



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ  
ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ

Μελέτη της μετάβασης φάσης 1ης τάξης του μοντέλου q-state Potts  
με την πολυκανονική μέθοδο

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

του

Ηλία Νικολακόπουλου

Επιβλέπων: Κωνσταντίνος Αναγνωστόπουλος  
Επ. Καθηγητής

Αθήνα, Ιούλιος 2010

# Περιεχόμενα

Πρόλογος . . . . .	5
<b>1 Μέθοδος Monte Carlo στη Στατιστική Φυσική</b>	<b>7</b>
1.1 Στοιχεία στατιστικής φυσικής . . . . .	7
1.1.1 Στατιστικό βάρος μακροκατάστασης . . . . .	7
1.1.2 Ισορροπία μονωμένου συστήματος . . . . .	8
1.1.3 Ισορροπία συστήματος σε δεξαμενή θερμότητας . . . . .	9
1.1.4 Η έννοια της στατιστικής συλλογής (Ensembles) . . . . .	11
1.2 Στοιχεία μεθόδου Monte Carlo . . . . .	12
1.2.1 Δειγματοληψία με κριτήριο σημαντικότητας (Importance sampling) . . . . .	12
1.2.2 Ανάλυση σφαλμάτων σε μια αλυσίδα Markov . . . . .	16
1.3 Το q-state Potts μοντέλο . . . . .	21
<b>2 Τροποποιήσεις και προσθήκες</b>	<b>23</b>
2.1 Η γεννήτρια ψευδοτυχαίων αριθμών RanMar . . . . .	23
2.2 Η γεννήτρια ψευδοτυχαίων αριθμών “πολυτελείας” RanLux . . . . .	24
2.3 Μετρήσεις (απόλυτης) μαγνήτισης . . . . .	26
2.4 Δημιουργία script για εκτέλεση διαδοχικών προσομοιώσεων Monte Carlo. . . . .	31
<b>3 Ενδεικτική χρήση του πακέτου STMC</b>	<b>38</b>
3.1 Το μοντέλο $q=2$ Potts (Ising model) . . . . .	38
3.2 Το $2d$ μοντέλο $q = 4, 10$ Potts . . . . .	41
3.3 Μέτρηση χρόνου αυτοσυσχετισμού . . . . .	42
<b>4 Η πολυκανονική συλλογή</b>	<b>46</b>
4.1 Η ανάγκη για μια νέα προσέγγιση στα βάρη . . . . .	46
4.2 Η πολυκανονική μέθοδος . . . . .	47
4.2.1 Αναδρομή για τα βάρη . . . . .	52
4.3 Εφαρμογές στις μεταβάσεις φάσης 1ης τάξης . . . . .	56
4.3.1 Βρόχοι υστέρησης σε προσομοίωση Monte Carlo . . . . .	56
4.3.2 Αναζύγιση στην κανονική συλλογή και μετρήσεις ενδιαφερουσών ποσοτήτων . . . . .	57
4.3.3 Μέτρηση επιφανειακής τάσης . . . . .	65
<b>Επίλογος</b> . . . . .	68
<b>A’ Fortran</b>	<b>69</b>

<b>Β' Οδηγός χρήσης του πακέτου STMC</b>	<b>71</b>
Β'.1 Βασικά χαρακτηριστικά του STMC . . . . .	71
Β'.2 Οδηγός αναπαραγωγής αποτελεσμάτων . . . . .	71
Β'.2.1 Κεφάλαιο 3 . . . . .	72
Β'.2.2 Κεφάλαιο 4 . . . . .	73
<b>Βιβλιογραφία</b>	<b>77</b>

# Κατάλογος Σχημάτων

3.1	Χρονοσειρές $e_{0s}$ , sequential updating σε $L = 80^2$ , $\beta = 0.4$ . . . . .	39
3.2	Χρονοσειρές $e_{0s}$ , random updating σε $L = 80^2$ , $\beta = 0.4$ . . . . .	40
3.3	Χρονοσειρά απόλυτης μαγνήτισης ανά spin. $2d$ Ising, $\beta = 0.4$ , $L = 20^2$ . . . . .	41
3.4	Συνάρτηση αυτοσυσχετισμού χρονοσειράς Metropolis και χρονοσειρά τυχαίων γκαουσιανών αριθμών . . . . .	43
3.5	Ολοκληρωμένος χρόνος αυτοσυσχετισμού διαδικασίας Metropolis για διαφορετικό πλήθος δεδομένων. . . . .	44
3.6	$\tau_{int}$ στο $2d$ Ising για sequential και random updating. $\beta = 0.4$ , $L = 20^2$ . . . . .	45
4.1	$P_L(\beta_t, E)$ στο $2d$ 10-state Potts και 20-state Potts . . . . .	47
4.2	$P_L(\beta_t, e/s)$ στο $2d$ 4-state Potts. . . . .	48
4.3	$\ln P_L(\beta_t, e/s)$ στο $2d$ 10-state Potts . . . . .	49
4.4	$3d$ 3-state Potts $L = 24^3$ , $\beta_t^{ps} = 0.275229525$ . . . . .	50
4.5	Ιστόγραμμα για το $2d$ $q = 10$ Potts σε πλέγμα $70 \times 70$ . . . . .	51
4.6	Βρόχος υστέρησης γύρω από τη $\beta_c = 0.7130312$ στο $2d$ $q = 10$ Potts $L = 20^2$ . . . . .	58
4.7	Βρόχος υστέρησης γύρω από τη $\beta_c = 0.5493061$ στο $2d$ $q = 4$ Potts $L = 40^2$ . . . . .	59
4.8	Πολυκανονικό ιστόγραμμα δράσης και αναζυγισμένο σε $\beta_c^{ps} = 0.71$ . $2d$ $q = 10$ Potts, $L = 20^2$ . . . . .	61
4.9	$P(M)$ στο Ising από κανονική προσομοίωση και πολυκανονική αναζύγιση. . . . .	62
4.10	Πολυκανονικό ιστόγραμμα της ενέργειας ανά spin και αναζυγισμένα σε $\beta = 0$ , $\beta = 0.2$ , $\beta = 0.4$ . Ising, $L = 20^2$ . . . . .	63
4.11	Δράση, ειδική Θερμότητα, ελεύθερη ενέργεια και εντροπία στο $2d$ Ising. $L = 20^2$ . . . . .	64
4.12	Δράση, ειδική Θερμότητα, ελεύθερη ενέργεια και εντροπία στο $2d$ $q = 10$ Potts. $L = 20^2$ . . . . .	65
4.13	Καταστάσεις καθαρής και μικτής φάσης. . . . .	65
4.14	Ελεύθερη ενέργεια στο $q = 10$ και $q = 20$ Potts . . . . .	66
4.15	Επιφανειακή τάση στο $q = 10$ Potts . . . . .	67

## Πρόλογος

Η μέθοδος Monte Carlo αποτελεί την μεγαλύτερη και σημαντικότερη κλάση αριθμητικών μεθόδων με σκοπό την αντιμετώπιση προβλημάτων στη στατιστική φυσική. το όνομα Monte Carlo είναι σχετικά πρόσφατο και χρησιμοποιήθηκε για πρώτη φορά από τον Nicolas Metropolis το 1949. Η μέθοδος αποτελεί απόγονο της μεθόδου Στατιστικής Δειγματοληψίας που εμφανίζεται από τις αρχές του 19ου αιώνα και αρχικά επρόκειτο για μια μέθοδο εκτίμησης της τιμής ολοκληρωμάτων.

Η βασική ιδέα πίσω από τη συνήθως χρησιμοποιούμενη γκάμα μεθόδων αυτής της κλάσης στη Στατιστική Φυσική είναι να καταστήσουν εφικτή τη μελέτη συστημάτων με πολλούς βαθμούς ελευθερίας. Η μελέτη τέτοιων συστημάτων μπορεί να γίνει είτε ενώ εκείνα βρίσκονται σε ισορροπία, είτε και εκτός ισορροπίας και μπορεί να μπορεί να αντιστοιχεί σε φυσικό χρόνο ή σε κάποιον άλλο χαρακτηριστικό χρόνο της μεθόδου (π.χ, όπως θα δείτε παρακάτω, 1 sweep). Τέτοια φυσικά συστήματα μπορεί να βρεθούν ανά πάσα στιγμή σε ένα τεράστιο πλήθος καταστάσεων οι οποίες βέβαια στον... πραγματικό κόσμο, μεταβάλλονται ταχύτατα και απρόβλεπτα. Αυτό που πετυχαίνει κανείς με τη μέθοδο Monte Carlo είναι να διαλέξει ένα αντιπροσωπευτικό δείγμα των καταστάσεων αυτών, μιας και η συνολική τους θεώρηση είναι αδύνατη, και να το χρησιμοποιήσει για την διενέργεια μετρήσεων ενδιαφερουσών ποσοτήτων. Το αποτέλεσμα που θα λάβει θα είναι η αναμενόμενη τιμή της ποσότητας με κάποιο στατιστικό σφάλμα βέβαια λόγω της δειγματοληψίας. Λεπτομέρειες της μεθόδου παρουσιάζονται στο κεφάλαιο 1.

Στην παρούσα εργασία θα ασχοληθούμε με τη μελέτη ενός από τα πιο δημοφιλή μοντέλα, του  $q - state$  Potts το οποίο έχει πάρει το όνομα του ανθρώπου που το εισήγαγε (R.B Potts). Το μοντέλο αυτό στη γενική του μορφή χρησιμοποιείται σε διαφορετικούς κλάδους της θεωρητικής φυσικής και, παρά την απλότητά του στον ορισμό, επιτρέπει την εξαγωγή αντιπροσωπευτικών συμπερασμάτων για μεγάλη ποικιλία προβλημάτων. Εμείς θα το εφαρμόσουμε στη μελέτη μεταβάσεων 1ης τάξης όπως αυτή κάνει την εμφάνισή της για ορισμένες εκδοχές του. Θα παρουσιαστούν επίσης και εφαρμογές για την ειδική περίπτωση  $q = 2$  Potts στην οποία ανάγεται στο ακόμα πιο δημοφιλές μοντέλο Ising, που αποτελεί και το πιο απλό παράδειγμα εφαρμογής του Monte Carlo χωρίς να στερείται βέβαια καθόλου φυσικού περιεχομένου.

Σε μια μετάβαση φάσης 1ης τάξης ένα σύστημα έχει δύο προτιμώμενες περιοχές καταστάσεων, γύρω από δύο αντίστοιχες τιμές ενέργειας. Η μετάβαση μεταξύ των δύο αυτών περιοχών γίνεται σπάνια και στο θερμοδυναμικό όριο η πιθανότητα κάτι τέτοιο να συμβεί γίνεται ελάχιστη. Αυτή η συμπεριφορά είναι ανεπιθύμητη (πέραν της συνειδητοποίησης ότι το σύστημα εμφανίζει τη μετάβαση) και δημιουργεί προβλήματα στην ακρίβεια των μετρήσεων ενδιαφερουσών ποσοτήτων καθώς οι καταστάσεις του συστήματος που αντιστοιχούν στις μεταβατικές ενέργειες καταπιέζονται εκθετικά. Επομένως αν θέλει κάποιος να μετρήσει ποσότητες όπως η επιφανειακή τάση που μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τη μελέτη της μετάβασης, θα πρέπει

να αντιμετωπίσει αυτή την καταπίεση.

