου συστήματος, καθώς αυξάνουμε το μέγεθος του (Σχήμα 1.1-Σχήμα 1.4). Στην περιοχική θερμοκρασιών (0.42,0.47), η e και η παράμετρος τάξης m , κλίνουν όλο και πιο πολύ προσεγγίζοντας την άπειρη κλίση της αντίστοιχης τους ιδανικής καμπύλης. Οι χ, c στενεύουν σχηματίζοντας περισσότερο οξείες κορυφές που τείνουν να αποκλίνουν στο άπειρο.
- Οι θέσεις των κορυφών των χ, c εξαρτώνται από το μέγεθος του συστήματος, μετατοπιζόμενες προς τα δεξιά για ολοένα μεγαλύτερο μέγεθος, τείνοντας να σταθεροποιηθούν σε μια συγκεκριμένη θερμοκρασία στην περιοχική (0.440, 0.441).
- Οι θέσεις των κορυφών των χ, c τείνουν να συμπέσουν για ολοένα μεγαλύτερο μέγεθος του συστήματος, κάτι που συμβαίνει στο άπειρο σύστημα όπου οι αντίστοιχες καμπύλες αποκλίνουν στην ίδια θερμοκρασία.
- Για κάθε διάγραμμα, μακριά από την περιοχική θερμοκρασιών (0.3, 0.5), οι καμπύλες για όλα τα μεγέθη συστήματος συμπίπτουν. Συμβαίνει διότι τότε η εμβέλεια των συσχετισμών είναι πολύ μικρότερη από τη διάσταση του πλέγματος ώστε να εξαλείφεται η συστημιακή επίδραση από το πεπερασμένο του μεγέθους του. Επομένως κάθε spin θα λαμβάνει τιμές απείρου συστήματος όπως και οι τιμές των μετρούμενων μεγεθών.

- Η αβεβαιότητα στην υπολογισθείσα τιμή κάθε μεγέθους σε δεδομένη θερμοκρασία, φθίνει για αυξανόμενο μέγεθος συστήματος όπως περιμέναμε από τη θερμοδυναμική ανάλυση (κεφ. 1.1 τύπος (8)).

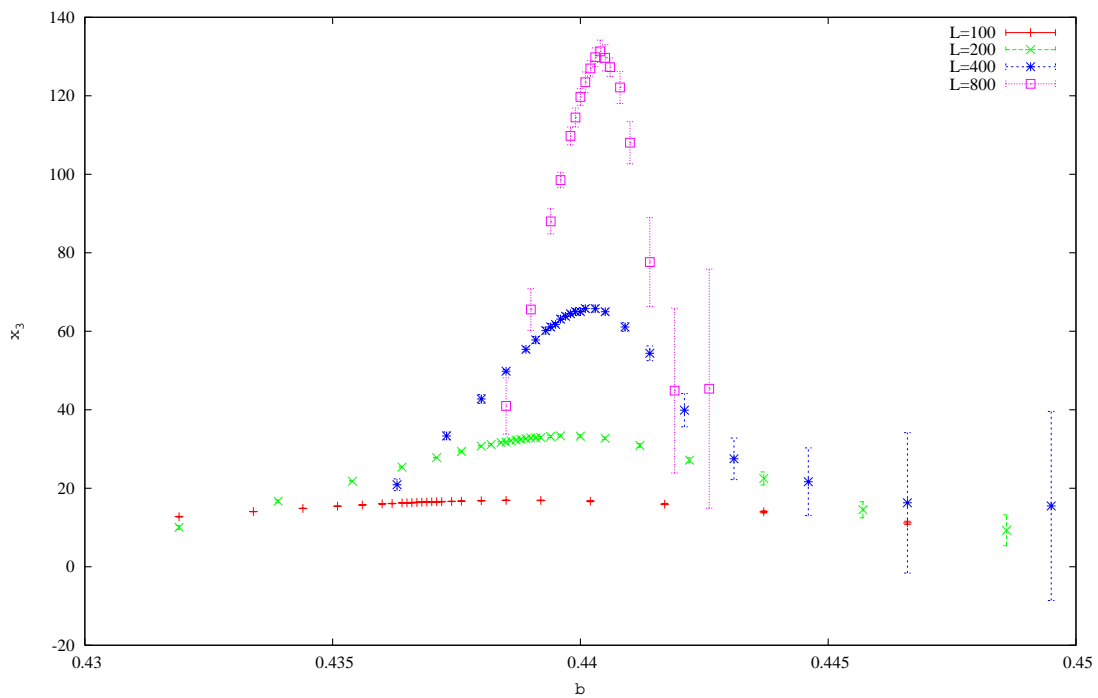
Σε πλέγματα διαφόρων μεγεθών, σε διάφορες θερμοκρασίες μετρήσαμε το μήκος συσχετισμού με τους διαφορετικούς τρόπους ξ_{fit}, ξ_2, ξ_3 (από 10^5 μη-ανεξάρτητες μετρήσεις).. Τα αποτελέσματα παριστάνονται στα αντίστοιχα διαγράμματα:



Διάγραμμα 4.5. Μήκος Συσχετισμού ξ_{fit} συναρτήσει της θερμοκρασίας, για διάφορα μεγέθη συστήματος.



Διάγραμμα 4.6. Μήκος Συσχετισμού ξ_2 συναρτήσει της θερμοκρασίας, για διάφορα μεγέθη συστήματος.



Διάγραμμα 4.7. Μήκος Συσχετισμού ξ_3 συναρτήσει της θερμοκρασίας, για διάφορα μεγέθη συστήματος.

Μπορούμε να συνάγουμε συμπεράσματα τόσο για τη συμπεριφορά του συστήματός όσο και για τη λειτουργικότητα των ορισμών του ξ :

- Για κάθε διάγραμμα, αυξανόμενου του μεγέθους συστήματος, οι καμπύλες τείνουν να στενεύουν σχηματίζοντας περισσότερο οξείες

κορυφές που τείνουν να αποκλίνουν. Οι θέσεις των κορυφών εξαρτώνται από το μέγεθος του συστήματος, μετατοπιζόμενες προς τα δεξιά για ολοένα μεγαλύτερο μέγεθος, τείνοντας να σταθεροποιηθούν σε μια συγκεκριμένη θερμοκρασία στην περιοχή (0.438, 0.442).

- Μακριά από την περιοχή (0.438, 0.442), οι καμπύλες για όλα τα μεγέθη συστήματος ταυτίζονται στο διάγραμμα (ξ_{fit} vs β). Το αναμέναμε διότι όπως περιγράψαμε πιο πάνω, στις περιοχές μακριά από την κεντρική τα fse σβήνουν και τα spins συμπεριφέρονται σα να βρίσκονταν σε άπειρο σύστημα. Κατ' επέκταση τα σχηματιζόμενα σμήνη θα διαμορφώνονται όπως στο άπειρο σύστημα, ομοίως και η (μικρή) τιμή της τυπικής τους ακτίνας ξ . Όμως στα (ξ_2 vs β) και (ξ_3 vs β), ταύτιση έχουμε μόνο στην άνω της (0.438, 0.442) περιοχή. Στην περιοχή κάτω από την (0.438, 0.442) το ξ φθίνει με διαφορετική τροχιά για κάθε μέγεθος συστήματος.
- Οι θέσεις των κορυφών στα διαγράμματα (ξ_{fit} vs β) και (χ vs β) για δεδομένο L , σχεδόν ταυτίζονται. Αυτό αναμέναμε, διότι η μαγνητική επιδεκτικότητα είναι ανάλογη των διακυμάνσεων στη μαγνήτιση, οι οποίες συναρτώνται θετικά με το μέγεθος των σμηνών. Δεν συμβαίνει το ίδιο και για τα μήκη ξ_2, ξ_3 , που παρά ταύτα έχουν μεταξύ τους κοινές θέσεις μεγίστων (πίνακας I).

L	$\beta_0(\xi_{fit})$	$\beta_0(\xi_2)$	$\beta_0(\xi_3)$	$\beta_0(\chi)$
100	0.4369 ± 0.0005	0.4385 ± 0.0007	0.4385 ± 0.0007	0.4368 ± 0.0004
200	0.4386 ± 0.0004	0.4396 ± 0.0004	0.4396 ± 0.0004	0.4388 ± 0.0003
400	0.4397 ± 0.0003	0.4401 ± 0.0002	0.4403 ± 0.0003	0.4397 ± 0.0001
800	0.4401 ± 0.0001	0.4404 ± 0.0001	0.4404 ± 0.0001	0.4402 ± 0.0001
1600	0.4404 ± 0.0001	0.4406 ± 0.0001	0.4406 ± 0.0001	0.4404 ± 0.0001

Πίνακας 4.1: Θερμοκρασίες μεγιστοποίησης των $\xi_{fit}, \xi_2, \xi_3, \chi$ για διαφορετικά μεγέθη συστήματος.

Βλέπουμε ότι ο ορισμός $\xi = \xi_{fit}$ του μήκους συσχετισμού, είναι συνεπής με τη γενική θεωρητική του εικόνα σε όλο το εύρος θερμοκρασιών. Οι ορισμοί ξ_2, ξ_3 παρουσιάζουν παρόμοια συμπεριφορά που είναι συνεπής για θερμοκρασίες μακριά-πάνω από την κεντρική περιοχή, μακριά-κάτω είναι μη αποδεκτή, ενώ στην κεντρική περιοχή δείχνει να βελτιώνεται για αυξανόμενο μέγεθος συστήματος L .

4.1.1. Προσδιορισμός Κρίσιμης Θερμοκρασίας

Αναφέραμε ότι η κορυφή της χ μετατοπίζεται δεξιά αυξανόμενου μεγέθους συστήματος, και σταθεροποιείται σε συγκεκριμένη θέση που την αναγνωρίζουμε ως την **κρίσιμη θερμοκρασία** β_C . Με βάση τη συμπεριφορά αυτή μπορούμε να εκτιμήσουμε τη β_C .

Δεδομένου ότι στην κρίσιμη περιοχή ισχύει:

$$\xi \sim \left| \frac{\beta_C - \beta}{\beta_C} \right|^{-\nu} \quad (1)$$

και κάνοντας την εύλογη υπόθεση:

$$\xi \sim L \text{ για } \beta = \beta_0 \quad (2)$$

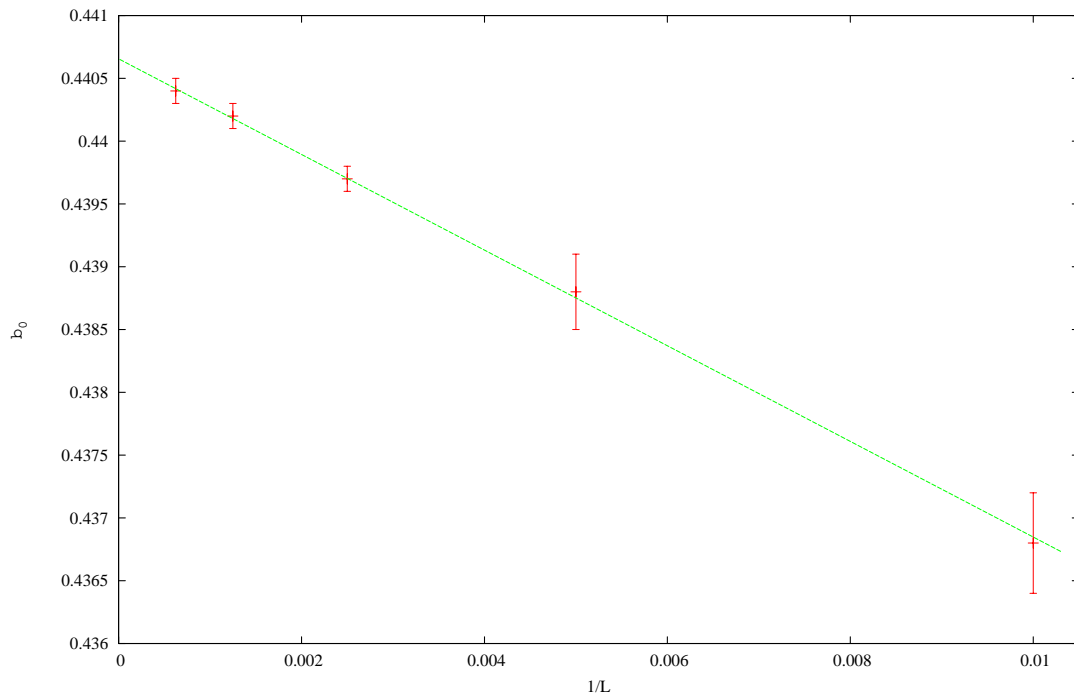
όπου $\beta_0(L)$ η θερμοκρασία για την οποία $\chi_{\max}(L) = \chi(L, \beta = \beta_0)$, καταλήγουμε στην εξής σχέση:

$$\beta_0 = \alpha L^{-\frac{1}{\nu}} + \beta_C \quad (3)$$

Δανειζόμενοι την τιμή $\nu = 1$ από την ακριβή λύση του μοντέλου η προηγούμενη γίνεται:

$$\beta_0 = \alpha L^{-1} + \beta_C \quad (4)$$

Από το Διάγραμμα 4.4, εντοπίζουμε τις θερμοκρασίες $\beta_0(L)$ και παριστάνουμε τα αποτελέσματα σε διάγραμμα β_0 vs L^{-1} :



Διάγραμμα 4.8. Θερμοκρασίες μεγίστων Μαγνητικής Επιδεκτικότητας συναρτήσει αντιστρόφου Μεγέθους Συστήματος.