Στο κεφάλαιο 4 παρουσιάζεται η Πολυκανονική Μέθοδος που επιστρατεύεται για τον παραπάνω σκοπό. Η πολυκανονική μέθοδος ανήκει στην κλάση μεθόδων Umbrella Sampling με παραπλήσιες μεθόδους που παρακάμπτουν ανεπιθύμητες καταστάσεις όπως η παραπάνω. Όπως αναλύεται διεξοδικά η λειτουργία της έγκειται στην ενίσχυση των μεταβατικών καταστάσεων έτσι ώστε να είναι αρκετά προσβάσιμες (περίπου όσο και οι υπόλοιπες). Η εξασφάλιση της ομοιόμορφης στατιστικής που επιτυγχάνεται με τον τρόπο αυτό επιτρέπει αξιόπιστη μέτρηση ποσοτήτων όπως η επιφανειακή τάση, η ελεύθερη ενέργεια (που συνδέεται με την προηγούμενη) και η εντροπία.

Για τη διενέργεια των προσομοιώσεων χρησιμοποιείται ο συνοδευτικός κώδικας σε Fortran του συγγράματος [4], οποίος αναφέρεται στο κείμενο ως Πακέτο STMC. Στο Παραρτήμα Β' στο τέλος της εργασίας παρατίθεται βήμα προς βήμα η διαδικασία αναπαραγωγής των σχημάτων όπως αυτή έγινε για την κατασκευή τους και στο Α' κάποια σχόλια πάνω στην επιλογή της Fortran ως κατάλληλης για υπολογιστικούς και μη σκοπούς.

Θα ήθελα τέλος να ευχαριστήσω ιδιαίτερος τον Επίκουρο Καθηγητή κ. Κωνσταντίνο Αναγνωστόπουλο για τη βοήθεια που μου προσέφερε κατά τη διάρκεια πραγματοποίησης της διπλωματικής. Οι παρατηρήσεις του πάνω σε προγραμματιστικά θέματα αλλά κυρίως πάνω στη συμπεριφορά των υπό μελέτη μοντέλων διευκόλυναν σημαντικά τη διαισθητική σύλληψη των εννοιών και κατεύθυναν την προσοχή μου στην ουσία των προβλημάτων.

# Κεφάλαιο 1

## Μέθοδος Monte Carlo στη Στατιστική Φυσική

### 1.1 Στοιχεία στατιστικής φυσικής

Στο πρώτο μέρος του παρόντος κεφαλαίου γίνεται μια πρώτη εισαγωγή σε θεμελιώδεις έννοιες της στατιστικής φυσικής οι οποίες παρουσιάζονται πολύ αναλυτικότερα στο [13]. Οι έννοιες αυτές είναι το μόνο προαπαιτούμενο για να συνεχίσει κανείς στο δεύτερο μέρος όπου και παρουσιάζεται η μέθοδος Monte Carlo όπως αυτή εφαρμόζεται στη στατιστική φυσική συστημάτων σε θερμική ισορροπία.

#### 1.1.1 Στατιστικό βάρος μακροκατάστασης

Θα παρουσιάσουμε σύντομα τη σχέση μεταξύ μακροσκοπικών και μικροσκοπικών καταστάσεων σε ένα στατιστικό σύστημα, δηλαδή των **μακροκαταστάσεων** και των **μικροκαταστάσεων** αντίστοιχα.

Σε ένα στατιστικό σύστημα που αποτελείται από έναν αριθμό  $N$  στοιχείων (ηλεκτρονίων, ατόμων, μορίων κτλ.) μια μακροκατάστασή του προσδιορίζεται από ορισμένα μακροσκοπικά μεγέθη. Ανάλογα με τους περιορισμούς που επιβάλλονται στο σύστημα κάποια από αυτά παραμένουν σταθερά και κάποια όχι. Για ένα μονωμένο σύστημα αερίου σε ισορροπία λόγου χάρη, η ενέργεια  $E$ , ο όγκος  $V$  και το  $N$  έχουν σταθερή τιμή. Σε καταστάσεις εκτός ισορροπίας χρειαζόμαστε επιπλέον μεταβλητές (όπως η πυκνότητα του αερίου  $\rho(\vec{r}, t)$ ) που θα συμβολίζουμε με  $\alpha$ . Μια μακροκατάσταση επομένως περιγράφεται ως  $(E, V, N, \alpha)$ . Από την άλλη, για να περιγράψουμε μια μικροκατάσταση ακριβώς, θα έπρεπε να γνωρίζουμε τη θέση και την ορμή κάθε σωματιδίου του συστήματος ( $\sim 10^{23}$  παράμετροι). Γνωρίζουμε όμως ότι αν τοποθετήσουμε ένα σύστημα μέσα σε ένα κουτί πεπερασμένου μεγέθους (κάτι το οποίο σημαίνει την κβάντωσή του μιας και η δ.ε Schroedinger που προσδιορίζει τις καταστάσεις του συστήματος υπόκειται σε καλά φιξαρισμένες οριακές συνθήκες) οι καταστάσεις διακριτοποιούνται. Για το λόγο αυτό από δω και πέρα θεωρούμε διακριτές μικροκαταστάσεις και δεχόμαστε την παραδοχή του Planck

*Κάθε μακροκατάσταση συστήματος περιλαμβάνει έναν πλήρως καθορισμένο αριθμό μικροκαταστάσεων του συστήματος.*

Συμβολίζουμε επίσης με

$$\Omega(E, V, N, \alpha)$$

τον αριθμό μικροκαταστάσεων που αντιστοιχούν σε μακροκατάσταση  $(E \pm \delta E, V, N, \alpha)$ . Η ποσότητα αυτή ονομάζεται **στατιστικό βάρος** της μακροκατάστασης και συμβαίνει να αποτελεί ένα **μέτρο αταξίας** του συστήματος.

### 1.1.2 Ισορροπία μονωμένου συστήματος

Θεωρούμε μονωμένο σύστημα και θα αναζητήσουμε μια συνθήκη ισορροπίας για αυτό. Όπως είπαμε το σύστημα χαρακτηρίζεται από τις μεταβλητές  $E, V, N$  όταν βρίσκεται σε ισορροπία ενώ σε διαφορετική περίπτωση και από τις  $\alpha$ . Για κάθε  $\alpha$  αντιστοιχεί στη μακροκατάσταση ένα στατιστικό βάρος  $\Omega(E, V, N, \alpha)$  και με την πάροδο του χρόνου το σύστημα περνάει από τις διάφορες μικροκαταστάσεις που συμβιβάζονται με τις καθορισμένες τιμές των  $E, V, N$ .

Εισάγουμε δύο θεμελιώδη αξιώματα

1. Σε μονωμένο σύστημα όλες οι μικροκαταστάσεις που είναι συμβιβαστές με τους επιβαλλόμενους περιορισμούς είναι εξίσου πιθανές.
2. Η ισορροπία αντιστοιχεί στην τιμή του  $\alpha$  για την οποία το  $\Omega(E, V, N, \alpha)$  γίνεται μέγιστο, με τα  $E, V, N$  σταθερά.

Τα αξιώματα αυτά έχουν σημαντικότερα αποτελέσματα. Από το πρώτο μπορεί να συναχθεί άμεσα για την πιθανότητα να βρεθεί το σύστημα στη μακροκατάσταση  $(E, V, N, \alpha)$  ότι

$$P(E, V, N, \alpha) \propto \Omega(E, V, N, \alpha)$$

αποτέλεσμα το οποίο σε συνδυασμό με το δεύτερο από τα αξιώματα μας λέει ότι η ισορροπία είναι η κατάσταση μέγιστης πιθανότητας, αντιστοιχεί δηλαδή στο μέγιστο στατιστικό βάρος. Ορίζεται έτσι η **εντροπία** συστήματος στη μακροκατάσταση  $(E, V, N, \alpha)$

$$S(E, V, N, \alpha) = k_B \ln \Omega(E, V, N, \alpha) \quad (1.1)$$

και η μεγάλη σημασία της έγκειται στο γεγονός ότι συνδέει μια μακροσκοπική μετρήσιμη ποσότητα του συστήματος, την εντροπία, με τη μικροσκοπική έννοια του στατιστικού βάρους. Επιπλέον, η εισαγωγή της εξυπηρετεί καθώς αποτελεί **εκτατική** μεταβλητή (βλ. λίγο παρακάτω), εξαρτάται δηλαδή από το μέγεθος του συστήματος και κατά συνέπεια συνδέεται άμεσα με πειραματικά μετρήσιμα μεγέθη που προφανώς εξαρτώνται επίσης από το μέγεθος του συστήματος. Βάσει της τελευταίας σχέσης, τα αξιώματα που εισάγαμε προηγουμένως διατυπώνονται κατάλληλα στην **αρχή της εντροπίας του Clausius**

*Κατά τη διάρκεια πραγματικών διεργασιών η εντροπία μονωμένου συστήματος πάντοτε αυξάνει και στην κατάσταση ισορροπίας παίρνει μέγιστη τιμή.*

Επιστρέφουμε τώρα στο μονωμένο υποσύστημα που αποτελείται από τα υποσυστήματα 1 και 2 με  $E_1, V_1, N_1$  και  $E_2, V_2, N_2$  αντίστοιχα, τ.ώ

$$E_1 + E_2 = E, \quad V_1 + V_2 = V, \quad N_1 + N_2 = N \quad (1.2)$$

και επιτρέπουμε μια πολύ ασθενή ενεργειακή αλληλεπίδραση. Για κάθε δυνατό καταμερισμό των μεταβλητών αυτών μεταξύ των δύο υποσυστημάτων θα έχουμε λοιπόν

$$\Omega(E, V, N, E_1, V_1, N_1) = \Omega(E_1, V_1, N_1) \Omega(E_2, V_2, N_2)$$

Λόγω της 1.1, η τελευταία εξίσωση γράφεται συναρτήσει της εντροπίας

$$S(E, V, N, E_1, V_1, N_1) = S(E_1, V_1, N_1) + S(E_2, V_2, N_2)$$

που είναι μια εξίσωση της μορφής 1.2 και εκφράζει την προσθετικότητα του μεγέθους αυτού (εκτατική μεταβλητή).



Δεχόμενοι τώρα διαφορετικά ήδη επαφής μεταξύ των δύο υποσυστημάτων, θα δούμε ότι το αξίωμα ισορροπίας που παρουσιάστηκε είναι αρκετά ισχυρό ώστε να μας δώσει γενικούς ορισμούς για τη θερμοκρασία και την πίεση.

Για **διαθερμικό χώρισμα**, η αρχή αύξησης της εντροπίας δίνει

$$\left(\frac{\partial S}{\partial E_1}\right)_{E,V,N,V_1,N_1} = \left(\frac{\partial S_1}{\partial E_1}\right)_{V_1,N_1} + \left(\frac{\partial S_2}{\partial E_2}\right)_{V_2,N_2} \frac{dE_2}{dE_1} = 0$$

και αφού  $dE_1 = -dE_2$

$$\left(\frac{\partial S_1}{\partial E_1}\right)_{V_1,N_1} = \left(\frac{\partial S_2}{\partial E_2}\right)_{V_2,N_2}$$

Η σχέση αυτή αποτελεί επομένως συνθήκη θερμικής ισορροπίας και καταδεικνύει ως μέτρο της θερμοκρασίας του κάθε υποσυστήματος, τον αντίστοιχο όρο  $\frac{\partial S}{\partial E}$ . Ορίζουμε έτσι την **απόλυτη θερμοκρασία**  $T_i$ ,  $i = 1, 2$ , του  $i$ -συστήματος

$$\left(\frac{\partial S_i}{\partial E_i}\right)_{V_i,N_i} = \frac{1}{T_i} \quad (1.3)$$

Ακολούθως θεωρούμε **κινητό διαθερμικό χώρισμα** και έτσι μόνο τα  $N_i$  παραμένουν πάντα σταθερά. Στην ισορροπία θα επέλθει εξισορρόπηση των θερμοκρασιών και των πιέσεων. Επιλέγουμε τις  $E_1, V_1$  ως ανεξάρτητες μεταβλητές και μεγιστοποιούμε όπως πριν την εντροπία ως προς αυτές

$$\left(\frac{\partial S}{\partial E_1}\right)_{E,V,N,N_1} = 0, \quad \left(\frac{\partial S}{\partial V_1}\right)_{E,V,N,N_1} = 0$$

και παίρνουμε

$$\left(\frac{\partial S_1}{\partial V_1}\right)_{E_1,N_1} = \left(\frac{\partial S_2}{\partial V_2}\right)_{E_2,N_2}$$

που θα πρέπει να αποδίδει ίσες πιέσεις στα δύο υποσυστήματα. Ορίζουμε επομένως συμβατά με την απαίτηση αυτή την **πίεση** υποσυστήματος

$$P_i = T_i \left(\frac{\partial S_i}{\partial V_i}\right)_{E_i,N_i} \quad (1.4)$$

Τέλος, μπορούμε να θεωρήσουμε πορώδες τοίχωμα που αφήνει σταθερό πάντα μόνο τον όγκο των δύο υποσυστημάτων. Με την ίδια διαδικασία με πριν παίρνουμε τη συνθήκη

$$\left(\frac{\partial S_1}{\partial N_1}\right)_{E_1,V_1} = \left(\frac{\partial S_2}{\partial N_2}\right)_{E_2,V_2}$$

που εμφανίζεται σε περιπτώσεις μελέτης συστημάτων με διάφορες φάσεις, στις οποίες μεταφέρονται σωματίδια από τη μία φάση στην άλλη (αν βέβαια κάθε φάση θεωρηθεί σαν υποσύστημα).

### 1.1.3 Ισορροπία συστήματος σε δεξαμενή θερμότητας

Θεωρούμε ότι έχουμε ένα σύνθετο σύστημα που αποτελείται από δύο υποσυστήματα: το σύστημα που μας ενδιαφέρει και το πολύ μεγαλύτερο σύστημα που παίζει το ρόλο της δεξαμενής θερμότητας (heatbath). Η δεξαμενή θερμότητας είναι αρκετά μεγάλη ώστε η θερμοκρασία της να παραμένει σταθερή και υποθέτουμε επίσης ότι ο όγκος και ο αριθμός σωματιδίων του

συστήματος παραμένουν σταθερά. Η μόνη αλληλεπίδραση που επιτρέπουμε λοιπόν είναι η ανταλλαγή ενέργειας μεταξύ των δύο συστημάτων.

Ταυτοποιούμε τις μικροκαταστάσεις του συστήματός μας με το δείκτη  $k = 1, 2, \dots$  και τις αντίστοιχες ενέργειες του συστήματος με  $E_k$ . Επειδή όμως πολλές διαφορετικές μικροκαταστάσεις αντιστοιχούν στην ίδια ενέργεια, η τελευταία δεν αποτελεί χαρακτηριστική τους ιδιότητα. Έστω ότι το σύστημα περνάει από μια σειρά μικροκαταστάσεων με ενέργειες (που δεν εμφανίζονται απαραίτητα μια φορά στην ακολουθία):

$$E_1 \leq E_2 \leq \dots \leq E_k \leq \dots$$

και ας διαλέξουμε ένα διάστημα  $\delta E$  αρκούντως μικρό ώστε μόνο μία από τις παραπάνω ενέργειες να ανήκει σε αυτό. Βάσει των όσων αναφέρθηκαν στην ισορροπία μονωμένου συστήματος - και αφού ως τέτοιο μπορούμε να αντιμετωπίσουμε το σύνθετο σύστημα της παρούσας περίπτωσης - η πιθανότητα να βρεθεί το σύστημά μας στη μικροκατάσταση ( $k$ ) ενεργείας  $E_k$  είναι ανάλογη του πλήθους των μικροκαταστάσεων της δεξαμενής θερμότητας που συμβαδίζουν με αυτήν, αφού η συνολική ενέργεια είναι σταθερή  $E_0$ . Η δεξαμενή θερμότητας βρίσκεται επομένως σε μικροκατάσταση ενέργειας

$$(E_0 - E_k, E_0 - E_k + \delta E)$$

και μιας και υπάρχουν  $\Omega_2(E_0 - E_k)$  τέτοιες, θα ισχύει

$$p_k = c \cdot \Omega_2(E_0 - E_k)$$

όπου η  $c$  είναι σταθερά κανονικοποίησης, ο δείκτης 2 δείχνει ότι μιλάμε για το δεύτερο υποσύστημα - τη δεξαμενή - και έχουμε τέλος αγνοήσει την εξάρτηση του στατιστικού βάρους από τις υπόλοιπες σταθερές ποσότητες. Για τη  $c$ , επιβάλλοντας κανονικοποίηση έχουμε

$$p_k = \frac{\Omega_2(E_0 - E_k)}{\sum_k \Omega_2(E_0 - E_k)}$$

Κάνοντας χρήση του ορισμού της εντροπίας 1.1 για τη δεξαμενή θερμότητας παίρνουμε λοιπόν

$$p_k = c \cdot e^{S_2(E_0 - E_k)/k_B} \tag{1.5}$$

Μέχρι τώρα αντιμετωπίσαμε τα δύο υποσυστήματα ισοδύναμα, αγνοώντας τις ιδιότητες του δεύτερου ως δεξαμενής θερμότητας. Θα πρέπει επομένως να λάβουμε υπόψιν και το τελευταίο επιχείρημα, που μεταφράζεται

$$E_k \ll E_0$$

και ισχύει για όλες τις μικροκαταστάσεις που έχουν λογική πιθανότητα να συμβούν όσο τα δύο υποσυστήματα είναι επαφή. Επομένως οι διακυμάνσεις της ενέργειας επηρεάζουν με αμελητέο τρόπο τη θερμοκρασία της δεξαμενής και έτσι μπορεί να θεωρηθεί σταθερή. Αναπτύσσοντας κατά Taylor την  $S_2$  έχουμε

$$\frac{1}{k_B} S_2(E_0 - E_k) = \frac{1}{k_B} S_2(E_0) - \frac{E_k}{k_B} \frac{\partial S_2(E_0)}{\partial E_0} + \frac{1}{2} \frac{E_k^2}{k_B} \frac{\partial^2 S_2(E_0)}{\partial E_0^2} + \dots$$

και δεδομένου ότι από την ισορροπία μονωμένου συστήματος έχουμε

$$\frac{\partial S_2(E_0)}{\partial E_0} = \frac{1}{T}$$

όπου  $T$  η θερμοκρασία της δεξαμενής, κρατώντας μόνο το γραμμικό όρο του  $E_k$  προκύπτει

$$\frac{1}{k_B} S_2(E_0 - E_k) = \frac{1}{k_B} S_2(E_0) - \beta \cdot E_k$$

όπου μόλις εισάγαμε την **παράμετρο θερμοκρασίας**

$$\beta \equiv \frac{1}{k_B T} .$$

Βάσει των τελευταίων δύο σχέσεων και της 1.5 έπεται η περίφημη **κατανομή Boltzmann**

$$p_k = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_k} \quad (1.6)$$

με σταθερά κανονικοποίησης  $Z^{-1}$  όπου  $Z$  η **συνάρτηση επιμερισμού** του συστήματος

$$Z = \sum_k e^{-\beta E_k} . \quad (1.7)$$

Η κατανομή αυτή μας δίνει την πιθανότητα να βρεθεί ένα σύστημα στην μικροκατάσταση ( $k$ ) όταν τοποθετηθεί σε δεξαμενή θερμότητας με παράμετρο θερμοκρασίας  $\beta = 1/k_B T$ . Όσον αφορά τη συνάρτηση επιμερισμού, αυτή παίζει κεντρικό ρόλο στη μελέτη συστημάτων καθορισμένης θερμοκρασίας και ο υπολογισμός της με προσομοιώσεις Monte Carlo είναι ένα πρόβλημα το οποίο ξεπερνάται με τη χρήση της πολυκανονικής μεθόδου που παρουσιάζεται παρακάτω στην εργασία.

Με κατάλληλη ομαδοποίηση των όρων βάσει ενέργειας η  $Z$  εκφράζεται ως

$$Z = \sum_{E_k} n(E_k) e^{-\beta E_k}$$

όπου εισάγαμε επίσης τη συνάρτηση  $n(E)$  που μας δίνει το πλήθος μικροκαταστάσεων που αντιστοιχούν στη συγκεκριμένη ενέργεια. Τότε η κατανομή Boltzmannγράφεται

$$p(E_k) = \frac{1}{Z} n(E_k) e^{-\beta E_k}$$

και εκφράζει την πιθανότητα να βρεθεί ένα σύστημα σε μικροκατάσταση ενέργειας  $E_k$ .

#### 1.1.4 Η έννοια της στατιστικής συλλογής (Ensembles)

Η έννοια της στατιστικής ή θερμοδυναμικής συλλογής εισήχθη στο χώρο της στατιστικής φυσικής το 1878 από τον Josiah Willard Gibbs. Αποτελεί ένα **νοητό σύνολο πανομοιότυπων συστημάτων** που αντικατοπτρίζουν μακροκαταστάσεις στις οποίες μπορεί να βρίσκεται το σύστημα που μας ενδιαφέρει. Πρόκειται λοιπόν για μια **στατική** δομή την οποία αντιμετωπίζουμε συνολικά σαν στιγμιότυπο (όπως θα δούμε στην επόμενη παράγραφο σε μια προσομοίωση Monte Carlo δε μπορεί να αντιμετωπιστεί έτσι και καταφεύγουμε σε μια διαδικασία Markov). Από φυσικής πλευράς, η ιδέα της συλλογής επιχειρεί να τυποποιήσει το εξής γεγονός: κατά τη διάρκεια ενός πειράματος, οι μετρήσεις που λαμβάνονται - μακροσκοπικών ποσοτήτων βέβαια - παρουσιάζουν κάποια σχετική διακύμανση μιας και δε μπορεί να υπάρξει έλεγχος των μικροσκοπικών χαρακτηριστικών του συστήματος. Το μόνο που βλέπει επομένως κανείς είναι μια σειρά μετρήσεων που χαρακτηρίζουν διαφορετικές μακροκαταστάσεις.