Εφαρμόζουμε γραμμική προσαρμογή που μας δίνει: $\lim_{L \rightarrow \infty} \beta_0 = \beta_C = 0.4407 \pm 0.0001$. Η τιμή αυτή ταυτίζεται με την προβλεπόμενη από την αναλυτική λύση του μοντέλου (2D-Ising τετραγωνικής συμμετρίας):

$$\beta_c = \frac{\ln(1 + \sqrt{2})}{2J} = 0.440686793 \cdot J^{-1} \quad (5)$$

Αναλόγως θα μπορούσαμε να εργαστούμε και με την ειδική θερμότητα c ή το μήκος συσχετισμού ξ . Οι προσεγγιστικές μέθοδοι υπολογισμού της β_c ποικίλουν, με δημοφιλέστερη εκείνη που χρησιμοποιεί τον όρο *Binder* (Binder Cumulant) (πηγή [5]).

4.2. Υπολογισμός Κρίσιμων Εκθετών στο πρότυπο 2D-Ising

Έχουμε αναφέρει ότι στην κρίσιμη περιοχή τα διάφορα μεγέθη συμπεριφέρονται ως:

$$m \sim t^\beta, \beta > \beta_C \quad (6)$$

$$\chi \sim |t|^{-\gamma} \quad (7)$$

$$c \sim \ln|t| \quad (8)$$

$$\xi \sim |t|^{-\nu} \quad (9)$$

$$G(r) \sim \frac{e^{-\frac{r}{\xi}}}{r^{d-2+\eta}}, |t| \ll 1, r \gg 1 \quad (10)$$

όπου $t = \frac{\beta_C - \beta}{\beta_C}$ η *ανηγμένη θερμοκρασία* (reduced temperature) και β, γ, ν, η οι *κρίσιμοι εκθέτες*, που έχουν τιμές για το 2D-Ising:

Φυσική Ποσότητα	Κρίσιμος Εκθέτης	Τιμή εκθέτη	
		d=2 (αναλυτικά)	d=3 (προσεγγιστικά)
Ειδική Θερμότητα	α	-	0.104 ± 0.003
Μαγνητική Επιδεκτικότητα	γ	$7/4$	1.2385 ± 0.0015
Μαγνήτιση	β	$1/8$	0.325
Μήκος συσχετισμού	ν	1	$0.632 \pm 0.001 \pm 0.025$
Συνάρτηση Συσχετισμού	η	$1/4$	0.039 ± 0.004

Πίνακας 4.2. Κρίσιμοι εκθέτες σε συστήματα 2D και 3D Ising (πηγή [6]).

Για να αναπαράγει κανείς τα αποτελέσματα αυτά, η να εξάγει αντίστοιχα σε κάποιο άγνωστο μοντέλο, οι βασικές υποψήφιοι υπολογιστικές μέθοδοι που θα χρησιμοποιήσει είναι τρεις: *απ' ευθείας προσαρμογή καμπύλης*, *κλιμάκωση του μεγέθους συστήματος* (finite size scaling ή **FSE**) και *επανακανονικοποίηση ομάδας* (renormalization group). Η σειρά που αναφέρθηκαν είναι κατ' αύξουσα αποτελεσματικότητα σε υλοποίηση, και πολυπλοκότητα σε συλλογιστική βάση.

Εμείς χρησιμοποιούμε τις πρώτες δύο μεθόδους.

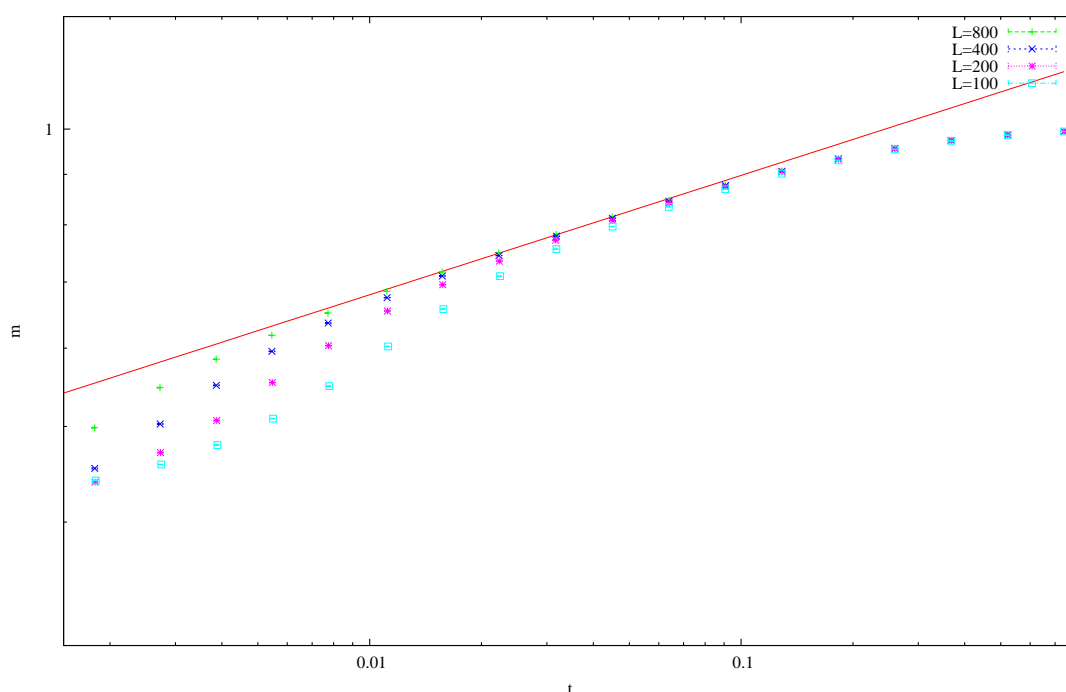
4.2.1. Μέθοδος Απ' ευθείας Προσαρμογής Καμπύλης

Είναι η πιο αυτονόητη: μετρούμε τα μεγέθη σε διάφορες θερμοκρασίες, συγκεντρώνουμε τα αποτελέσματα για κάθε μέγεθος σε διάγραμμα και πραγματοποιούμε προσαρμογή καμπύλης εκεί που διακρίνουμε εκθετική συμπεριφορά, η καλύτερα, μετατρέπουμε σε

λογαριθμικούς τους άξονες και κάνουμε γραμμική προσαρμογή όπου παρατηρούμε γραμμική συμπεριφορά.

a. Εκθέτης Μαγνήτισης β :

Ορίζεται για $\beta > \beta_c$ όπου το σύστημα φέρει μη-μηδενική μαγνήτιση. Στο πεπερασμένο σύστημα η β_c υποκαθίσταται από τη $\beta_0(L)$ (τη θερμοκρασία μεγιστοποίησης του χ (ή ξ)), διότι σε αυτήν μιμείται πιστότερα τη συμπεριφορά του απείρου συστήματος επί τη κρίσιμη θερμοκρασία. Παράγουμε το διάγραμμα:



Διάγραμμα 4.9. Γραμμική προσαρμογή για τον προσδιορισμό του εκθέτη β της Μαγνήτισης.

Παρατηρούμε πως για αυξανόμενο L , στην περιοχή $\ln t < 0.1$ οι καμπύλες μειώνουν την κυρτότητά τους τείνοντας να διατάξουν τα σημεία τους σε μια ευθεία. Η ευθεία αυτή αναδύεται ανάμεσα στην περιοχή όπου τα fse σταδιακά εξαλείφονται (αριστερά), και τη μη-γραμμική περιοχή (δεξιά) όπου το άπειρο σύστημα απλώς δεν έχει εκθετική συμπεριφορά, και επεκτείνεται εις βάρος της πρώτης. Για να την οριοθετήσουμε:

- ο παίρνουμε την περιοχή σύμπτωσης τουλάχιστο δύο καμπυλών,
- ο προσδιορίζουμε τη γραμμική της υποπεριοχή με το μάτι, είτε με διαδοχικές προσαρμογές έως ότου εντοπίσουμε περιοχή σταθερής κλίσης,
- ο μετρούμε την κλίση της γραμμικής (υπό)περιοχής με προσαρμογή,
- ο από την καμπύλη με το μεγαλύτερο L , λαμβάνουμε το επόμενο σημείο μόλις έξω από τη γραμμική περιοχή και μετρούμε πάλι την κλίση με προσαρμογή

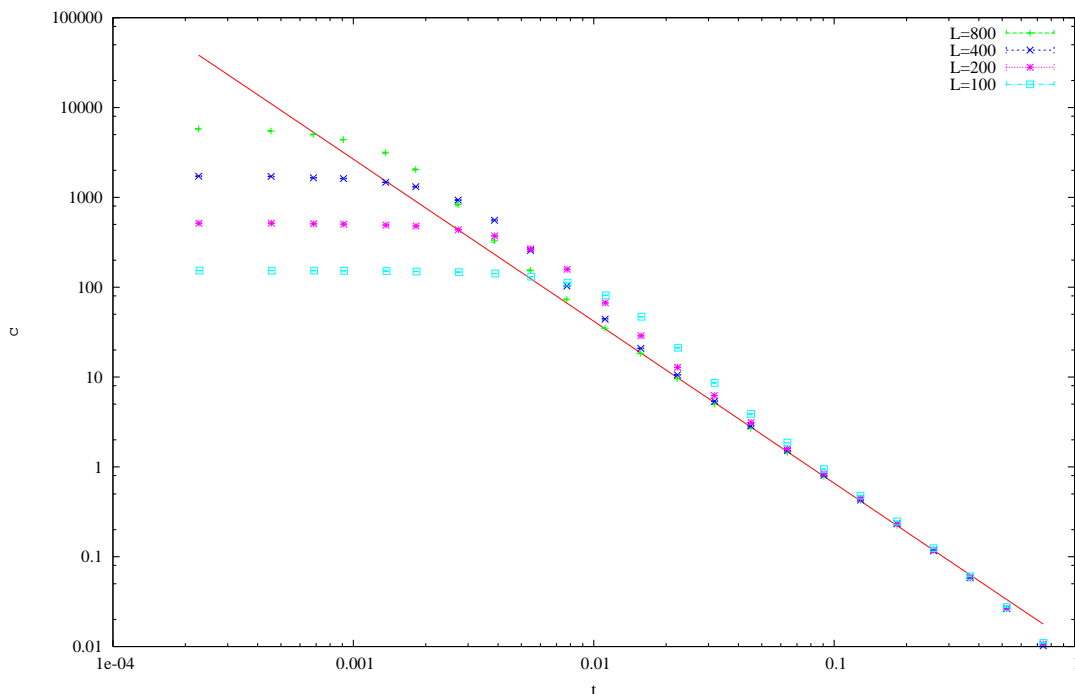
- ο αν οι δύο κλίσεις έχουν μικρή διαφορά εξετάζουμε το επόμενο σημείο για συμπερίληψη ειδάλλως σταματάμε και κατοχυρώνουμε την προτελευταία κλίση.
- ο Προσδιορίζουμε το σφάλμα εξετάζοντας τη μεταβολή την κλίσης μας για μικρές παραλλαγές στο διάστημα προσαρμογής.

Υπολογίσαμε $\beta_{dir_fit} = 0.1208 \pm 0.0045$ που απέχει 3.4% από τη θεωρητική τιμή $\beta = 0.125$.

b. Εκθέτης Μαγνητικής επιδεκτικότητας γ :

Θα υπολογιστεί δύο φορές, για τις περιοχές άνω και κάτω από τη $\beta_0(L)$.

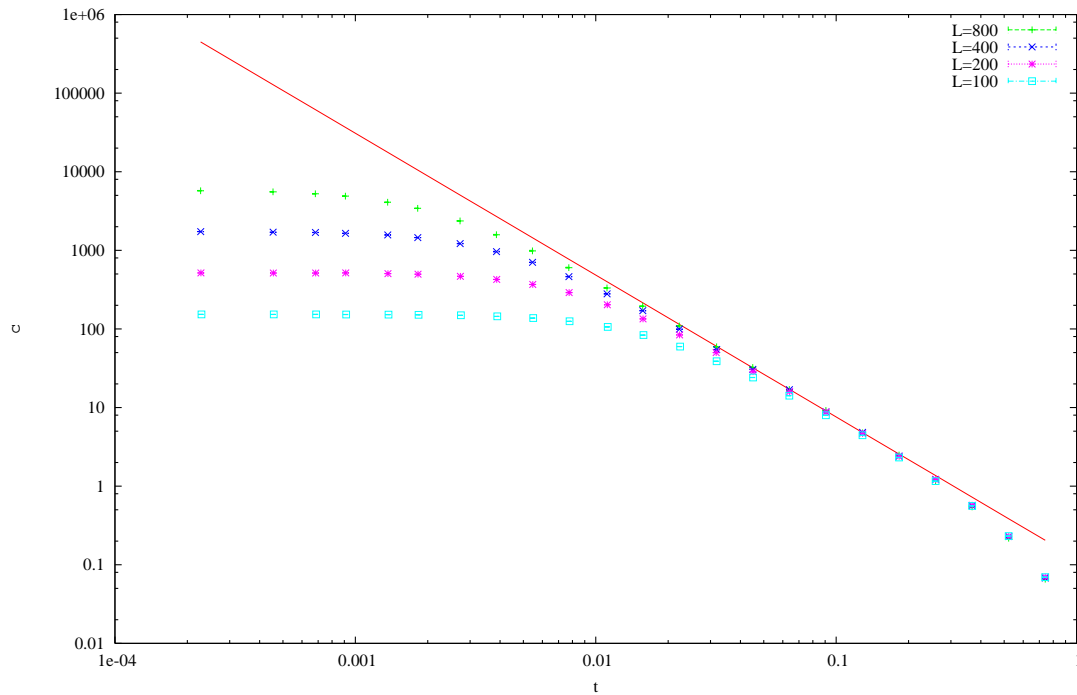
Για $\beta > \beta_0(L)$:



Διάγραμμα 4.10. Γραμμική προσαρμογή για τον προσδιορισμό του εκθέτη γ της Μαγνητικής Επιδεκτικότητας, στην περιοχή $\beta > \beta_0(L)$.