Κάθε στοιχείο της συλλογής είναι το σύστημά μας σε κάποια από αυτές τις μακροκαταστάσεις.

Το μέγεθος μιας συλλογής μπορεί να είναι οσοδήποτε μεγάλο και στο άπειρο όριο μπορεί να περιλαμβάνει όλα τα στιγμιότυπα του συστήματος ενώ εκείνο βρίσκεται σε κάθε μικροκατάσταση. Σε αρκετές φυσικά ενδιαφέρουσες περιπτώσεις όμως, όπως αυτές που θα εξετάσουμε, κάτι τέτοιο δεν είναι απαραίτητο και ένα αντιπροσωπευτικό μέρος της συλλογής μας αρκεί. Αυτό συμβαίνει γιατί μια μέση τιμή ενός μεγέθους πάνω στη συλλογή επηρεάζεται ουσιαστικά από τα συστήματα που βρίσκονται πολύ κοντά στη μέση τιμή: τα υπόλοιπα θα προκαλέσουν μόνο μια διαχύμανση την οποία ούτως ή άλλως δε μπορούμε να αποφύγουμε αφού δε θα έχουμε ποτέ σε μια προσομοίωση άπειρη συλλογή. Μόλις αναφέρθηκε και το σημείο κλειδί στη χρησιμότητα μιας στατιστικής συλλογής:

*ο υπολογισμός της μέσης τιμής ενός μεγέθους πάνω σε όλα τα συστήματα που τη διέπουν (ή τουλάχιστον σε ένα αρκούντως αντιπροσωπευτικό δείγμα), είναι ισοδύναμος με τη διαδικασία της μέτρησης κατά τη διενέργεια του αντίστοιχου πειράματος.*

Θα αναφερθούμε στη συνέχεια στις βασικές συλλογές της στατιστικής φυσικής. Μπορείτε επίσης να βρείτε πιο αναλυτική παρουσίαση στο MIT OpenCourseWare [22].

### Μικροκανονική συλλογή (Microcanonical Ensemble)

Μικροκανονική συλλογή ( $NVE$ ) ονομάζεται η συλλογή που αποτελείται από μονωμένα συστήματα με την έννοια εκείνων που συζητήθηκαν στην παράγραφο 2.1.2: συστήματα δηλαδή με καθορισμένα  $N, E$ . Αποτελεί το σημείο εκκίνησης για τη στατιστική μηχανική.

### Κανονική συλλογή (Canonical Ensemble)

Κανονική συλλογή, συλλογή Gibbs ή συλλογή Boltzmann ( $NVT$ ) καλείται η συλλογή που αποτελείται από συστήματα που βρίσκονται σε επαφή με πολύ μεγαλύτερη δεξαμενή θερμότητας όπως αυτά που συζητήθηκαν στην παράγραφο 2.1.3: συστήματα δηλαδή με καθορισμένο  $N$ , δεδομένη  $T$  και μεταβλητή  $E$ . Η συλλογή αυτή αποτελεί την κινητήριο δύναμη της στατιστικής μηχανικής.

### Μεγαλοκανονική συλλογή (Grand Canonical Ensemble)

Μεγαλοκανονική συλλογή καλείται η συλλογή από συστήματα τα οποία επίσης βρίσκονται σε επαφή με δεξαμενή θερμότητας και επιπλέον επιτρέπεται και η μεταβολή του αριθμού σωματιδίων. Άρα έχουμε δεδομένα  $T, \mu$  ενώ αφήνονται να μεταβάλλονται τα  $E, N$ . Η συλλογή αυτή γίνεται χρήσιμη σε περιπτώσεις που αλλάζει ο αριθμός των σωματιδίων, όπως λ.χ όταν υπάρχουν διαφορετικές φάσεις στο σύστημα (νερό, ατμός, πάγος).

Μπορούν να οριστούν φυσικά και άλλες συλλογές, όπως η ισόθερμη-ισοβαρής, η ισεντροπική-ισοβαρής ή η ανοιχτή, ανάλογα με τους περιορισμούς που επιβάλλουμε στο σύστημα - δομικό λίθο τους. Η συλλογές που θα μας απασχολήσουν κυρίως στην παρούσα εργασία είναι η κανονική και μια που θα εισάγουμε σε επόμενο κεφάλαιο, η **πολυκανονική**.

## 1.2 Στοιχεία μεθόδου Monte Carlo

### 1.2.1 Δειγματοληψία με κριτήριο σημαντικότητας (Importance sampling)

Για να δειγματοληψήσουμε αποδοτικά στο χώρο των μικροκαταστάσεων θα πρέπει να φροντίσουμε να κινούμαστε σε μια περιοχή σημαντικών για το σύστημα μικροκαταστάσεων. Για

θερμοκρασία  $T = 1/\beta$  οι σημαντικές μικροκαταστάσεις αντιστοιχούν σε τιμές της ενέργειας για τις οποίες η πυκνότητα πιθανότητας  $P_B(E)$  είναι μεγάλη. Χρειαζόμαστε επομένως μια διαδικασία η οποία να παράγει μικροκαταστάσεις με το βάρος Boltzmann τους

$$w_B^{(k)} = e^{-\beta E^{(k)}}$$

Τότε το πλήθος μικροκαταστάσεων  $n(E)$  και τα παραπάνω βάρη συνδυάζονται έτσι ώστε η πιθανότητα να παραχθεί μια μικροκατάσταση ενέργειας  $E$  να είναι ακριβώς

$$P_B = c_B n(E) e^{-\beta E}$$

Η μέθοδος αυτή δειγματοληψίας που επιλέγει την  $(k)$  μικροκατάσταση με πιθανότητα

$$P_B^{(k)} = c_B w_B^{(k)}$$

καλείται *δειγματοληψία με κριτήριο σημαντικότητας* και η σταθερά  $c_B$  αποτελεί βέβαια σταθερά κανονικοποίησης.

Θα χρησιμοποιήσουμε τώρα ένα συγκεκριμένο συμβολισμό για να εξετάσουμε και να αποδείξουμε τις ιδιότητες της διαδικασίας που βρίσκεται στην καρδιά της μεθόδου Monte Carlo και η οποία θα μας κατασκευάσει το στατιστικό δείγμα.

### Διαδικασία Markov

Επειδή δεν είναι δυνατό να παράγουμε μικροκαταστάσεις με την παραπάνω πιθανότητα απ' ευθείας θα χρησιμοποιήσουμε τις αλυσίδες Markov, μια δυναμική διαδικασία που μας πηγαινει από μια κατάσταση  $k_n$  σε μια άλλη  $k_{n+1}$  χωρίς να χρειάζεται καμία πληροφορία για προηγούμενη κατάσταση· λαμβάνουμε λοιπόν στοχαστικά μια *χρονοσειρά μικροκαταστάσεων*. Αυτό που επιχειρούμε να κάνουμε δηλαδή είναι το εξής:

*Θα αντικαταστήσουμε τη μέση τιμή της κανονικής συλλογής με τη μέση τιμή ληφθείσα πάνω σε μια χρονοσειρά μικροκαταστάσεων. Αυτή η χρονοσειρά - η αλυσίδα Markov - ορίζει μια τεχνητή δυναμική πάνω στο σύστημά μας. Έτσι ο υπολογισμός μιας μέσης τιμής για μεγάλους χρόνους (δηλ. μεγάλη αλυσίδα) είναι ισοδύναμος με εκείνον μιας μέσης τιμής πάνω στη συλλογή και προσομοιώνει φυσικά τη διαδικασία της μέτρησης κατά τη διενέργεια ενός αληθινού πειράματος.*

Καλούμε **κατάσταση Boltzmann** το καταστατικό διάνυσμα  $\vec{P}_B = (P_B^{(k)})$  με δείκτη που τρέχει πάνω στις μικροκαταστάσεις. Από μια μικροκατάσταση  $(k)$  υποθέτουμε ότι η πιθανότητα μετάβασης στην  $(\ell)$  σε ένα βήμα είναι

$$W^{(\ell)(k)} = W[k \rightarrow \ell]$$

όπου ο πίνακας μετάβασης

$$W = \left( W^{(\ell)(k)} \right)$$

ορίζει τη διαδικασία Markov και σε αυτόν πρέπει να επιβάλλουμε επομένως ορισμένους περιορισμούς ώστε να εξασφαλίσουμε τη σύγκλιση της διαδικασίας στην κατασκευή του ζητούμενου δείγματος. Απαιτούμε να ικανοποιούνται οι παρακάτω ιδιότητες

1. **Εργοδικότητα** (ergodicity)

$$e^{-\beta E^{(k)}} > 0 \quad \text{και} \quad e^{-\beta E^{(\ell)}} > 0$$

που δηλώνει βασικά ότι υπάρχει ακέραιος  $n > 0$  τ.ώ:  $(W^n)^{(\ell)(k)} > 0$ . Η συνθήκη αυτή εξασφαλίζει ότι από οποιαδήποτε κατάσταση και αν ξεκινήσουμε, η διαδικασία Markov αργά ή γρήγορα μπορεί να φτάσει σε οποιαδήποτε άλλη (αυτό πρέπει να συμβαίνει γιατί η κατανομή Boltzmann δίνει μη μηδενική πιθανότητα σε όλες τις μικροκαταστάσεις). Προσοχή: η συνθήκη εγγυάται ότι υπάρχει *τουλάχιστον ένα* μονοπάτι τη μια κατάσταση στην άλλη, όχι ότι όλες οι πιθανότητες μετάβασης είναι μη μηδενικές.

2. **Κανονικοποίηση** (normalization)

$$\sum_{\ell} W^{(\ell)(k)} = 1$$

που βεβαιώνει ότι η διαδικασία προχωράει από την (k) θα πάμε σίγουρα σε κάποια άλλη (ή ίσως μείνουμε στην ίδια, αν  $\ell = k$ ).

3. **Ισορροπία ή ισοζύγισή** (balance)

$$\sum_k W^{(\ell)(k)} e^{-\beta E^{(k)}} = e^{-\beta E^{(\ell)}}$$

δηλαδή η δράση του τελεστή  $W$  πάνω στην κατάσταση Boltzmann δίνει την κατάσταση πολλαπλασιασμένη επί 1  $\rightarrow$  ιδιοκατάσταση με ιδιοτιμή 1.

Ορίζουμε ως *συλλογή ισορροπίας* (equilibrium ensemble)  $E_{eq}$  της διαδικασίας Markov τη συλλογή εκείνη με κατανομή πιθανότητας  $P_{eq}$  τ.ώ

$$W P_{eq} = P_{eq} \quad , \text{i.e.} : \quad P_{eq}^{(\ell)} = \sum_k W^{(\ell)(k)} P_{eq}^{(k)}$$

η οποία μας φέρνει στο σημείο κλειδί της μεθόδου Monte Carlo. Όπως θα δείξουμε αμέσως

*Μια διαδικασία Markov που ικανοποιεί τις παραπάνω συνθήκες έχει ως μοναδική συλλογή ισορροπίας τη συλλογή Boltzmann.*

Θα ορίσουμε αρχικά την απόσταση μεταξύ δύο συλλογών  $E$  και  $E'$  (**Ensemble**). Η κάθε μια από τις συλλογές αυτές αποτελείται φυσικά από πολλές μικροκαταστάσεις, πάνω στις οποίες έχουμε "καρφισώσει" - εξ' ορισμού της συλλογής - την αντίστοιχη πιθανότητα εμφάνισής τους. Θα συμβολίζουμε με  $P^{(k)}$  την πιθανότητα της (k) στην  $E$  και  $P'^{(k)}$  την πιθανότητά της στη συλλογή  $E'$ . Η απόστασή τους τότε θα είναι

$$\|E - E'\| = \sum_k |P^{(k)} - P'^{(k)}|.$$

Υποθέτουμε τώρα ότι η  $E'$  προήλθε από τη δράση του  $W$  πάνω στην  $E$  και θα συγκρίνουμε την απόσταση των δύο από την κανονική συλλογή. Κάνοντας χρήση της ιδιότητας της ισορροπίας θα πάρουμε

$$\|E' - E_B\| = \sum_k |P'^{(k)} - P_B^{(k)}| = \sum_{\ell} \left| \sum_k W^{(\ell)(k)} (P^{(k)} - P_B^{(k)}) \right|$$

η οποία βάσει της τριγωνικής ανισότητας (για το πρώτο βήμα), της συνθήκης κανονικοποίησης και της ανισότητας  $W^{(\ell)(k)} \geq 0$  (για το δεύτερο), δίνει

$$\|E - E'\| \leq \sum_{\ell} \sum_k \left| W^{(\ell)(k)} (P^{(k)} - P_{\mathcal{B}}^{(k)}) \right| = \sum_k \left| P^{(k)} - P_{\mathcal{B}}^{(k)} \right| = \|E - E_{\mathcal{B}}\|$$

όπου χρησιμοποιήσαμε και το γεγονός ότι  $WP_{\mathcal{B}} = P_{\mathcal{B}}$  (αφού  $P_{eq} \equiv P_{\mathcal{B}}$ ).

Συνοπτικά:

$$\alpha\nu : E' = WE \rightarrow \|E - E'\| \leq \|E - E_{\mathcal{B}}\|$$

Δείξαμε επομένως ότι η κατάσταση Boltzmann είναι ένα σταθερό σημείο της διαδικασίας Markov· μετακινήσαμε την  $E$  κατά  $\|E - E'\|$  και η απόσταση της από την  $E_{\mathcal{B}}$  παρέμεινε ίδια ή ελαττώθηκε! Θα μπορούσε κανείς να υποθέσει επομένως ότι αν εξασφαλιστεί ότι η επαναλαμβανόμενη δράση του  $W$  δεν επιφέρει πάντα την ισότητα στην τελευταία σχέση, η δράση του τελεστή  $W$  (ή πίνακα, αν θεωρήσετε το καταστατικό διάνυσμα υπό μορφή πίνακα στήλης) στην  $E$ , τη “σπρώχνει” προς την κανονική συλλογή.

Θα εξετάσουμε τώρα την προσέγγιση μιας τυχαίας κατάστασης στο σταθερό αυτό σημείο. Λόγω του πεπερασμένου μεγέθους του συστήματος, όχι ο πίνακας μετάβασης  $W$ , αλλά ο  $\mathcal{W} \equiv W^n$ , για κάποιο  $n \in \mathbb{N}$ , θα είναι εργοδικός. Λέγοντας εργοδικός εννοούμε ότι όλα τα στοιχεία του θα είναι  $> 0$  αφού μόνο τότε όλες οι μικροκαταστάσεις θα έχουν μη μηδενική πιθανότητα να μεταβούν σε κάποια άλλη όπως πρέπει. Πιο συγκεκριμένα θα ισχύει

$$1 > w_{min} = \min_{k,\ell} (\mathcal{W}^{(k)(\ell)}) > 0$$

Υποθέτουμε για τις καταστάσεις Boltzmann ότι

$$P' = \mathcal{W}P$$

και θα δείξουμε ότι από αυτό έπεται

$$\|E' - E_{\mathcal{B}}\| \leq (1 - w_{min})\|E - E_{\mathcal{B}}\|.$$

Θέτουμε  $\epsilon = \|E - E_{\mathcal{B}}\|$  (θυμίζοντας ότι τα  $\epsilon$ ,  $E$  δεν παριστάνουν ενέργεια) και ακολούθως αναλύουμε το άθροισμα της απόστασης  $\|E - E_{\mathcal{B}}\|$  σε όρους θετικής και αρνητικής συνεισφοράς στην απόλυτη τιμή:

$$P^{(k)} - P_{\mathcal{B}}^{(k)} > 0 \text{ και } P^{(k)} - P_{\mathcal{B}}^{(k)} < 0$$

οπότε

$$\epsilon = \|E - E_{\mathcal{B}}\| = \sum_{k \in K^+} (P^{(k)} - P_{\mathcal{B}}^{(k)}) + \sum_{k \in K^-} (P_{\mathcal{B}}^{(k)} - P^{(k)})$$

και λόγω της συνθήκης κανονικοποίησης για τις δύο συλλογές

$$\sum_k P^{(k)} = \sum_k P_{\mathcal{B}}^{(k)} = 1$$

θα ισχύει

$$\sum_{k \in K^+} (P^{(k)} - P_{\mathcal{B}}^{(k)}) = \sum_{k \in K^-} (P_{\mathcal{B}}^{(k)} - P^{(k)}) = \frac{\epsilon}{2}.$$

Όπως είπαμε όμως:  $\mathcal{W}P_{\mathcal{B}} = P_{\mathcal{B}}$ , οπότε

$$\begin{aligned} \|E' - E_{\mathcal{B}}\| &= \sum_{\ell} \left| \sum_{k \in K^+} \mathcal{W}^{(\ell)(k)} (P^{(k)} - P_{\mathcal{B}}^{(k)}) + \sum_{k \in K^-} \mathcal{W}^{(\ell)(k)} (P_{\mathcal{B}}^{(k)} - P^{(k)}) \right| \\ &= \sum_{\ell \in L^+} \left( \sum_{k \in K^+} \mathcal{W}^{(\ell)(k)} (P^{(k)} - P_{\mathcal{B}}^{(k)}) + \sum_{k \in K^-} \mathcal{W}^{(\ell)(k)} (P_{\mathcal{B}}^{(k)} - P^{(k)}) \right) \\ &\quad + \sum_{\ell \in L^-} \left( \sum_{k \in K^+} \mathcal{W}^{(\ell)(k)} (P_{\mathcal{B}}^{(k)} - P^{(k)}) + \sum_{k \in K^-} \mathcal{W}^{(\ell)(k)} (P^{(k)} - P_{\mathcal{B}}^{(k)}) \right) \\ &\leq (1 - w_{min}) \frac{\epsilon}{2} + (1 - w_{min}) \frac{\epsilon}{2} = (1 - w_{min}) \epsilon . \end{aligned}$$

με τα σύνολα  $L^+$  και  $L^-$  να ορίζονται ως τα σύνολα μικροκαταστάσεων ( $\ell$ ) για τα οποία ικανοποιούνται οι προφανείς ανισότητες που επιτρέπουν την άρση της απόλυτης τιμής.

Βάσει της τελευταίας ανισότητας και δεδομένου ότι επαναλαμβανόμενη δράση του  $\mathcal{W}$  θα δώσει μια κατάσταση

$$P^t = \mathcal{W}^t P, \quad t = 1, 2, \dots$$

θα λάβουμε για τη σύγκλιση στη συλλογή ισορροπίας

$$\|E^t - E_{\mathcal{B}}\| \leq e^{-\lambda t} \|E - E_{\mathcal{B}}\|$$

για  $\lambda = -\ln(1 - w_{min}) > 0$ .

Δείξαμε επομένως ότι ξεκινώντας από μια οποιαδήποτε τυχαία μικροκατάσταση, η συλλογή μας θα συγκλίνει εκθετικά με το “χρόνο” (ο οποίος προχωράει με βήματα δράσης του  $\mathcal{W}$ ) στη συλλογή ισορροπίας: κανονική συλλογή ή συλλογή Boltzmann.

Αρκεί επομένως να κατασκευάσουμε μια διαδικασία Markov που να ικανοποιεί τις 3 ιδιότητες που απαιτήσαμε να ικανοποιούνται. Συνήθως όμως η ιδιότητα της ισορροπίας/ισοζύγισης ικανοποιείται έμμεσα μέσω της παρακάτω ισχυρότερης συνθήκης

**Λεπτομερής ισοζύγιση** (detailed balance) :

$$W^{(\ell)(k)} e^{-\beta E^{(k)}} = W^{(k)(\ell)} e^{-\beta E^{(\ell)}}$$

από την οποία με χρήση της συνθήκης κανονικοποίησης για τις πιθανότητες μετάβασης (τα στοιχεία του πίνακα  $W$ ) έπεται άμεσα η ασθενέστερη συνθήκη ισορροπίας από την οποία ξεκινήσαμε.

### 1.2.2 Ανάλυση σφαλμάτων σε μια αλυσίδα Markov

Όπως έχουμε δει η ουσιώδης διαδικασία σε μια προσομοίωση Monte Carlo είναι η διαδικασία Markov. Βάσει αυτής, οι καταστάσεις που συγκροτούν μετά το πέρας μιας προσομοίωσης τη συλλογή-δείγμα πάνω στην οποία έχουμε διεξάγει μετρήσεις έχουν παραχθεί στοχαστικά (από κάθε κατάσταση διαλέγουμε μια επόμενη χωρίς πληροφορία από το παρελθόν). Με τον τρόπο αυτό όμως αντιλαμβάνεται κανείς ότι δύο καταστάσεις που έχουν παραχθεί σε δύο γειτονικές χρονικές στιγμές, δηλαδή σε σχετικά κοντινά βήματα Monte Carlo, δεν είναι ανεξάρτητες. Αντιθέτως είναι πολύ πιθανόν να είναι ισχυρά συσχετισμένες, όπως π.χ αν έχουμε θεωρήσει ως ένα βήμα Monte Carlo 1 Metropolis update και κατά τη διάρκεια του τελευταίου έχουν αλλάξει μόνο 1 ή 2 spin. Κάτι τέτοιο δεν αντιστοιχεί φυσικά σε κάτι που θα γινόταν στο



πραγματικό σύστημα κατά τη διάρκεια ενός πειράματος ή πάντως θα ήταν εξαιρετικά απίθανο να συμβεί. Αν λάβουμε επομένως υπ' όψη μας τη μέτρηση μιας φυσικής ποσότητας με ίδιο βάρος στις δύο αυτές καταστάσεις, έχουμε εισάγει ένα **στατιστικό σφάλμα** στην προσομοίωση. Για να νιώσουμε μεγαλύτερη σιγουριά ότι έχει περάσει αρκετός χρόνος Monte Carlo (sweeps, spin flip ή οτιδήποτε άλλο ορίζουμε ως χρόνο) ώστε το σύστημα να βρίσκεται σε μια αρχούντως διαφορετική κατάσταση - την οποία να ήταν σχεδόν αδύνατο να προβλέψουμε αν γνωρίζαμε την προηγούμενη κατά την οποία κάναμε μέτρηση - θα πρέπει να δημιουργήσουμε κάποιο είδος **ενεργού χρόνου**. Ο χρόνος αυτός θα πρέπει να παρέρχεται μετά από μια αξιόπιστη μέτρηση μέχρι την επόμενη και συνεπώς καθορίζει τη συχνότητα με την οποία θα πρέπει να λαμβάνουμε μετρήσεις και τελικά τη διάρκεια μιας προσομοίωσης.