Υπολογίσαμε $\gamma_{dir_fit} = 1.803 \pm 0.034$ που απέχει 3.0% από τη θεωρητική τιμή $\gamma = 1.75$.

Για $\beta < \beta_0(L)$:



Διάγραμμα 4.11. Γραμμική προσαρμογή για τον προσδιορισμό του εκθέτη γ της Μαγνητικής Επιδεκτικότητας, στην περιοχή $\beta < \beta_0(L)$.

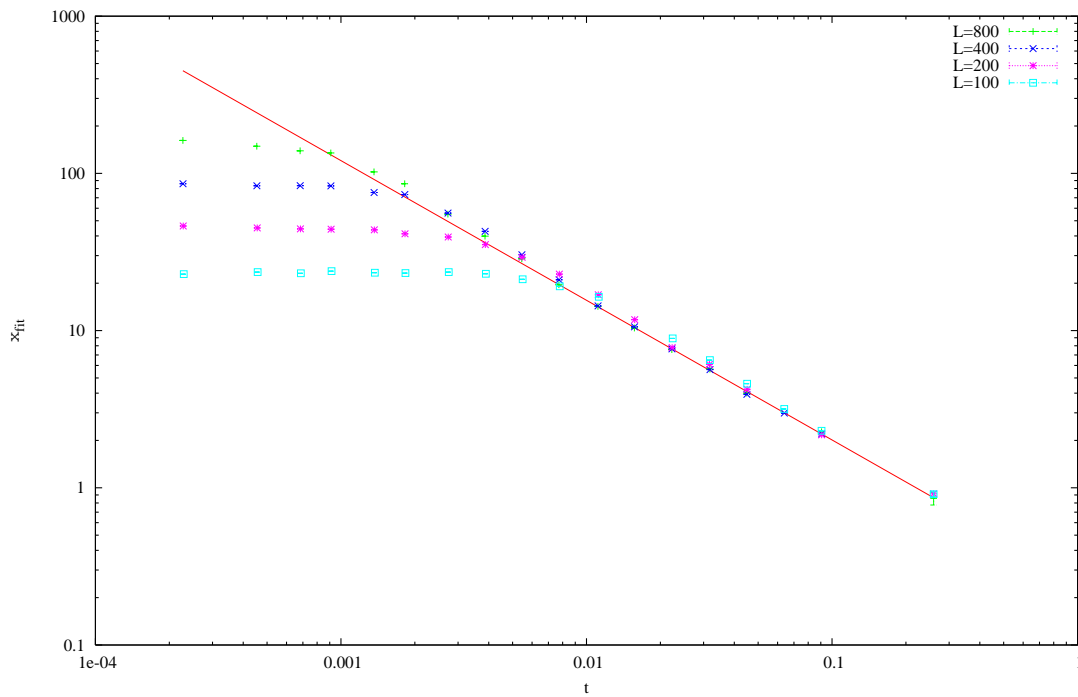
Υπολογίσαμε $\gamma_{dir_fit} = 1.805 \pm 0.049$ που απέχει 3.1% από τη θεωρητική τιμή.

c. Εκθέτης Μήκους Συσχετισμού ν :

Θα υπολογιστεί με βάση τους τρεις τρόπους:

ο $\xi = \xi_{fit}$:

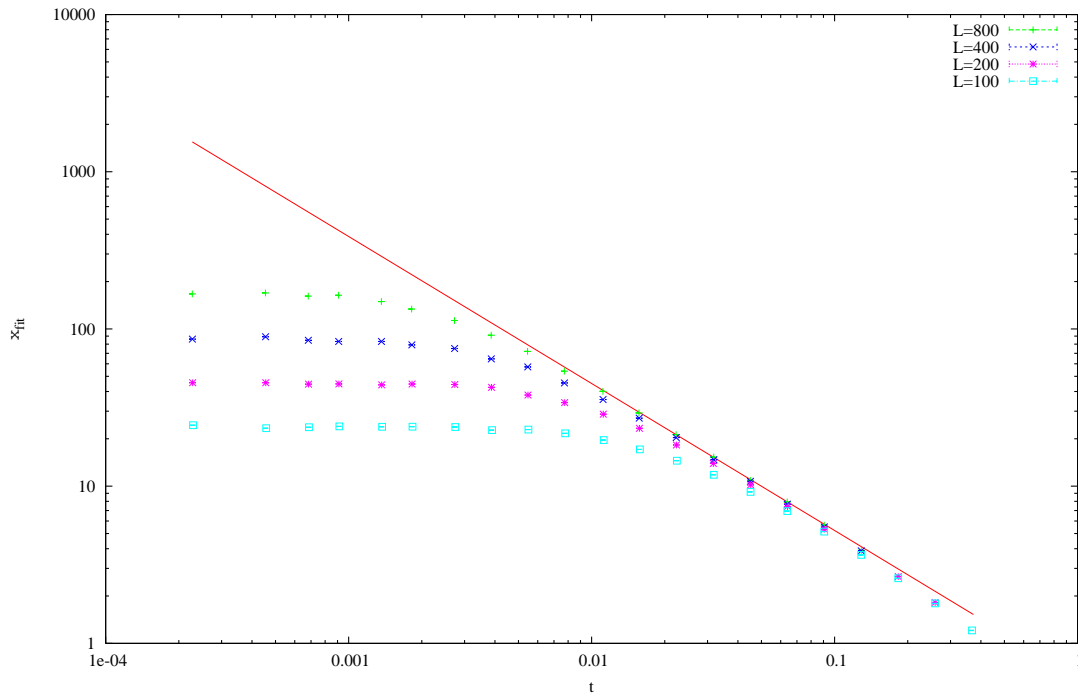
Για $\beta > \beta_0(L)$:



Διάγραμμα 4.12. Γραμμική προσαρμογή για τον προσδιορισμό του εκθέτη ν του Μήκους Συσχετισμού ξ_{fit} , στην περιοχή $\beta > \beta_0(L)$.

Υπολογίσαμε $\nu_{fit} = 0.89 \pm 0.10$ που αποκλίνει 11.2% της θεωρητικής τιμής $\nu = 1$.

Για $\beta < \beta_0(L)$:

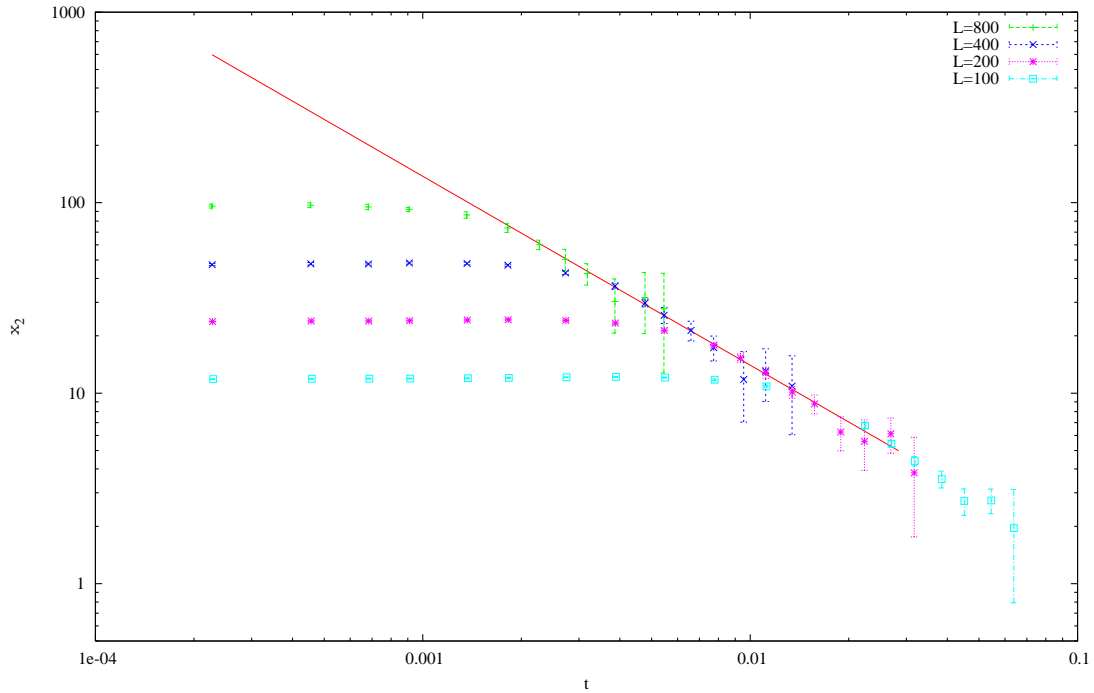


Διάγραμμα 4.13. Γραμμική προσαρμογή για τον προσδιορισμό του εκθέτη ν του Μήκους Συσχετισμού ξ_{fit} , στην περιοχή $\beta < \beta_0(L)$.

Υπολογίσαμε $\nu_{fit} = 0.935 \pm 0.017$ που αποκλίνει 6.5% της θεωρητικής τιμής.

- ο $\xi = \xi_2$:

Για $\beta > \beta_0(L)$:



Διάγραμμα 4.14. Γραμμική προσαρμογή για τον προσδιορισμό του εκθέτη ν του Μήκους Συσχετισμού ξ_2 , στην περιοχή $\beta > \beta_0(L)$.

Παρατηρούμε ότι για κάθε καμπύλη, κατευθυνόμενοι επί της γραμμικής περιοχής προς μεγαλύτερο t (δηλαδή μικρότερο ξ), τα σημεία τείνουν να αποκλίνουν από την ευθύγραμμη διάταξη με ταυτόχρονη αύξηση του σφάλματος τους. Οφείλεται στην αυξανόμενη ευαισθησία των αντίστοιχων τύπων σε μικρές αποκλίσεις της $ssccf$ από την πραγματική της τιμή, που είναι μοιραίο να υπάρχουν από το περιορισμένο στατιστικό δείγμα μας. Αυτός είναι και ο λόγος που απορρίψαμε μετρήσεις για μεγάλα t .

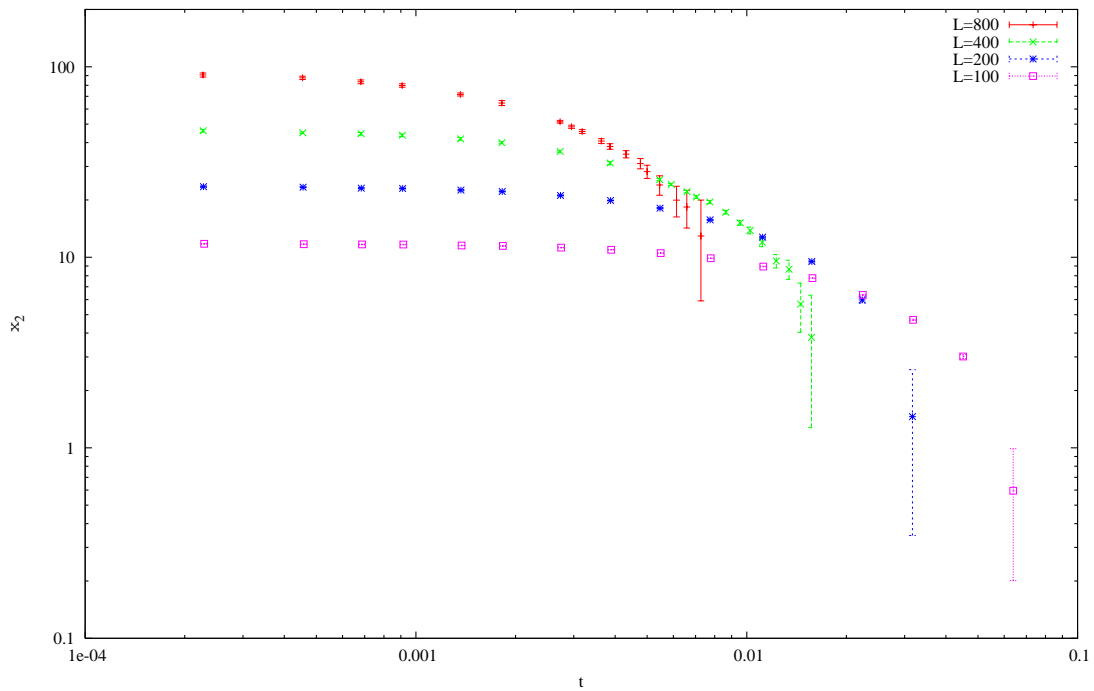
Υπολογίσαμε την κλίση για κάθε καμπύλη, και μια ακόμα από την υπέρθεση των τριών καμπυλών για $L = 800, 400, 200$ (η τελευταία απεικονίζεται στο σχήμα ως ευθεία γραμμή). Τα αποτελέσματα συγκεντρώθηκαν στον επόμενο πίνακα:

L	$\nu_2 \pm \delta\nu_2$	Απόκλιση από θεωρητική τιμή $\nu = 1$
100	1.398 ± 0.064	39.8%
200	1.057 ± 0.070	5.7%
400	1.063 ± 0.053	6.3%
800	1.002 ± 0.082	0.2%
200 & 400 & 800	0.991 ± 0.014	0.9%

Πίνακας 4.3. Εκτιμήσεις για τον κρίσιμο εκθέτη ν από προσαρμογές στα δεδομένα $\ln \xi_2$ vs $\ln t$.