Εκτός από αυτόν το "χρονικό" συσχετισμό, ή καλύτερα **αυτοσυσχετισμό** (autocorrelation) υπάρχει βέβαια και ο αντίστοιχος χωρικός **συσχετισμός** (correlation). Όμως, επειδή ο τελευταίος παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον σε μεταβάσεις φάσης 2ης τάξης και όχι σε 1ης, δε θα ασχοληθούμε εκτενώς μαζί του παρά μόνο θα αναφέρουμε τα σχετικά μεγέθη για να αναδειχθεί η αντιστοιχία του με τον πρώτο.

### Αυτοσυσχετισμοί

Ο σκοπός μας είναι να εκτιμήσουμε την αναμενόμενη τιμή  $\bar{f}$  μιας φυσικής ποσότητας και εκείνο που μας απασχολεί όπως είπαμε είναι πόσο χρόνο Monte Carlo πρέπει να αφήσουμε ώστε να την εκτιμήσουμε με κάποια επιθυμητή ακρίβεια.

Υποθέτουμε ότι έχει επέλθει ισορροπία και έστω μια χρονοσειρά  $N$  μετρήσεων πάνω σε μικροκαταστάσεις  $x_i$  μιας αλυσίδας Markov

$$f_i = f_i(x_i), \quad i = 1, \dots, N$$

Ο δείκτης  $i$  δηλώνει τη χρονική στιγμή (δηλ. το sweep ή spin flip/update) κατά την οποία λαμβάνεται η μέτρηση και ο χρόνος μεταξύ των διαδοχικών μετρήσεων  $f_i, f_{i+1}$  θεωρείται πάντα σταθερός. Η εκτίμηση της αναμενόμενης τιμής γίνεται ως συνήθως μέσω του εκτιμητή

$$\bar{f} = \frac{1}{N} \sum f_i. \quad (1.8)$$

Συμβολίζοντας με  $t = |i - j|$  την προφανή χρονική απόσταση, ορίζεται η **συνάρτηση αυτοσυσχετισμού** της  $\bar{f}$

$$\hat{C}(t) = \hat{C}_{ij} = \langle (f_i - \langle f_i \rangle) (f_j - \langle f_j \rangle) \rangle$$

η οποία λόγω γραμμικότητας της μέσης τιμής γίνεται

$$\hat{C}_{ij} = \langle f_i f_j \rangle - \langle f_i \rangle \langle f_j \rangle \rightarrow \hat{C}(t) = \langle f_0 f_t \rangle - \bar{f}^2 \quad (1.9)$$

όπου στην τελευταία ισότητα προκύπτει από το αναλλοίωτο σε μεταφορά στο χρόνο της συλλογής ισορροπίας. Έχουμε δηλαδή απλώς μεταφέρει και αντιστοιχίσει τον έναν από τους δύο χρονικούς δείκτες στο  $t = 0$  αφήνοντας τον άλλο να κινείται στο χρόνο.<sup>†</sup> Για  $t \rightarrow \infty$  περιμένει κανείς την ασυμπτωτική συμπεριφορά

$$\hat{C}(t) \sim \exp\left(-\frac{t}{\tau_{exp}}\right)$$

<sup>†</sup> Τονίζεται ότι στον παραπάνω ορισμό έχει παραλειφθεί μια σταθερά κανονικοποίησης της οποίας ο ρόλος είναι γενικά σημαντικός, απλά όχι προς το παρόν.

όπου όπως συνηθίζεται και σε παρεμφερή φυσικά συστήματα εμφανίζεται ένας χαρακτηριστικός χρόνος της εξέλιξης του φαινομένου, που στην περίπτωση μας καλείται **εκθετικός χρόνος αυτοσυσχετισμού**  $\tau_{exp}$ .

Παρατηρεί κανείς ότι για  $i = j$  (ή ισοδύναμα  $t = 0$ ) η (1.9) δίνει σαν ειδική περίπτωση την απόκλιση

$$\hat{C}(0) = \sigma^2(f) . \quad (1.10)$$

Θα δείξουμε τώρα ότι η απόκλιση του εκτιμητή  $\bar{f}$  της αναμενόμενης τιμής  $\hat{f}$  που ορίστηκε παραπάνω συνδέεται με τις συναρτήσεις αυτοσυσχετισμού. Έχουμε

$$\begin{aligned} \sigma^2(\bar{f}) &= \langle (\bar{f} - \hat{f})^2 \rangle \stackrel{(1.8)}{=} \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle (f_i - \hat{f})(f_j - \hat{f}) \rangle \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle f_i f_j - f_i \hat{f} + \hat{f}^2 \rangle \end{aligned}$$

η οποία λόγω γραμμικότητας της μέσης τιμής και του γεγονότος ότι η  $\hat{f}$  είναι ένας αριθμός και όχι τυχαία μεταβλητή, δίνει

$$\sigma^2(\bar{f}) = \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N [\langle f_i f_j \rangle - \hat{f}^2] = \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N C_{ij} \quad (1.11)$$

Στο τελευταίο άθροισμα η περίπτωση  $|i - j| = 0$  συμβαίνει  $N$  φορές με αντίστοιχη συνεισφορά εκείνη της (1.10). Οι υπόλοιπες περιπτώσεις με  $|i - j| = t$ , με  $1 \leq t \leq (N - 1)$ , εμφανίζονται  $2(N - t)$  φορές έτσι ώστε

$$\sigma^2(\bar{f}) = \frac{1}{N^2} \left[ N \hat{C}(0) + 2 \sum_{t=1}^{N-1} (N - t) \hat{C}(t) \right] \quad (1.12)$$

ή ισοδύναμα για  $\hat{c}(t) = \hat{C}(t)/\hat{C}(0)$

$$\sigma^2(\bar{f}) = \frac{\sigma^2(f)}{N} \left[ 1 + 2 \sum_{t=1}^{N-1} \left( 1 - \frac{t}{N} \right) \hat{c}(t) \right] \quad (1.13)$$

Στο σημείο αυτό αξίζει να θυμηθούμε την αντίστοιχη μορφή της απόκλισης ενός εκτιμητή αναμενόμενης τιμής μη συσχετιζόμενων τυχαίων μεταβλητών. Τη μορφή αυτή τη δίνει το **κεντρικό οριακό θεώρημα** σύμφωνα με το οποίο

*Η πυκνότητα πιθανότητας του αριθμητικού μέσου  $\hat{f}$  συγκλίνει στην Γκαουσιανή πυκνότητα πιθανότητας με απόκλιση*

$$\sigma^2(\bar{f}) = \frac{\sigma^2(f)}{N} \quad (1.14)$$

Συγκρίνοντας τώρα τις εξισώσεις (1.13) και (1.14) βλέπουμε ότι διαφέρουν κατά τον παράγοντα στην αγκύλη. Η απόκλιση δηλαδή σε συσχετιζόμενες μετρήσεις είναι μεγαλύτερη από την αντίστοιχη σε ασυσχέτιστες κατά τον παράγοντα αυτόν. Ορίζεται επομένως ο **ολοκληρωμένος χρόνος αυτοσυσχετισμού**

$$\tau_{int} = \left[ 1 + 2 \sum_{t=1}^{N-1} \left( 1 - \frac{t}{N} \right) \hat{c}(t) \right] \quad (1.15)$$

Στις περισσότερες προσομοιώσεις που διενεργούνται στη στατιστική φυσική ενδιαφέρεται κανείς για το θερμοδυναμικό όριο  $N \rightarrow \infty$ , στο οποίο ο  $\tau_{int}$  παίρνει τη μορφή

$$\tau_{int} = 1 + 2 \sum_{t=1}^{\infty} \hat{c}(t) \quad (1.16)$$

η οποία όμως καθιστά αδύνατο τον πρακτικό υπολογισμό του. Υποθέστε όχι χρησιμοποιούμε τον εκτιμητή  $\bar{\tau}_{int}$  για να τον εκτιμήσουμε. Τότε

$$\bar{\tau}_{int} = 1 + 2 \sum_{t=1}^{\infty} \bar{c}(t)$$

και στην περίπτωση αυτή

$$\sigma^2(\bar{\tau}_{int}) \rightarrow \infty$$

μιας και για μεγάλο  $t$  κάθε  $\bar{c}(t)$  συνεχίζει να προσθέτει θόρυβο, ενώ το σήμα σβήνει εκθετικά με το  $t$ . Μπορούμε όμως να θεωρήσουμε πεπερασμένο άθροισμα ορίζοντας τον  $t$ -**εξαρτημένο εκτιμητή** του  $\tau_{int}$

$$\bar{\tau}_{int} = 1 + 2 \sum_{t'=1}^t \bar{c}(t') \quad (1.17)$$

και να αναζητήσουμε ένα παράθυρο στο  $t$  για το οποίο ο  $\tau_{int}$  είναι κατά το δυνατόν ανεξάρτητος του  $t$ . Αυτήν την τιμή χρησιμοποιούμε ως  $\bar{\tau}_{int}$ .

### Ολοκληρωμένος χρόνος αυτοσυσχετισμού και binning

Παρατηρώντας τις εξισώσεις (1.13), (1.14), (1.15), παρατηρεί κανείς ότι ο  $\tau_{int}$  μπορεί να υπολογιστεί ως ο λόγος

$$\tau_{int} = \frac{\sigma^2(\bar{f})}{\sigma_{s,i}^2(\bar{f})} \quad (1.18)$$

όπου ο παρονομαστής αφορά σε στατιστικά ανεξάρτητα δεδομένα:  $\sigma_{s,i}^2(\bar{f}) = \sigma^2(\bar{f})/N$ . Η διαδικασία binning για την εκτίμηση του ολοκληρωμένου χρόνου αυτοσυσχετισμού ξεκινάει με το χωρισμό της χρονοσειράς δεδομένων μιας προσομοίωσης σε  $N_{bs} \leq N$  bins, το καθένα από τα οποία περιέχει

$$N_b = \left[ \frac{N}{N_{bs}} \right]$$

όπου οι αγκύλες υποδεικνύουν ακέραια διαίρεση όπως την εννοεί η Fortran (ακέραιο μέρος βασικά). Αντίστοιχα

$$N_{bs} = \left[ \frac{N}{N_b} \right]$$

Τα νέα binned δεδομένα είναι τα

$$f_j^{N_b} = \frac{1}{N_b} \sum_{i=1+(j-1)N_b}^{jN_b} f_i$$

όπου ο δείκτης  $i$  τρέχει διαδοχικά μέσα σε κάθε bin προσπερνώντας το ένα μετά το άλλο και ο  $j = 1 \dots, N_{bs}$  είναι δηλαδή η μέση τιμή των δεδομένων σε κάθε bin. Για αυξανόμενο μέγεθος bin, άρα ελατούμενο πλήθος bins, οι αυτοσυσχετισμοί μεταξύ των binned δεδομένων

εξασθενούν και ένα ασφαλές όριο είναι να θεωρήσουμε  $N_b > \tau_{exp}$ . Τώρα που έχουμε το νέο σετ δεδομένων μπορούμε να υπολογίσουμε τη μέση τιμή του δείγματος πάνω σε όλα τα bins

$$\bar{f}_j^{N_b} = \frac{1}{N_{bs}} \sum_{j=1}^{N_{bs}} f_j^{N_b}$$

μαζί με το σφάλμα  $\sigma_{s,i}(\bar{f})$  μιας και με τη διαδικασία που ακολουθήσαμε είμαστε αρκετά κοντά στο να θεωρούμε τα binned δεδομένα ασυσχέτιστα. Έτσι για άπειρη χρονοσειρά αρχικών δεδομένων η εξ. (1.18) θα γίνει

$$\tau_{int} = \lim_{N_b \rightarrow \infty} \tau_{int}^{N_b} = \lim_{N_b \rightarrow \infty} \left( \frac{s_{\bar{f}^{N_b}}^2}{s_f^2} \right)$$

όπου η ποσότητα

$$(s_2^r)^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i^r - \bar{x}^r)^2$$

αποτελεί τον **αμερόληπτο εκτιμητή της απόκλισης**<sup>†</sup> Φυσικά στα προβλήματα που αντιμετωπίζουμε με προσομοιώσεις Monte Carlo τα δεδομένα είναι πάντα πεπερασμένου πλήθους και ως εκ τούτου αρκεί ένας αρκούντως μεγάλος αριθμός δεδομένων ανά bin  $N_b$ . Ακολούθως για να υπολογίσουμε το στατιστικό σφάλμα του  $\tau_{int}$  αρκεί να υπολογίσουμε εκείνο του αριθμητή επειδή το αντίστοιχο σφάλμα του παρονομαστή στο όριο μεγάλου  $N_b$  είναι μικρότερο. Δεδομένου ότι βρισκόμαστε στο ασφαλές όριο που αναφέραμε προηγουμένως και οι αυτοσυσχετισμοί έχουν γίνει μικροί, τα binned δεδομένα είναι προσεγγιστικά Γκαουσιανά λόγω του κεντρικού οριακού θεωρήματος. Επομένως το σφάλμα του  $s_{\bar{f}^{N_b}}^2$  είναι αναλυτικά γνωστό από την κατανομή  $\chi^2$ . Κατόπιν μπορούμε αν θέλουμε να συμπεριλάβουμε και τη διακύμανση του παρονομαστή.<sup>‡</sup> Οι βαθμοί ελευθερίας του εκτιμητή στον αριθμητή είναι το πλήθος των ανεξάρτητων (με την έννοια που συζητήθηκε) bins,  $N_{bs}$ , ενώ για τον παρονομαστή θα είναι

$$N_{eff} = \frac{N}{\tau_{int}}$$

αφού μετά από κάθε μέτρηση θα πρέπει να παρέλθει  $\tau_{int}$  για να είμαστε αρκούντως βέβαιοι ότι οι συσχετισμοί έπεσαν στο επιθυμητό επίπεδο για να θεωρηθεί η επόμενη μέτρηση ανεξάρτητη. Θα θεωρήσουμε τη σύμβαση

$$N = 2^K, \quad K \geq 4 \quad N_b = 2^{K_b}, \quad K_b = 0, 1, \dots, K-5, K-4$$

για λόγους ευκολίας και ώστε για μέγιστο  $K_b = K-4$ , το μικρότερο πλήθος bins να είναι  $2^4 = 16$  και βάσει της κατανομής Student τα διαστήματα εμπιστοσύνης του σφάλματος να προσεγγίζουν αρκετά τη Γκαουσιανή τυπική απόκλιση (για λεπτομέρειες βλ. κάποιο βιβλίο στατιστικής ή το [4] για άμεση σύνδεση και με τη μέθοδο Monte Carlo).

Παράδειγμα μέτρησης των παραπάνω ποσοτήτων παρουσιάζεται στο κεφάλαιο 3.

<sup>†</sup>Ένας εκτιμητής καλείται μεροληπτικός (**biased**) όταν η αναμενόμενη τιμή του δεν ταυτίζεται με την αριβή. Στην αντίθετη περίπτωση καλείται αμερόληπτος (**unbiased**).

<sup>‡</sup>Χρησιμοποιώντας την κατανομή  $F$ -ratio. Απλή αναφορά, βλ. κάποιο σύγγραμμα στατιστικής ή το [4].

### 1.3 Το $q$ -state Potts μοντέλο

Στη γενικότερή του περίπτωση το μοντέλο Potts ορίζεται μέσα σε εξωτερικό μαγνητικό πεδίο πάνω σε υπερκυβικά πλέγματα διάστασης  $d$ . Η συνάρτηση ενέργειας του συστήματος ορίζεται ως

$$-\beta E^{(k)} = -\beta E_0^{(k)} + HM^{(k)}$$

όπου

$$E_0^{(k)} = -2 \cdot \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij}(q_i^{(k)}, q_j^{(k)}) \delta(q_i^{(k)}, q_j^{(k)}) + \frac{2dN}{q}$$

όπου

$$\delta(q_i, q_j) = 1, \text{ if } q_i = q_j \text{ or } 0, \text{ if } q_i \neq q_j$$

με το άθροισμα να τρέχει στους πλησιέστερους γείτονες και

$$M^{(k)} = 2 \cdot \sum_{i=1}^N \delta(1, q_i^{(k)})$$

όπου το άθροισμα τρέχει πάνω σε όλες τις πλεγματικές θέσεις. Ο παράγοντας 2 μπροστά από τα παραπάνω αθροίσματα εισάγεται έτσι ώστε να υπάρχει ταύτιση με τον ορισμό του μοντέλου Ising με ενέργεια

$$E_0 = - \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j$$

πάνω σε όλες τις πλεγματικές θέσεις. Ο παράγοντας Boltzmann παίρνει τώρα τη μορφή

$$e^{-\beta E^{(k)}} = e^{-\beta E_0^{(k)} + HM^{(k)}}$$

Το  $q_i^{(k)}$  καλείται Potts spin ή κατάσταση Potts ή  $q$ -state συνήθως, στην πλεγματική θέση  $i$  και παίρνει τιμές  $1, \dots, q$  (στα προγράμματα που θα χρησιμοποιήσουμε παίρνει τιμές  $0, \dots, q-1$ ). Το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο εκλέγεται να αλληλεπιδρά μόνο με την κατάσταση  $q_i = 1$  και με καμία άλλη και οι συναρτήσεις  $J_{ij}(q_i, q_j)$  είναι οι σταθερές σύζευξης μεταξύ των καταστάσεων των πλεγματικών θέσεων  $i$  και  $j$ . Για

$$J_{ij}(q_i, q_j) = J > 0$$

και κατά σύμβαση  $J = 1$ , ανάγεται στο αρχικό μοντέλο Potts και για  $q = 2$  ανάγεται στο μοντέλο Ising που προσομοιώνει έναν σιδηρομαγνήτη. Γενικά η εκλογή του  $J$  καθορίζει τη φύση του μοντέλου και τότε οι  $q$  βαθμοί ελευθερίας επιτρέπουν την προσομοίωση διαφόρων ενδιαφερόντων συστημάτων. Προσοχή χρειάζεται στον ορισμό της θερμοκρασίας ο οποίος συμφωνεί μεν με εκείνον του μοντέλου Ising αλλά διαφέρει κατά ένα παράγοντα  $1/2$  από το συνήθη ορισμό κατά τη μελέτη του μοντέλου Potts

$$\beta = \beta^{\text{Ising}} = \frac{1}{2} \beta^{\text{Potts}}.$$

Η αναμενόμενη τιμή

$$M_{q_0} = \langle \delta_{q_i, q_0} \rangle$$

να βρεθεί ή  $q$ -state στην πλεγματική θέση  $i$  ίση με  $q_0$ , ονομάζεται **μαγνήτιση Potts** ως προς το  $q_0$ .

Η κρίσιμη θερμοκρασία για το μοντέλο Potts δίνεται ως

$$\beta_c = \frac{1}{T_c} = \frac{1}{2} \ln(1 + \sqrt{q})$$

για  $q = 2, 3, \dots$

Ο αλγόριθμος Metropolis για το γενικευμένο Potts μοντέλο δίνει πιθανότητες μετάβασης

$$f(l, k) = 1/q \text{ (if } l = k), \quad 1/(qN) \forall l : q_i^{(l)} \neq q_i^{(k)} \text{ on site } i, \quad 0 \text{ else}$$

και κατόπιν η νέα κατάσταση  $l$  γίνεται δεκτή με πιθανότητα

$$w^{(l)(k)} = \min \left( 1, \frac{P_B^{(l)}}{P_B^{(k)}} \right)$$

Τονίζεται ότι στα προγράμματα που έχουν χρησιμοποιηθεί στην εργασία αυτή δουλεύουμε γενικά με τη δράση

$$iact^{(k)} = \sum_{\langle ij \rangle} \delta(q_i^{(k)}, q_j^{(k)})$$

και άρα ισχύει

$$E_0^{(k)} = \frac{2dN}{q} - d \cdot iact^{(k)} \tag{1.19}$$

Η επιλογή αυτή βοηθάει στη συλλογή ιστογραμμάτων κυρίως μιας και η δράση παίρνει μόνο ακέραιες ή μηδενικές τιμές και συνεπώς μπορεί να χρησιμοποιηθεί απευθείας ως δείκτης σε πίνακα

$$iact = 0, 1, \dots, nlink$$

όπου  $nlink$  το πλήθος των δεσμών του πλεγματος (π.χ για 2-διάστατο πλέγμα με περιοδικές συνοριακές συνθήκες  $nlink = 2N$ ). Ορίζεται τέλος η δράση ανά δεσμό

$$act = \frac{iact}{nlink}$$

που συνήθως κανονικοποιείται στο  $[0, 1]$ . Ομοίως η απόλυτη μαγνήτιση που θα συναντήσουμε παρακάτω κανονικοποιείται συνήθως στη μαγνήτιση ανα πλεγματική θέση.