Στην τελευταία προσαρμογή δεν συμπεριλάβαμε την $L = 100$, διότι δε συνεχίζει ομαλά την ευθύγραμμη τροχιά των σημείων (φαίνεται και από τη διαφοροποίηση της κλίσης της (Πίνακας 4.3)). Ίσως ο συγκεκριμένος ορισμός $\xi = \xi_2$, να είναι ιδιαίτερα ευαίσθητος στα fse τα οποία εντείνονται σε μικρότερα συστήματα.

Για $\beta < \beta_0(L)$:

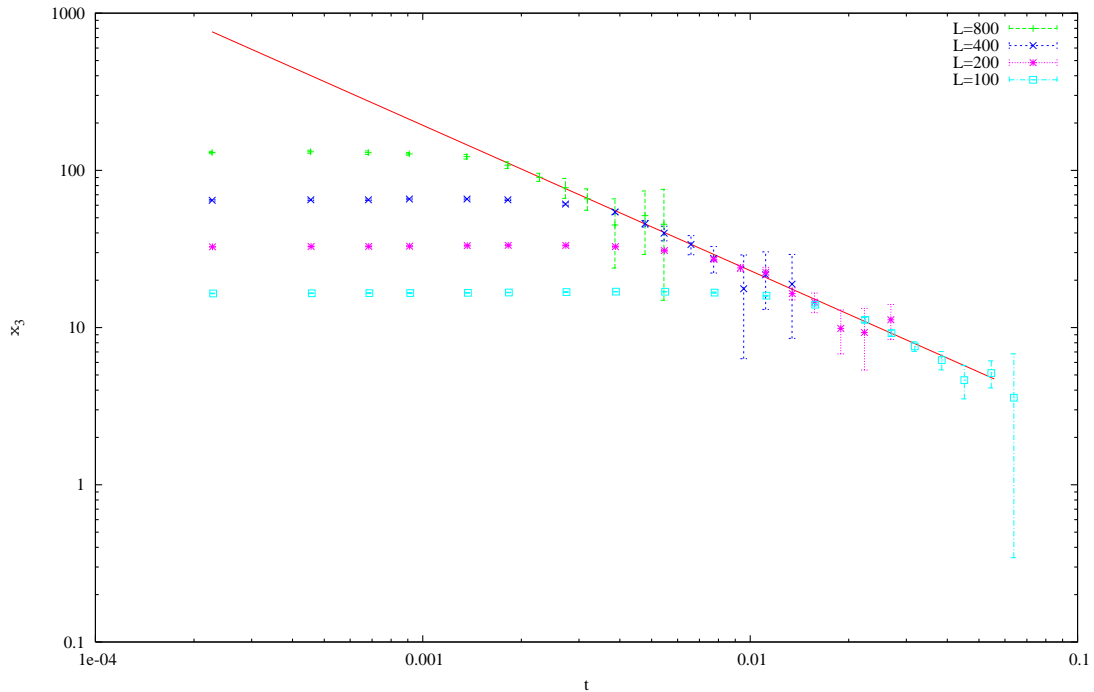


Διάγραμμα 4.15. Απουσία κατάλληλης περιοχής για προσαρμογή στα δεδομένα $\ln \xi_2$ vs $\ln t$ στην περιοχή $\beta < \beta_0(L)$.

Δε διακρίνεται σύμπτωση καμπυλών, ούτε γραμμική συμπεριφορά. Ενδεχομένως να ευθύνονται τα fse , αν όχι ο ίδιος ο ορισμός $\xi = \xi_2$.

ο $\xi = \xi_3$:

Για $\beta > \beta_0(L)$:



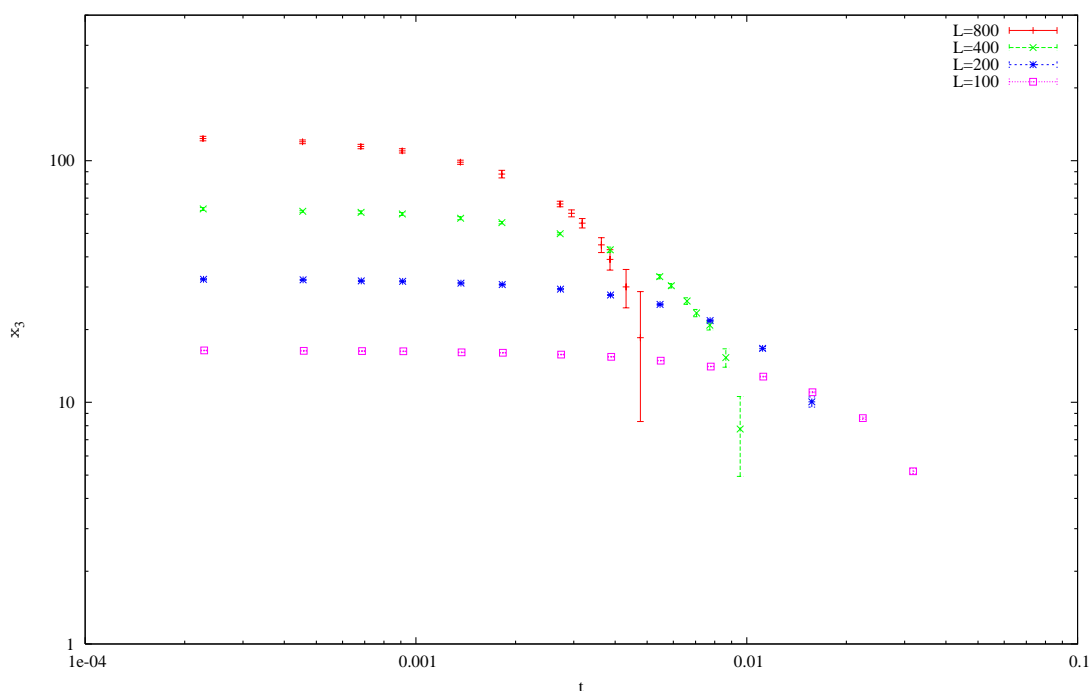
Διάγραμμα 4.16. Γραμμική προσαρμογή για τον προσδιορισμό του εκθέτη ν του Μήκους Συσχετισμού ξ_3 , στην περιοχή $\beta > \beta_0(L)$.

Όπως και πριν, όσο κατευθυνόμαστε σε μικρότερα ξ (στη γραμμική περιοχή), τόσο χαλαίει η γραμμικότητα και το σφάλμα αυξάνεται. Σε σύγκριση με τον προηγούμενο ορισμό ($\xi = \xi_2$), τα ανεπιθύμητα φαινόμενα είναι εντονότερα εδώ, γι' αυτό και θεωρούμε τον παρόντα ορισμό λιγότερο λειτουργικό. Τα αποτελέσματα για κάθε σειρά μετρήσεων, και την υπέρθεσή τους περιέχονται στον πίνακα:

L	$\nu_2 \pm \delta\nu_2$	Απόκλιση από θεωρητική τιμή $\nu = 1$
100	1.048 ± 0.063	4.8%
200	0.93 ± 0.13	7.4%
400	0.976 ± 0.060	2.4%
800	0.901 ± 0.091	9.9%
100 & 200 & 400 & 800	0.924 ± 0.010	7.6%

Πίνακας 4.4. Εκτιμήσεις για τον κρίσιμο εκθέτη ν από προσαρμογές στα δεδομένα $\ln \xi_3$ vs $\ln t$.

Για $\beta < \beta_0(L)$:



Διάγραμμα 4.17. Απουσία κατάλληλης περιοχής για προσαρμογή στα δεδομένα $\ln \xi_3$ vs $\ln t$ στην περιοχή $\beta < \beta_0(L)$.

Όπως και προηγουμένως δε διακρίνεται σύμπτωση καμπυλών ούτε γραμμική συμπεριφορά. Ενδεχομένως να ευθύνονται τα fse , αν όχι ο ίδιος ο ορισμός.

d. Εκθέτης συνάρτησης συσχετισμού η :

Αναφέραμε ότι ορίζεται στην εξίσωση:

$$G(r) \sim \frac{e^{-\frac{r}{\xi}}}{r^{d-2+\eta}}, \quad |t| \ll 1, \quad r \gg 1 \quad (11)$$

Λαμβάνοντας υπ' όψη και την περιοδικότητα του πλέγματος, προσαρμόζουμε στην $ssccf$ σε θερμοκρασία $\beta_0(L)$ την καμπύλη:

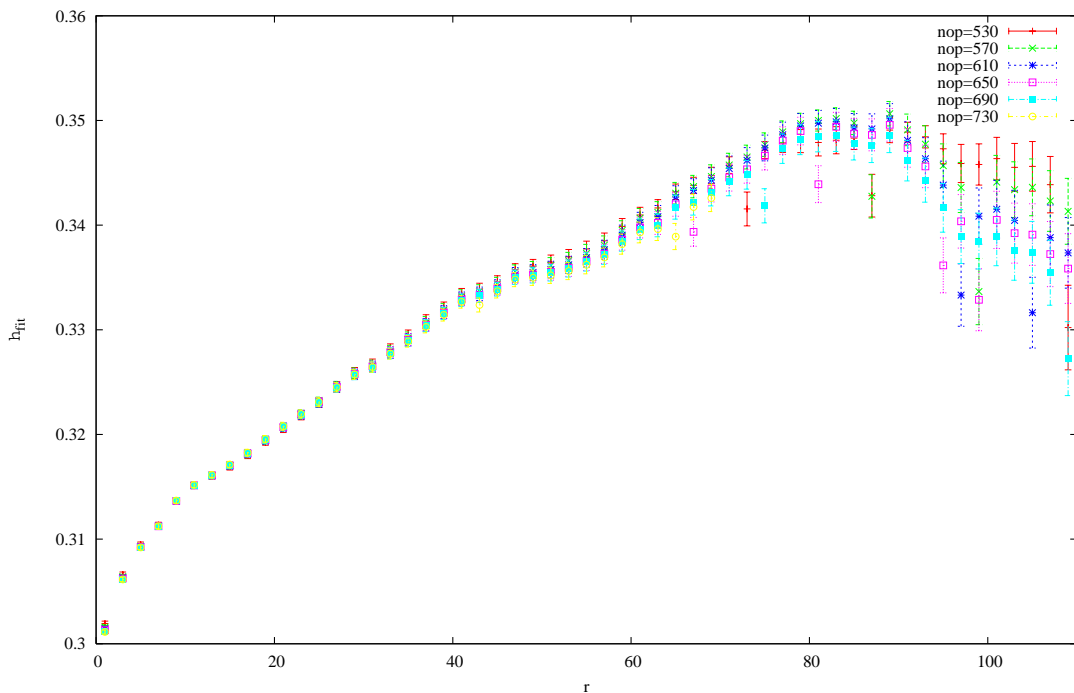
$$f(x) = c \left(\frac{e^{-r/\xi}}{r^\eta} + \frac{e^{-(L-r)/\xi}}{(L-r)^\eta} \right) + correction \quad (12)$$

Η βέλτιστη τιμή της παραμέτρου η , θα είναι και η εκτίμησή μας για τον εκθέτη.

Χρησιμοποιούμε την $ssccf$ για $L = 1600, \beta = \beta_0(1600) = 0.4404$. Συμπεριλαμβάνουμε όλα τα σημεία στο διάστημα προσαρμογής (πλην του $(r_1 = 0, G_1 = 1 \pm 0)$) διότι δεν ανταποκρίνεται στην

πραγματική συμπεριφορά). Υπολογίζουμε $\eta = 0.3011 \pm 0.0002$ που αποκλίνει κατά 20.4% από την πραγματική τιμή.

Υπενθυμίζουμε πως για το άπειρο σύστημα, η (11) ισχύει υπό την προϋπόθεση $r \gg 1$. Για μας θα σήμαινε να μη συμπεριλάβουμε σημεία με μικρό r . Έχοντας το κατά νου πραγματοποιήσαμε πολλαπλές προσαρμογές σε διαφορετικά διαστήματα. Τα αποτελέσματα δείχνονται στο γράφημα:



Διάγραμμα 4.18. Εκτιμήσεις του εκθέτη η από πολλαπλές προσαρμογές στην $ssccf$ για σύστημα με $L=1600$, $\beta=0.4404$.

Πως διαβάζεται: Έστω σημείο μιας από τις καμπύλες. Η τετμημένη του είναι κοινή με του πρώτου (με το μικρότερο r) από τα σημεία της $ssccf$ στα οποία εφαρμόζουμε την προσαρμογή. Η φέρουσα καμπύλη αντιστοιχεί σε σταθερό αριθμό διαδοχικών σημείων προσαρμογής, όσων αναγράφει η ταμπέλα της. Επομένως αν βρισκόμαστε στην καμπύλη $N = N_{of_points}$ στο σημείο με τετμημένη r , η προσαρμογή γίνεται στο διάστημα $[x, x + N_{of_points} - 1]$ της $ssccf$ και έχει αποτέλεσμα, την τεταγμένη του σημείου*.

Παρατηρούμε, όχι μόνο δε βελτιώνεται η υπολογισμένη τιμή του η , αλλά αποκλίνει περεταίρω από την αντίστοιχη θεωρητική, για μια ευρεία περιοχή ισχύος του συναρτησιακού παράγοντα πτώσης εκθετικής δύναμης. Από την αδυναμία να προσδιορίσουμε το η με σχετική ακρίβεια, θα μας απαλλάξει σε λίγο η μέθοδος FSS .

* στην πραγματικότητα τα διαστήματα προσαρμογής είναι δύο, τα $[x, x + N_{of_points} - 1]$, $[L - (x + N_{of_points} - 1), L - x]$ στα οποία η $ssccf$ είναι κατοπτρικά συμμετρική (εξίσωση (8))

4.2.2. Μέθοδος Κλιμάκωσης Μεγέθους Συστήματος (FSS)

Σε αντίθεση με τη μέθοδο απευθείας προσαρμογής, η FSS επικεντρώνεται στα φαινόμενα της κρίσιμης περιοχής όπου δρουν έντονα τα fse . Έστω μέγεθος a που συμπεριφέρεται στην κρίσιμη περιοχή ως:

$$a \sim |t|^b \quad (13)$$

όπου b ο κρίσιμος εκθέτης του. Δεδομένου ότι:

$$\xi \sim |t|^{-\nu} \quad (14)$$

έχουμε:

$$(9) \xrightarrow{(10)} a \sim \xi^{-\frac{b}{\nu}} \quad (15)$$

Σε πεπερασμένο σύστημα όμως το ξ δεν αποκλίνει στο άπειρο, συμπεριφέρεται αναλυτικά αποκτώντας μέγιστη τιμή σε θερμοκρασία $\beta_0(L) < \beta_C$ διαμορφώνοντας ανάλογα και τη συμπεριφορά του a . Η FSS εκφράζει τη συμπεριφορά αυτή ως:

$$a_{finite} = \xi^{-\frac{b}{\nu}} a_0\left(\frac{L}{\xi}\right) \quad (16)$$

όπου $a_0(x)$ αδιάστατη συνάρτηση με την ιδιότητα:

$$a_0(x) \sim x^{\frac{b}{\nu}} \text{ για } x \rightarrow 0 \quad (17)$$

δηλαδή:

$$a_{finite} \sim L^{-\frac{b}{\nu}} \text{ για } L/\xi \rightarrow 0 \text{ (όταν } \beta \rightarrow \beta_C) \quad (18)$$

που βασίζεται στη θεμελιώδη παραδοχή της FSS:

$$\xi \sim L \text{ για } \beta = \beta_C \quad (19)$$

Η (16) δεν είναι εύχρηστη διότι δε γνωρίζουμε το $\xi(\beta)$. Την τροποποιούμε ως εξής:

$$a_{finite} = L^{-\frac{b}{\nu}} \left(\frac{L}{\xi}\right)^{\frac{b}{\nu}} a_0\left(\frac{L}{\xi}\right) \equiv L^{-\frac{b}{\nu}} \tilde{a}_0\left(\frac{L}{\xi}\right) \quad (20)$$

Η συνάρτηση $\tilde{a}_0(x)$ ονομάζεται *συνάρτηση κλιμάκωσης* (scaling function).

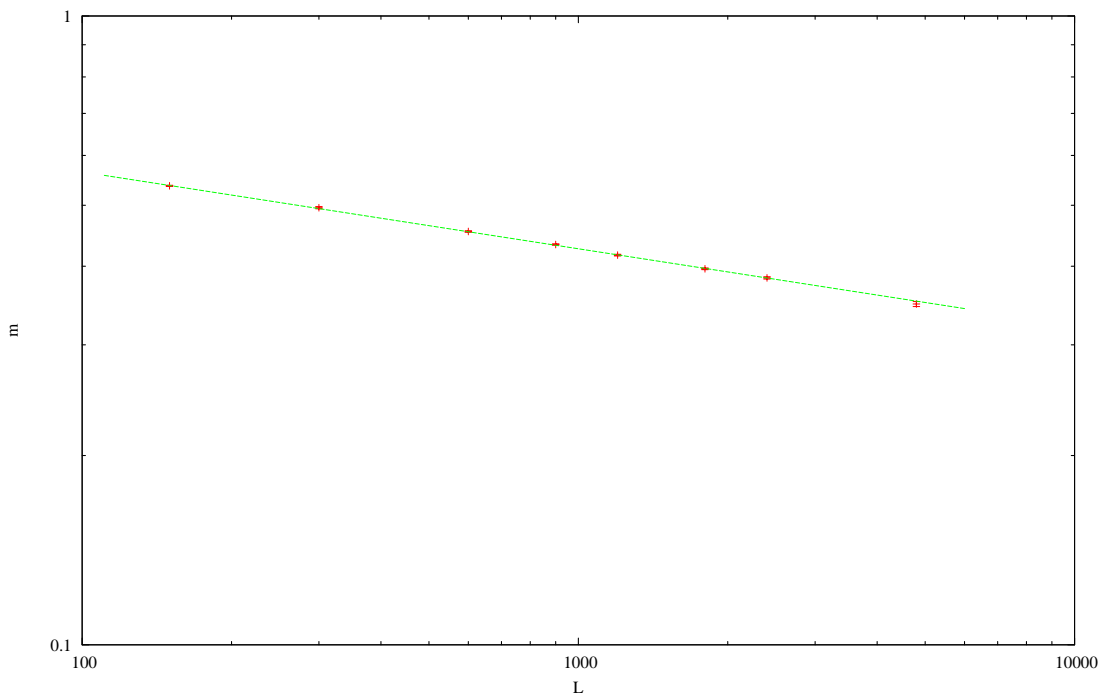
Οι σχέσεις (18) και (20) θα αξιοποιηθούν για τον υπολογισμό κρίσιμων εκθετών.

a. Σχέση (18):

- ο Εξάγουμε αντίστοιχη σχέση για τη Μαγνήτιση:

$$m_{fn} \sim L^{-\frac{\beta}{\nu}}, \quad \beta = \beta_C^+ \quad (21)$$

Μπορούμε να κάνουμε προσαρμογή εκθετικής συνάρτησης, η καλύτερα να πραγματοποιήσουμε γραμμική προσαρμογή στη λογαριθμική εκδοχή της (21) όπως φαίνεται παρακάτω:

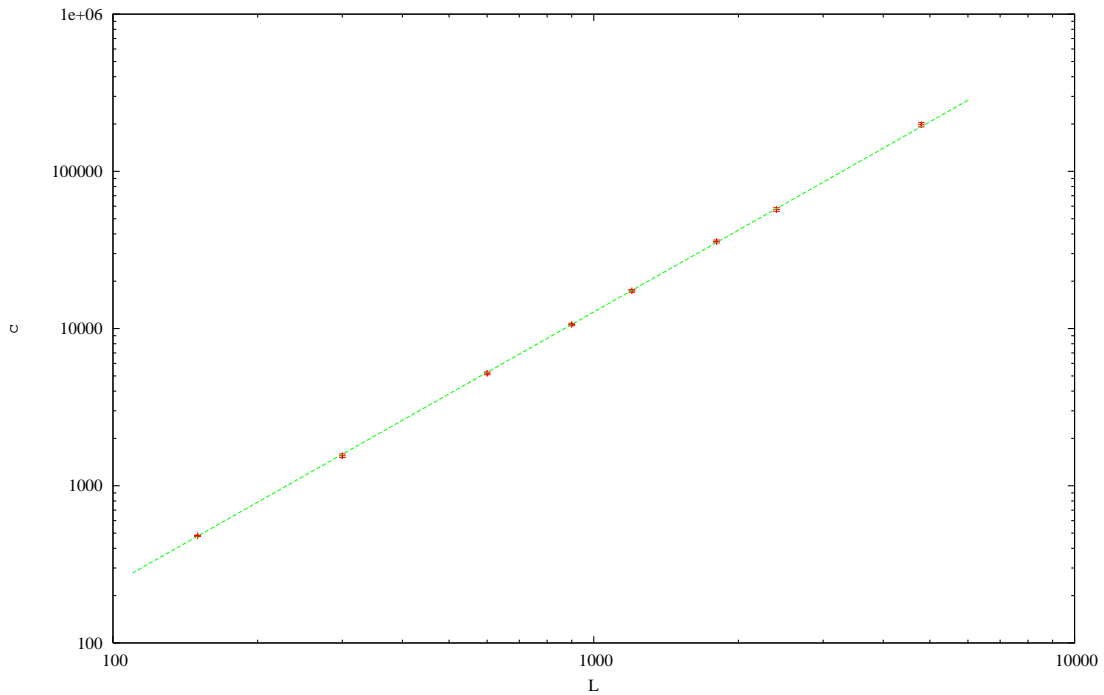


Διάγραμμα 4.19. FSS στη Μαγνήτιση στην Κρίσιμη Θερμοκρασία.

Υπολογίσαμε $\frac{\beta}{\nu} = 0.1223 \pm 0.0009$ που αποκλίνει 2.2% της θεωρητικής τιμής $\frac{\beta}{\nu} = 0.125$.

- ο Για τη Μαγνητική Επιδεκτικότητα:

$$\chi_{fn} \sim L^{\frac{\gamma}{\nu}}, \quad \beta = \beta_C \quad (22)$$



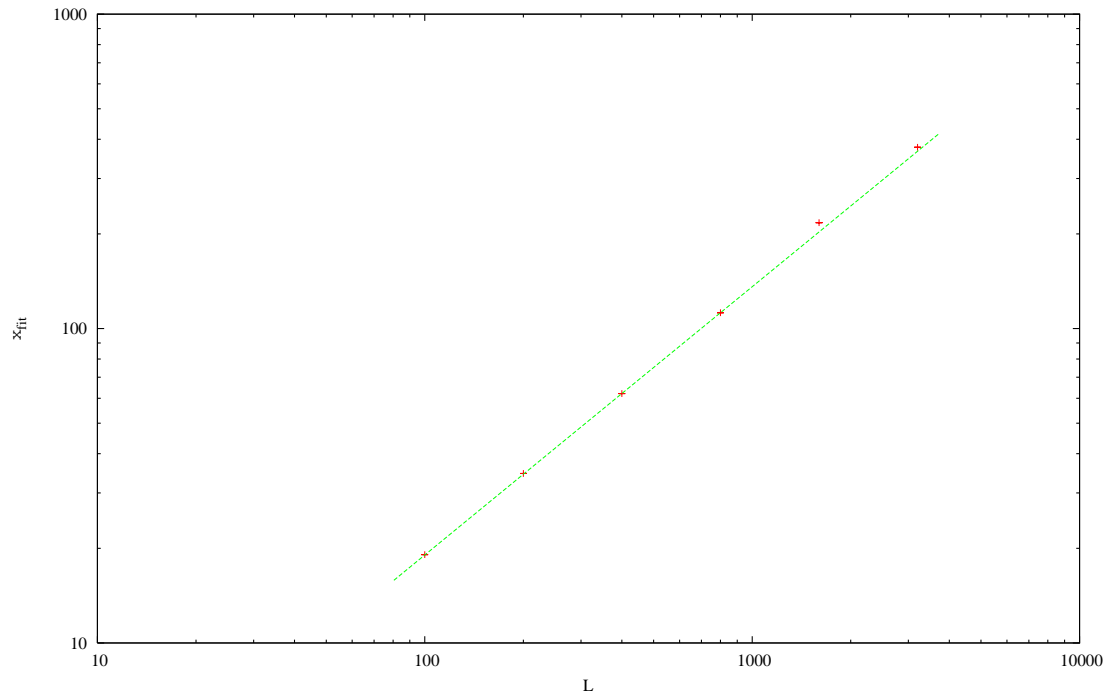
Διάγραμμα 4.20. FSS στη Μαγνητική Επιδεκτικότητα στην Κρίσιμη Θερμοκρασία.

Υπολογίσαμε $\frac{\gamma}{\nu} = 1.7309 \pm 0.0042$ που αποκλίνει 1.1% της θεωρητικής τιμής $\frac{\gamma}{\nu} = 1.75$.

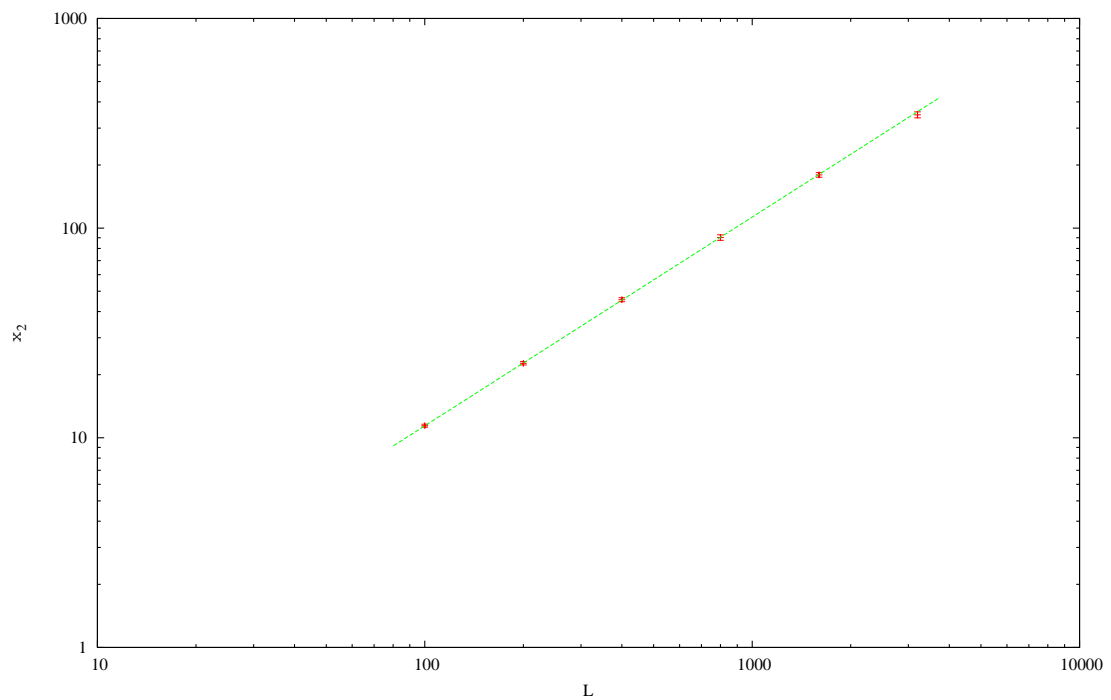
- ο Για το Μήκος Συσχετισμού:

$$\xi_{fin} \sim L^1, \beta = \beta_C \quad (23)$$

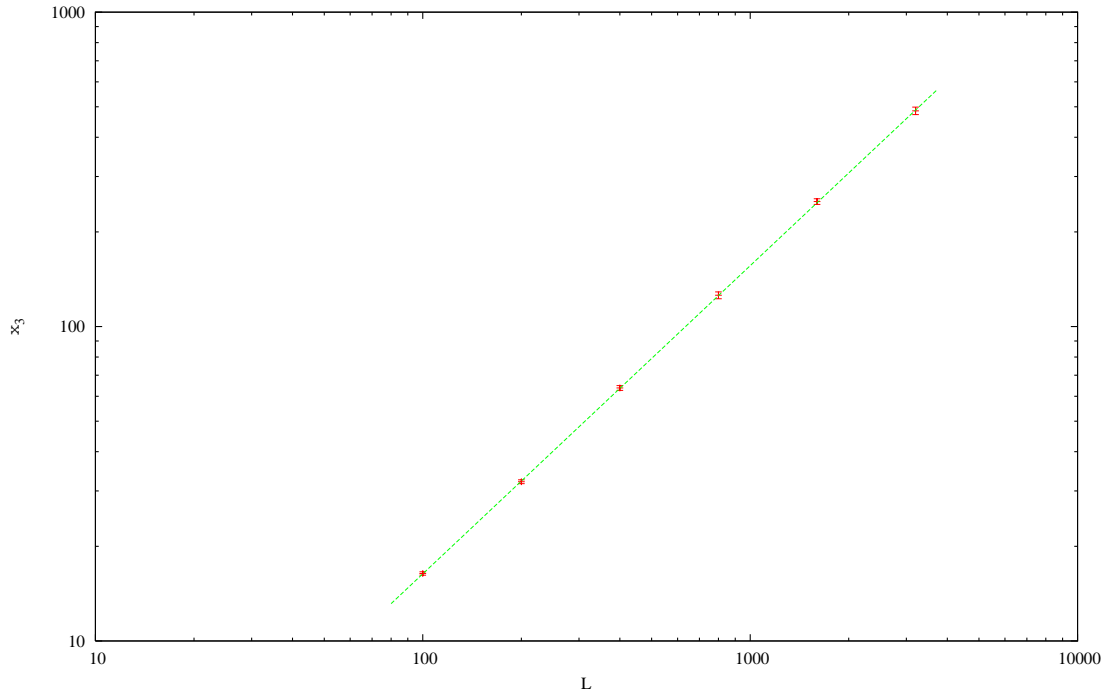
Εκθέτουμε διαγράμματα και αποτελέσματα για τους τρεις ορισμούς:



Διάγραμμα 4.21. FSS στο Μήκος Συσχετισμού ξ_{fit} στην Κρίσιμη Θερμοκρασία.



Διάγραμμα 4.22. FSS στο Μήκος Συσχετισμού ξ_2 στην Κρίσιμη Θερμοκρασία.



Διάγραμμα 4.23. FSS στο Μήκος Συσχετισμού ξ_3 στην Κρίσιμη Θερμοκρασία.

Ορισμός ξ	Τιμή Εκθέτη β ' μέλους	Απόκλιση από θεωρητική τιμή 1
ξ_{fit}	0.853 ± 0.044	14.7 %
ξ_2	0.9954 ± 0.0030	0.5%
ξ_3	0.9798 ± 0.0035	2.0%

Πίνακας 4.5. Εκτιμήσεις για τον κρίσιμο εκθέτη ν , από διενέργεια FSS στο Μήκος Συσχετισμού για τους τρεις ορισμούς του.

b. Σχέση (20):

- ο Για τη Μαγνήτιση η αντίστοιχη σχέση είναι:

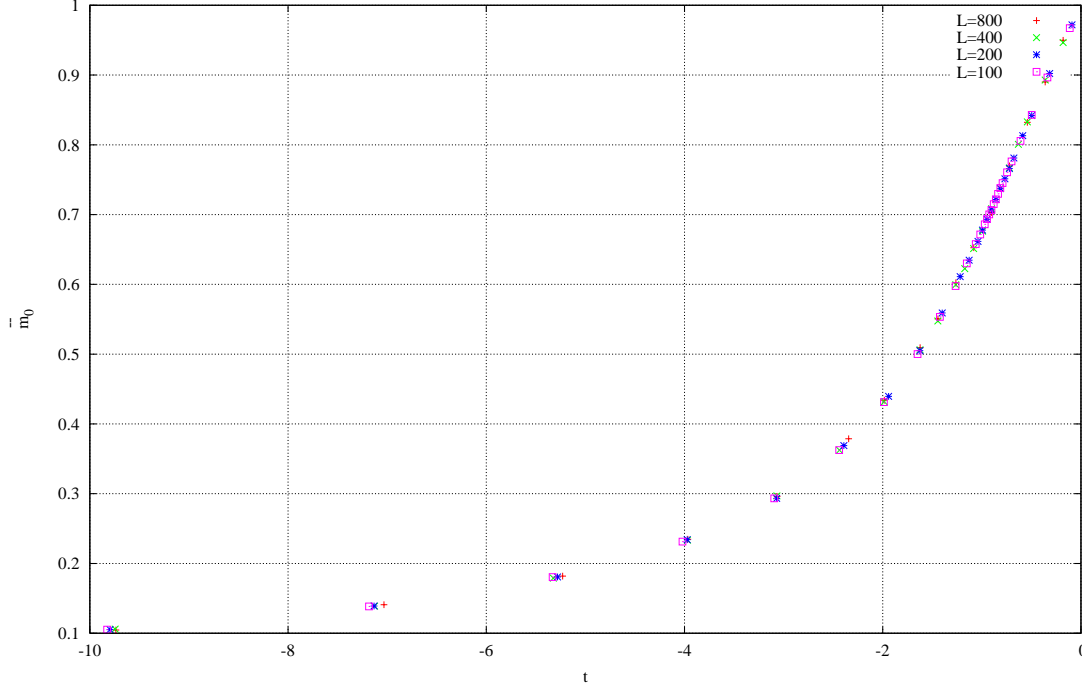
$$m_{fin} \cdot L^\nu = \tilde{m}_0 \left(\frac{L}{\xi} \right), \quad \beta > \beta_c \text{ (τότε ορίζεται ο εκθέτης } \beta) \quad (24)$$

ή

$$(10) \rightarrow m_{fin} \cdot L^\nu = \tilde{m}_0 (L^\nu \cdot t), \quad \beta > \beta_c \quad (25)$$

Παράγουμε σειρές μετρήσεων $(m_L(t) \cdot L^\nu, L^\nu \cdot t)$ για ορισμένα μεγέθη συστήματος, σε διάφορες θερμοκρασίες στην κρίσιμη περιοχή. Η $\tilde{m}_0(x)$ είναι ανεξάρτητη μεγέθους συστήματος, επομένως οι σειρές μετρήσεων θα την αναπαράγουν σε μια κοινή καμπύλη. Αυτό είναι το κριτήριό μας για να αποφανθούμε αν το ζεύγος εκθετών (ν, β) που διαλέξαμε είναι το σωστό, η πρέπει να διαλέξουμε άλλο ώστε να συμπίπτουν οι σειρές μετρήσεων.

Έχουμε:



Διάγραμμα 4.24. Συνάρτηση Κλιμάκωσης $\tilde{m}_0(t)$ για τη Μαγνήτιση, όπως την αποτυπώνουν οι συμπίπτουσες καμπύλες κλιμακούμενης Μαγνήτισης.

Υπολογίσαμε $\nu = 0.999 \pm 0.002$ με απόκλιση 0.1% από τη θεωρητική τιμή $\nu = 1$, και $\beta = 0.122 \pm 0.002$ με απόκλιση 2.4% από τη θεωρητική $\beta = 0.125$.

Η βέλτιστη τιμή των (ν, β) προέκυψε από την ελαχιστοποίηση της απόκλισης:

$$\chi^2 = \frac{1}{n_{of_dof}} \sum_{i=1}^{n_{of_sets}} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n_{of_sets}} \sum_{k=1}^{n_{of_points}^{(i)}} \frac{(y_k^{(i)} - y_{k,interp}^{(j)})^2}{\delta y_k^{(i)2}} \quad (26)$$

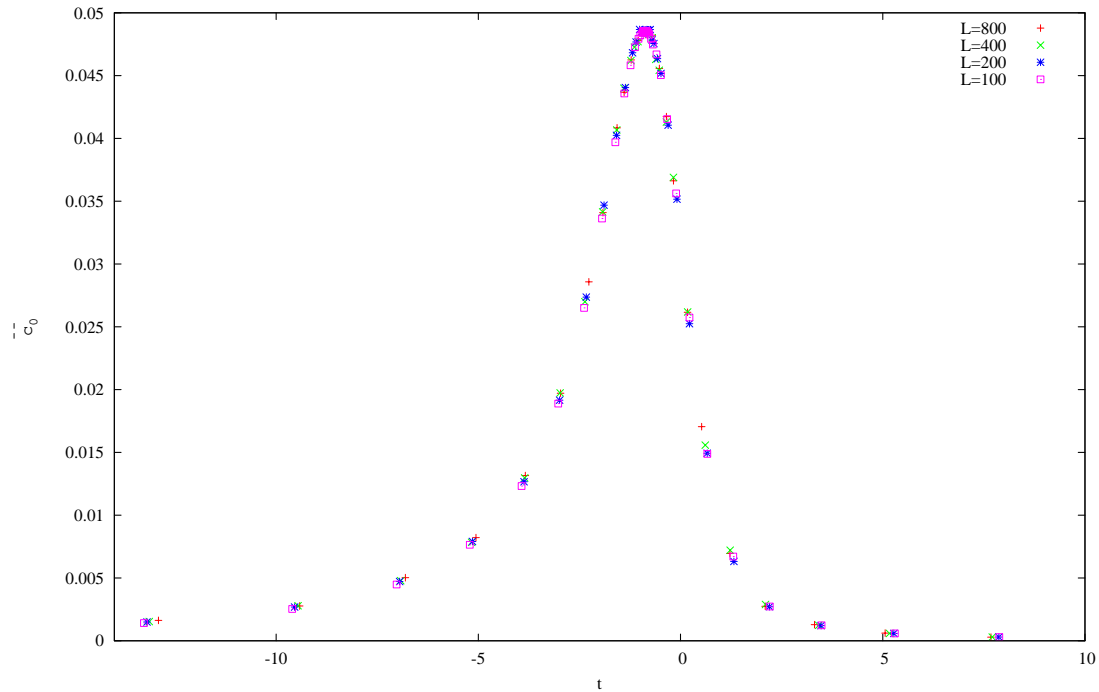
όπου n_{of_dof} το πλήθος των σημείων που συνθέτουν την καμπύλη στην περιοχή σύμπτωσης, n_{of_sets} το πλήθος των σειρών μετρήσεων, $n_{of_points}^{(i)}$ το πλήθος των μετρήσεων εντός του διαστήματος σύμπτωσης του i -οστού σέτ, $y_k^{(i)} \pm \delta y_k^{(i)}$ η μετρούμενη τιμή για $t = t_k^{(i)}$ προερχόμενη από το i -οστό σέτ μετρήσεων, και $y_{k,interp}^{(j)}$ η υπολογισμένη με παρεμβολή (κυβική splines) τιμή για $t = t_k^{(i)}$ με βάση το j -οστό σέτ μετρήσεων.

Το διάστημα σύμπτωσης επιλέχθηκε στενό γύρω από την β_C ώστε η προσέγγιση (25) να είναι εγκυρότερη, αλλά και αρκετά ευρύ ώστε να συμπεριλάβουμε αρκετή διαθέσιμη στατιστική πληροφορία από τα σημεία μας. Το σφάλμα προσδιορίστηκε με σύγκριση των μετρούμενων τιμών των μεγεθών για μικρές παραλλαγές του διαστήματος σύμπτωσης.

- ο Για τη Μαγνητική Επιδεκτικότητα έχουμε:

$$(16) \rightarrow \chi_{fn} \cdot L^{\frac{\gamma}{\nu}} = \tilde{\chi}_0(L^{\frac{1}{\nu}} \cdot t) \quad (27)$$

Το διάγραμμα σύμπτωσης:



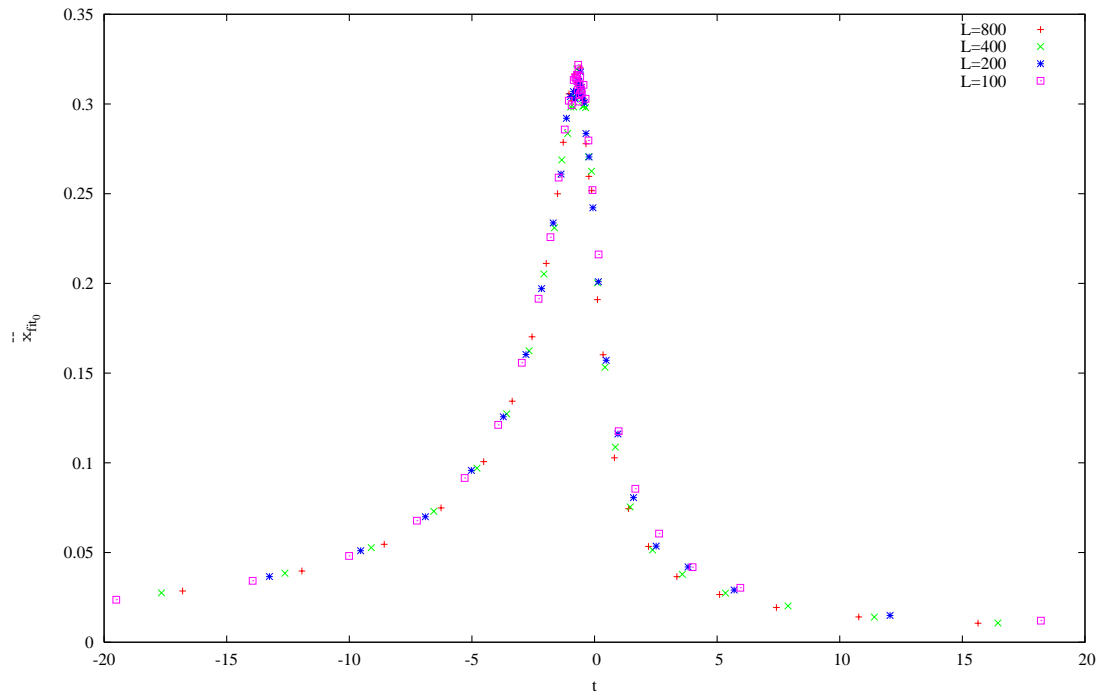
Διάγραμμα 4.25. Συνάρτηση Κλιμάκωσης $\tilde{\chi}_0(t)$ για τη Μαγνητική Επιδεκτικότητα.

Υπολογίσαμε $\nu = 1.006 \pm 0.001$ με απόκλιση 0.6% από τη θεωρία και $\gamma = 1.760 \pm 0.002$ με απόκλιση 0.6% από τη θεωρητική τιμή $\gamma = 1.75$.

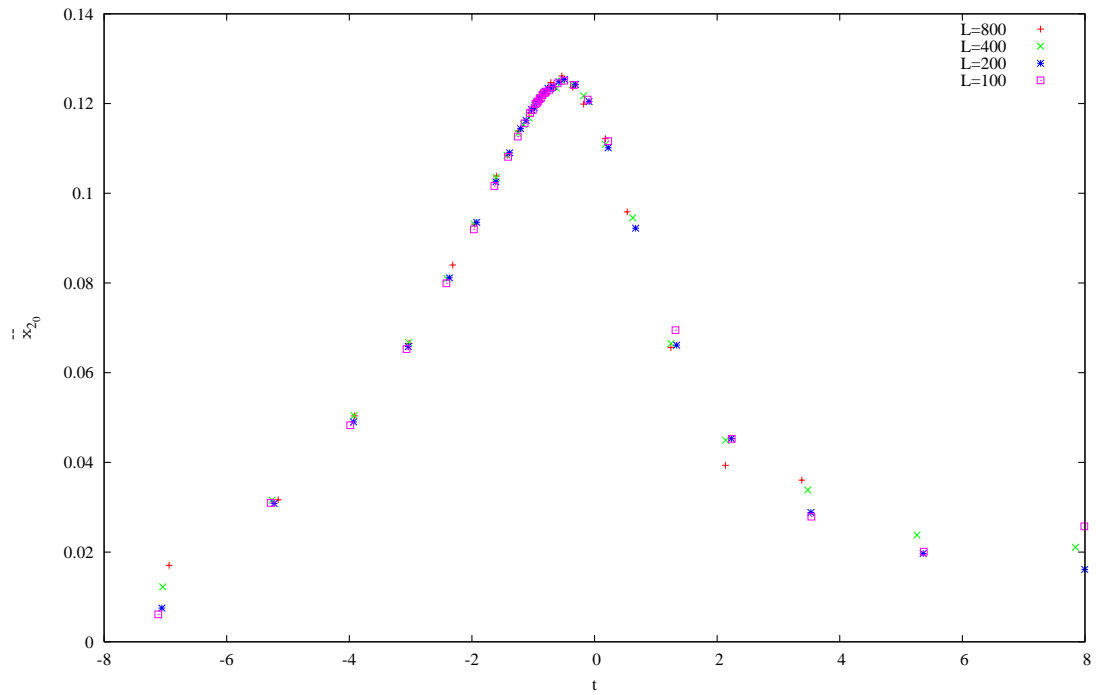
- ο Για το Μήκος Συσχετισμού:

$$\xi_{fn} \cdot L^{-1} = \tilde{\xi}_0(L^{\frac{1}{\nu}} \cdot t) \quad (28)$$

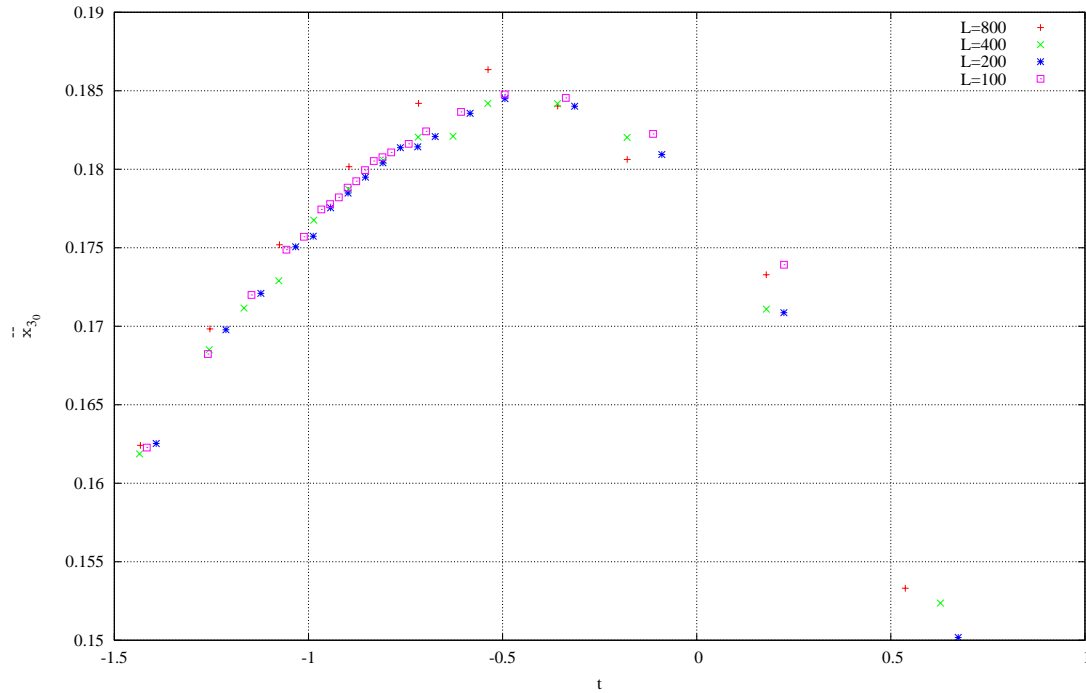
Εκθέτουμε διαγράμματα και αποτελέσματα για τους τρεις ορισμούς:



Διάγραμμα 4.26. Συνάρτηση Κλιμάκωσης $\tilde{\xi}_{fit}(t)$ για τη Μήκος Συσχετισμού ξ_{fit} .



Διάγραμμα 4.27. Συνάρτηση Κλιμάκωσης $\tilde{\xi}_2(t)$ για τη Μήκος Συσχετισμού ξ_2 .



Διάγραμμα 4.28. Συνάρτηση Κλιμάκωσης $\tilde{\xi}_3(t)$ για τη Μήκος Συσχετισμού ξ_3 .

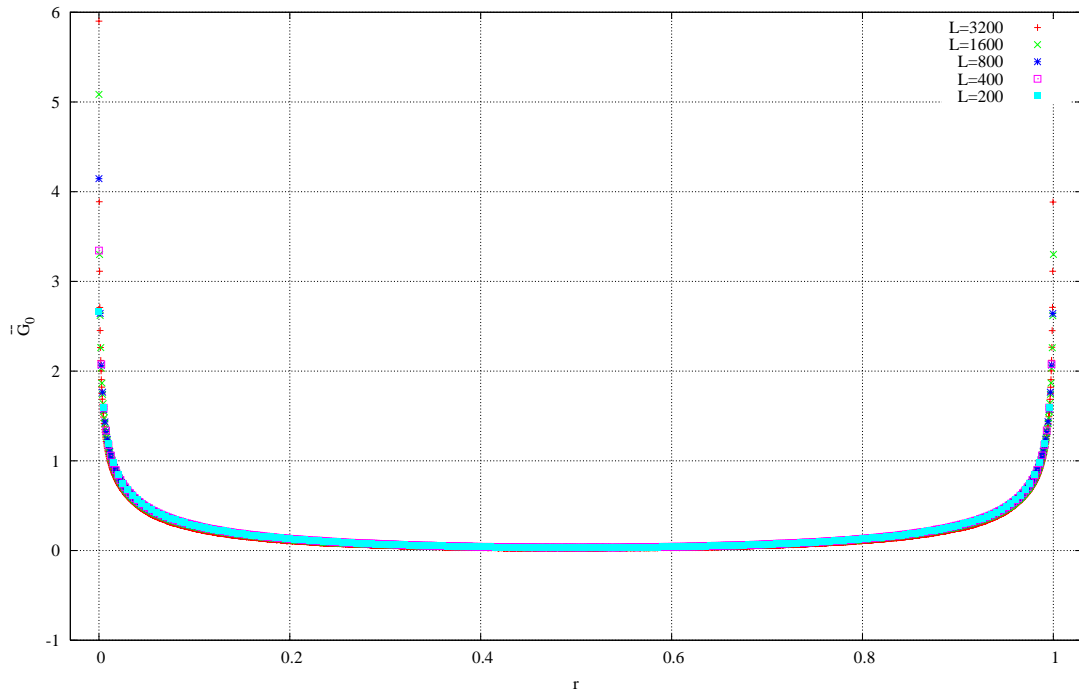
Ορισμός ξ	Τιμή εκθέτη ν	Απόκλιση από Θεωρητική τιμή $\nu = 1$	Τιμή Εκθέτη α' μέλους της (28)	Απόκλιση από Θεωρητική τιμή -1
ξ_{fit}	1.072 ± 0.001	7.2%	-0.940 ± 0.001	6.0%
ξ_2	1.003 ± 0.001	0.3%	-0.997 ± 0.001	0.3%
ξ_3	1.002 ± 0.007	0.2%	-0.983 ± 0.007	1.7%

Πίνακας 4.6. Εκτιμήσεις κρίσιμου εκθέτη ν και εκθέτη α' μέλους της (28), ως βέλτιστες τιμές για τη σύμπτωση των καμπυλών κλιμακούμενου Μήκους Συσχετισμού.

Συνάρτηση κλιμάκωσης κατασκευάζεται και για τη Συνάρτηση Συσχετισμού στη θερμοκρασία $\beta = \beta_c$ (πηγή [3]):

$$G_{fin}(r) = c \frac{e^{-\frac{r}{\xi}}}{r^\eta} = c \frac{e^{-\frac{rL}{L\xi}}}{\left(\frac{r}{L}\right)^\eta \cdot L^\eta} \xrightarrow{(15)} G_{fin}(r) \cdot L^\eta = c \frac{e^{-\frac{A r}{L}}}{\left(\frac{r}{L}\right)^\eta} \equiv \tilde{G}(L^{-1} \cdot r) \quad (29)$$

όπου A η σταθερά αναλογίας ανάμεσα στα L, ξ . Η συνάρτηση $\tilde{G}(x)$ είναι ανεξάρτητη μεγέθους συστήματος, επομένως σειρές μετρήσεων $(G_L(L, r) \cdot L^\eta, L^{-1} \cdot r)$ για διαφορετικά μεγέθη θα την αναπαράγουν σε μια κοινή καμπύλη, που συμβαίνει μόνο για το σωστό ζεύγος τιμών εκθέτη η και εκθέτη του παράγοντα του r στο τελευταίο μέλος της (29) (όπου έχει τιμή -1).



Διάγραμμα 4.29. Συνάρτηση Κλιμάκωσης $\tilde{G}_0(r)$ για τη Συνάρτηση Συσχετισμού, όπως την αποτυπώνουν οι συμπίπτουσες καμπύλες κλιμακούμενου Συσχετισμού.

Υπολογίσαμε τιμή -0.9999 ± 0.0001 για τον εκθέτη του παράγοντα του r που αποκλίνει 0.01% της θεωρητικής τιμής -1 , και $\eta = 0.2450 \pm 0.0005$ που αποκλίνει 2.0 % της θεωρητικής τιμής $\eta = 0.25$.

4.3. Σύγκριση μεθόδων Απ' Ευθείας Προσαρμογής και *FSS*

Συγκρίνοντας τα αποτελέσματα των δύο μεθόδων, ως προς την απόκλισή τους από τη θεωρία και την αβεβαιότητα που φέρουν, διαπιστώνουμε την υπεροχή της μεθόδου *FSS*. Όπως είδαμε, αξιοποιεί τις συνέπειες από το πεπερασμένο των συστημάτων καθιστώντας την αποτελεσματική και για μικρά συστήματα εκεί όπου η μέθοδος *απ' ευθείας προσαρμογής* δεν έχει καμία λειτουργικότητα (για πολύ μικρά συστήματα, οι σχέσεις της *FSS* περιέχουν διορθώσεις, γι' αυτό πρέπει να έχουμε ένα κατώτατο όριο πάνω απ' το οποίο να την εφαρμόζουμε, ανάλογα με την προσδοκώμενη ακρίβεια στα αποτελέσματα). Επίσης, η ποσότητα των απαιτούμενων δεδομένων για την *FSS* είναι ένα κλάσμα των αντίστοιχων της μεθόδου *απ' ευθείας προσαρμογής*, αφού το δείγμα λαμβάνεται στη στενή περιοχή γύρω από την κρίσιμη θερμοκρασία και όχι στο ευρύτερο φάσμα θερμοκρασιών.

ΠΗΓΕΣ

- [1] «Monte Carlo Methods in Statistical Physics» *M. E. J. Newman, G.T. Barkema* 1998
- [2] «Lectures on Statistical Physics» *Harvey Gould, Jan Tobochnik* 2005
- [3] «Σημειώσεις Υπολογιστικής Φυσικής II» *Κωνσταντίνος Αναγνωστόπουλος* 2005
- [4] «Improvements In cluster Algorithms for Quantum Spin Systems» *Bernard B. Beard* 1996
- [5] «Computational Studies of Pure and Dilute Spin Models» *Peter Meyer* 2000
- [6] «STATISTICAL PHYSICS Statics, Dynamics and Renormalization» *Leo P. Kadanoff* 2000
- [7] <http://www.imedeia.uib.es/~tessonec/applets/JIsing.php>

ΔΙΑΓΡΑΜΜΑΤΑ, ΣΧΗΜΑΤΑ, ΠΙΝΑΚΕΣ

Σχήμα 1.1. Τυπική συμπεριφορά της Ενέργειας του συστήματος στο φάσμα των θερμοκρασιών.	7
Σχήμα 1.2. Τυπική συμπεριφορά της Μαγνήτισης στο φάσμα των θερμοκρασιών.	7
Σχήμα 1.3. Τυπική συμπεριφορά της Ειδικής Θερμότητας στο φάσμα των θερμοκρασιών.	8
Σχήμα 1.4. Τυπική συμπεριφορά της Μαγνητικής Επιδεκτικότητας στο φάσμα των θερμοκρασιών.	8
Σχήμα 1.5. Τυπική συμπεριφορά του Μήκους Συσχετισμού στο φάσμα των θερμοκρασιών.	9
Σχήμα 1.6. Τυπική μορφή της Συνάρτησης Συσχετισμού (ssccf).	9
Σχήμα 1.7. Διάκριση περιοχών τιμών για την sscf με βάση την υπερισχύουσα συναρτησιακή της συμπεριφορά.	10
Πίνακας 1.1. Κρίσιμοι εκθέτες σε συστήματα 2D και 3D Ising (πηγή [6]).	10
Σχήμα 1.8. Το σύστημα για θερμοκρασία $T=0$. Όλα τα spins ομόρροπα.	11
Σχήμα 1.9 $T=2.100$. Τα πρώτα μικρά σμήνη σχηματίζονται.	12
Σχήμα 1.10. $T=T_c=2.269$. Δε διακρίνεται η φορά της μαγνήτισης του συστήματος όταν ήταν παγωμένο.	12
Σχήμα 1.11. $T=3.100$. Υπερίσχυση της τάσεως αυτονομίας των spins με συνέπεια την κατάτμηση των μεγάλων σμηνών σε μικρότερα. ..	13
Σχήμα 1.12. $T=\infty$. Κάθε spin λαμβάνει τυχαία φορά. Δεν αλληλεπιδρά με κανάλλο spin.	14
Σχήμα 2.1. Καταστάσεις μ (αριστερά), ν (δεξιά) και ένα σμήνος για αναστροφή.	18
Σχήμα 2.2. Τοροϊδείς συνοριακές συνθήκες (πάνω) και ελικοειδείς συνοριακές συνθήκες (κάτω), σε τετραγωνικό πλέγμα γραμμικής διάστασης $L=5$	20
Διάγραμμα 3.1. Εξισορρόπηση συστήματος με $L=200$, $\beta=0.3000$ και “παγωμένη” αρχική κατάσταση.	22
Διάγραμμα 3.2. Αυτοσυσχετισμός βασικών μεγεθών σε σύστημα με $L=200$, $\beta=0.3265$	24
Σχήμα 3.1. Ο συσχετισμός των ζευγών s_{A_1}, s_{B_1} και s_{A_2}, s_{B_2} , οδηγεί σε συσχετισμό ανάμεσα στα γινόμενα $s_{A_1} s_{A_2}$ και $s_{B_1} s_{B_2}$	25
Σχήμα 3.2. Ο μη-συσχετισμός των ζευγών s_{A_1}, s_{B_1} και s_{A_2}, s_{B_2} , οδηγεί σε ανεξάρτητες τιμές $s_{A_1} s_{A_2}$ και $s_{B_1} s_{B_2}$	26
Σχήμα 3.3. Ο μη-συσχετισμός του ζεύγους s_{A_2}, s_{B_2} , οδηγεί σε ανεξάρτητες τιμές $s_{A_1} s_{A_2}$ και $s_{B_1} s_{B_2}$	26
Σχήμα 3.4. Ενδεδειγμένος τρόπος λήψης μετρήσεων $(s_i s_j)_r$ από κατάσταση του συστήματος, με σκοπό τη μεγιστοποίηση της ανεξαρτησίας τους.	27
Διάγραμμα 3.4. Συνάρτηση συσχετισμού συστήματος με $L=400$, $\beta=0.4373$ και περιοδικές συνοριακές συνθήκες.	29

Διάγραμμα 4.1. Ενέργεια/δεσμό συναρτήσει της θερμοκρασίας, για διάφορα μεγέθη συστήματος.	32
Διάγραμμα 4.2. Μαγνήτιση/spin συναρτήσει της θερμοκρασίας, για διάφορα μεγέθη συστήματος.	33
Διάγραμμα 4.3. Ειδική θερμότητα/spin συναρτήσει της θερμοκρασίας, για διάφορα μεγέθη συστήματος.	33
Διάγραμμα 4.4. Μαγνητική Επιδεκτικότητα/spin συναρτήσει της θερμοκρασίας, για διάφορα μεγέθη συστήματος.	34
Διάγραμμα 4.5. Μήκος Συσχετισμού ξ_{fit} συναρτήσει της θερμοκρασίας, για διάφορα μεγέθη συστήματος.	35
Διάγραμμα 4.6. Μήκος Συσχετισμού ξ_2 συναρτήσει της θερμοκρασίας, για διάφορα μεγέθη συστήματος.	36
Διάγραμμα 4.7. Μήκος Συσχετισμού ξ_3 συναρτήσει της θερμοκρασίας, για διάφορα μεγέθη συστήματος.	36
Πίνακας 4.1: Θερμοκρασίες μεγιστοποίησης των $\xi_{fit}, \xi_2, \xi_3, \chi$ για διαφορετικά μεγέθη συστήματος.	37
Διάγραμμα 4.8. Θερμοκρασίες μεγίστων Μαγνητικής Επιδεκτικότητας συναρτήσει αντιστρόφου Μεγέθους Συστήματος.	38
Πίνακας 4.2. Κρίσιμοι εκθέτες σε συστήματα 2D και 3D Ising (πηγή [6]).	40
Διάγραμμα 4.9. Γραμμική προσαρμογή για τον προσδιορισμό του εκθέτη β της Μαγνήτισης.	41
Διάγραμμα 4.10. Γραμμική προσαρμογή για τον προσδιορισμό του εκθέτη γ της Μαγνητικής Επιδεκτικότητας, στην περιοχή $\beta > \beta_0(L)$	42
Διάγραμμα 4.11. Γραμμική προσαρμογή για τον προσδιορισμό του εκθέτη γ της Μαγνητικής Επιδεκτικότητας, στην περιοχή $\beta < \beta_0(L)$	43
Διάγραμμα 4.12. Γραμμική προσαρμογή για τον προσδιορισμό του εκθέτη ν του Μήκους Συσχετισμού ξ_{fit} , στην περιοχή $\beta > \beta_0(L)$	44
Διάγραμμα 4.13. Γραμμική προσαρμογή για τον προσδιορισμό του εκθέτη ν του Μήκους Συσχετισμού ξ_{fit} , στην περιοχή $\beta < \beta_0(L)$	45
Διάγραμμα 4.14. Γραμμική προσαρμογή για τον προσδιορισμό του εκθέτη ν του Μήκους Συσχετισμού ξ_2 , στην περιοχή $\beta > \beta_0(L)$	46
Πίνακας 4.3. Εκτιμήσεις για τον κρίσιμο εκθέτη ν από προσαρμογές στα δεδομένα $\ln \xi_2$ vs $\ln t$	46
Διάγραμμα 4.15. Απουσία κατάλληλης περιοχής για προσαρμογή στα δεδομένα $\ln \xi_2$ vs $\ln t$ στην περιοχή $\beta < \beta_0(L)$	47
Διάγραμμα 4.16. Γραμμική προσαρμογή για τον προσδιορισμό του εκθέτη ν του Μήκους Συσχετισμού ξ_3 , στην περιοχή $\beta > \beta_0(L)$	48
Πίνακας 4.4. Εκτιμήσεις για τον κρίσιμο εκθέτη ν από προσαρμογές στα δεδομένα $\ln \xi_3$ vs $\ln t$	48

Διάγραμμα 4.17. Απουσία κατάλληλης περιοχής για προσαρμογή στα δεδομένα $\ln \xi_3$ vs $\ln t$ στην περιοχή $\beta < \beta_0(L)$	49
Διάγραμμα 4.18. Εκτιμήσεις του εκθέτη η από πολλαπλές προσαρμογές στην sscf για σύστημα με $L=1600$, $\beta=0.4404$	50
Διάγραμμα 4.19. FSS στη Μαγνήτιση στην Κρίσιμη Θερμοκρασία.	52
Διάγραμμα 4.20. FSS στη Μαγνητική Επιδεκτικότητα στην Κρίσιμη Θερμοκρασία.	53
Διάγραμμα 4.21. FSS στο Μήκος Συσχετισμού ξ_{fit} στην Κρίσιμη Θερμοκρασία.	54
Διάγραμμα 4.22. FSS στο Μήκος Συσχετισμού ξ_2 στην Κρίσιμη Θερμοκρασία.	54
Διάγραμμα 4.23. FSS στο Μήκος Συσχετισμού ξ_3 στην Κρίσιμη Θερμοκρασία.	55
Πίνακας 4.5. Εκτιμήσεις για τον κρίσιμο εκθέτη ν , από διενέργεια FSS στο Μήκος Συσχετισμού για τους τρεις ορισμούς του.	55
Διάγραμμα 4.24. Συνάρτηση Κλιμάκωσης $\tilde{m}_0(t)$ για τη Μαγνήτιση, όπως την αποτυπώνουν οι συμπίπτουσες καμπύλες κλιμακούμενης Μαγνήτισης.	56
Διάγραμμα 4.25. Συνάρτηση Κλιμάκωσης $\tilde{\chi}_0(t)$ για τη Μαγνητική Επιδεκτικότητα.....	57
Διάγραμμα 4.26. Συνάρτηση Κλιμάκωσης $\tilde{\xi}_{fit}(t)$ για τη Μήκος Συσχετισμού ξ_{fit}	58
Διάγραμμα 4.27. Συνάρτηση Κλιμάκωσης $\tilde{\xi}_2(t)$ για τη Μήκος Συσχετισμού ξ_2	58
Διάγραμμα 4.28. Συνάρτηση Κλιμάκωσης $\tilde{\xi}_3(t)$ για τη Μήκος Συσχετισμού ξ_3	59
Πίνακας 4.6. Εκτιμήσεις κρίσιμου εκθέτη ν και εκθέτη α' μέλους της (24), ως βέλτιστες τιμές για τη σύμπτωση των καμπυλών κλιμακούμενου Μήκος Συσχετισμού.	59
Διάγραμμα 4.29. Συνάρτηση Κλιμάκωσης $\tilde{G}_0(r)$ για τη Συνάρτηση Συσχετισμού, όπως την αποτυπώνουν οι συμπίπτουσες καμπύλες κλιμακούμενου Συσχετισμού.	60