## Κεφάλαιο 2

### Τροποποιήσεις και προσθήκες

Αρχικά θα χρειαστεί να κάνουμε ορισμένες τροποποιήσεις σε κάποια από τα αρχεία της βιβλιοθήκης έτσι ώστε να εκτελεί ο κώδικας τις επιθυμητές μετρήσεις. Κύριος γνώμονάς μας και πάλι είναι να μεταβάλλουμε όσο το δυνατό λιγότερο τον κώδικα της βιβλιοθήκης και φυσικά να διατηρήσουμε κατά το δυνατό (όπως και τελικά συμβαίνει) απaráλλαχτη τη δομή της. Αυτό σημαίνει ότι όποτε χρησιμοποιείται κάποια νέα μεταβλητή, όπως η απόλυτη τιμή της μαγνήτισης στη ρουτίνα του `metropolis update`, αυτή θα πρέπει να τοποθετηθεί στο κατάλληλο αρχείο παραμέτρων και χαρακτηριστικών μεταβλητών της προσομοίωσης (`.par`, `.dat`) ή στο κατάλληλο αρχείο `common blocks` (`.com`).

Τονίζουμε ότι όταν δεν αναφέρεται συγκεκριμένος κατάλογος για το εκάστοτε εν λόγω αρχείο, ο κατάλογος `/STMC/ForProg/MC.Potts/` θα εννοείται, μιας και εκεί γίνεται και η περισσότερη εργασία.

#### 2.1 Η γεννήτρια ψευδοτυχαίων αριθμών `RanMar`

As προχωρήσουμε στην πρώτη βασική τροποποίηση που αφορά στη λειτουργία της γεννήτριας ψευδοτυχαίων αριθμών. Η γεννήτρια που υλοποιείται στις ρουτίνες του καταλόγου `/STMC/ForLib/ rmaset.f, ranmar.f` είναι εκείνη των Marsaglia, Zaman and Tsang[14] (“luxury” level 2 της RANLUX[12]<sup>1</sup>, γεννήτρια την οποία θα παρουσιάσουμε λίγο παρακάτω). Ως προεπιλογή, η `ranmar` χρησιμοποιεί τα `seeds` (σπόροι) `iseed1 = 1, iseed2 = 0` που ορίζονται στο αρχείο `mc.par`. Έτσι με κάθε αρχικοποίηση της γεννήτριας με τα ίδια αυτά `seeds` λαμβάνουμε την ίδια ακολουθία αριθμών και κατά συνέπεια τα ίδια αποτελέσματα στις μετρήσεις. Όποτε λοιπόν σκοπός μας είναι να αναπαράγουμε αποτελέσματα και σχήματα από το σύγγραμμα του Berg, θα χρησιμοποιούμε τις προεπιλογές αυτές. Όμως, στη γενική περίπτωση που μας ενδιαφέρει να κάνουμε ανεξάρτητα τρεξίματα και να αυξάνουμε τη βεβαιότητά μας ότι δεν “έτυχε” να προκύψει μια λογική μέση τιμή της μαγνήτισης εξ’ αιτίας της συγκεκριμένης επιλογής των `seeds`, θα πρέπει να χρησιμοποιούμε νέα κάθε φορά. Κάτι τέτοιο φυσικά δε δημιουργεί πρόβλημα επαναληψιμότητας - τουλάχιστον στη δική μας περίπτωση - αφού η `ranmar` έχει μια καλή περίοδο  $2^{144}$ . Η ρουτίνα `/STMC/ForLib/rmaset.f` αρχικοποιεί τη γεννήτρια με 2 τρόπους.

1. Ελέγχει αν υπάρχει κάποιο αρχείο (το οποίο της έχουμε περάσει ως όρισμα) από το οποίο θα διαβάσει τις τρέχουσες τιμές των παραμέτρων, όπως αυτές διαμορφώθηκαν μετά το πέρας της προηγούμενης χρήσης της γεννήτριας.

---

<sup>1</sup>Έχει μεταφραστεί και σε Intel PC Assembler κώδικα για ταχύτερη απόδοση τυχαίων αριθμών[10].

2. Αν δεν υπάρχει το αρχείο αυτό, δίνει κάποιες προεπιλεγμένες τιμές στις παραμέτρους βάσει των δύο seeds.

Στην περίπτωση μας θα κάνουμε χρήση της πρώτης λειτουργίας και το αρχείο που θα χρησιμοποιήσουμε για την ενδιάμεση αποθήκευση των τιμών των παραμέτρων θα είναι το *ranmar.d* (το οποίο η Fortran αντιμετωπίζει ως unformatted οπότε και δε μπορείτε να το διαβάσετε άμεσα). Πρέπει να γίνουν τα εξής:

- Στο αρχείο *potts\_init.f*, στην περιοχή Initialize:, κατά την κλήση της *rmaset* περνάμε ως ένα επιπλέον τελευταίο όρισμα το αλφαριθμητικό 'ranmar.d'.
- Στο αρχείο *potts\_hist.f*, στο τέλος της ρουτίνας προσθέτουμε μια κλήση στη ρουτίνα *rmasave* η οποία αναλαμβάνει την αποθήκευση των παραμέτρων στο προηγούμενο αρχείο.<sup>2</sup>

Στον κατάλογο */STMC/ForLib* υπάρχουν επίσης δύο ρουτίνες για την αποθήκευση και επανανάγνωση της τελευταίας κατάστασης της γεννήτριας. Πρόκειται για τις: *rmasave\_a.f*, *rmaset\_a.f*.

## 2.2 Η γεννήτρια ψευδοτυχαίων αριθμών “πολυτελείας” RanLux

Θα παρουσιάσουμε τώρα μια δεύτερη γεννήτρια που ακούει στο όνομα RanLux και η οποία παράγει ψευδοτυχαίους αριθμούς πολυτελείας (**random luxurious numbers**). Αυτό θα το κάνουμε όχι επειδή χρειαζόμαστε μια καλύτερη μηχανή τυχαίων αριθμών, αλλά επειδή:

1. όπως θα δούμε η RanLux λειτουργεί σε 5 επίπεδα “τυχειότητας” και άρα διαλέγουμε το πιο γρήγορο για τις ανάγκες της κάθε προσομοίωσης,
2. είναι μια βελτιωμένη εξέλιξη της RanMar και άρα μια καλή ευκαιρία να τις δούμε παράλληλα... εν δράση και
3. είναι υλοποιημένη παραδοσιακά σε FORTRAN όπως και όλος ο υπόλοιπος κώδικας που θα χρησιμοποιήσουμε και ως εκ τούτου μας... προκαλεί να τη συνδέσουμε και να συγκρίνουμε τους χρόνους των προσομοιώσεων αλλά και τα στατιστικά αποτελέσματα σε διαφορετικά επίπεδα λειτουργίας της.

Αρχικά θα πρέπει να κατεβάσετε τον κώδικα από το internet<sup>3</sup> και να αποθηκεύσετε στο αρχείο *'ranlux.F'*, όπου το κεφαλαίο *'F'* στην κατάληξη είναι απαραίτητο και δηλώνει την ύπαρξη οδηγιών προς τον προεπεξεργαστή στο εν λόγω αρχείο (εναλλακτικά θα το βρείτε στο συνοδευτικό υλικό της εργασίας). Θα παρατηρήσετε ότι το αρχικό κομμάτι του κώδικα αποτελεί πρόσθετο interface που έχει προστεθεί από τον κ.Αναγνωστόπουλο για ευκολία στη χρήση και θα το χρησιμοποιήσουμε ως βάση. Μετακινείστε το αρχείο στον κατάλογο */STMC/ForLib/*.

Κατ' αρχάς αφαιρούμε από το αρχείο: *potts\_hist.f* τον κώδικα της RanMar:

```
include '../..//ForLib/ranmar.f'
include '../..//ForLib/rmaset.f'
include '../..//ForLib/rmasave.f'
```

<sup>2</sup>Η τελική μορφή του κώδικα θα παρουσιαστεί παρακάτω.

<sup>3</sup>Πιο συγκεκριμένα αναζητείστε το σχετικό αρχείο στην προσωπική σελίδα του Κ.Αναγνωστόπουλου <http://www.physics.ntua.gr/~konstant/ph47/>, όσο βέβαια διατηρεί τη συγκεκριμένη διεύθυνση.



και προσθέτουμε εκείνον της RanLux:

```
include '../..//ForLib/ranlux.f'
```

, όπου το τελικό 'f' έχει γίνει πεζό (βλ. παρακάτω). Προσθέτουμε στο αρχείο: *potts\_init.f* τις παρακάτω γραμμές στο τέλος του τομέα δηλώσεων:

```
C   RANLUX declarations
      integer ranlux_lev
      common/ran_seed/iseed,ranlux_lev   ! common block in ranlux.F
```

```
C Initialize:
```

```
C   Ranlux
      iseed=12345                !Updated
      ranlux_lev=4               !Updated
      call initranf(.false.)     !Updated
      xr=ranf()                  !Updated, first random number
```

```
C
```

**Προσοχή:** όταν χρειαστεί να αλλάξει το `ranlux_lev` θα πρέπει να καλέσουμε την μέθοδο αρχικοποίησης με αληθές όρισμα: `call initranf(.true.)`, καθώς μόνο τότε - δηλ. σε ένα καθαρό ξεκίνημα με `seed = iseed` - λαμβάνει υπόψιν την αλλαγή η γεννήτρια. Εφ' όσον την έχουμε ξεκινήσει με στο επιθυμητό επίπεδο λειτουργίας, κάνουμε το όρισμα ψευδές έτσι ώστε να διαβάσει την νέα αρχική της κατάσταση από το αρχείο *aaa.seed*.

Μετά από τα παραπάνω, κάθε φορά που χρειαζόμαστε έναν τυχαίο αριθμό ομοιόμορφα κατανομημένο στο διάστημα (0,1) καλούμε την `ranf()`. Έτσι στο αρχείο *potts\_met.f* για παράδειγμα, αλλάζουμε όλες τις κλήσεις στη `ranmar` με τις αντίστοιχες της `ranf()`.

Τέλος, αν επιχειρήσετε να μεταγλωττίσετε το *potts\_hist.f* ίσως λάβετε αρκετά μηνύματα σφάλματος (errors) και ακόμα περισσότερες προειδοποιήσεις (warnings). Και ενώ οι τελευταίες είναι ίσωνος σημασίας, πρέπει να διορθώσουμε τα λάθη! Δύο πράγματα μπορεί να έχουν συμβεί και για τα δύο ευθύνεται ο μεταγλωττιστής σας:

1. λάβατε μήνυμα σφάλματος “**Declaration after DATA**”, ή
2. λάβατε μήνυμα σφάλματος “**Bad # line**”, δηλ. ο compiler δεν στέλνει όπως θα έπρεπε τις οδηγίες προς τον προεπεξεργαστή (preprocessor directives) στον τελευταίο.

Αν αντιμετωπίσετε εδώ το 1. από τα παραπάνω, θα το αντιμετωπίσετε και κατά τη μεταγλώττιση των ρουτίνων στα επόμενα κεφάλαια. Η λύση είναι να φροντίσετε στα αρχεία που εμφανίζεται το σφάλμα να βρίσκονται όλες οι δηλώσεις μεταβλητών, παραμέτρων κτλ. πριν από δηλώσεις DATA της FORTRAN, που πρακτικά σημαίνει (βλ. παράρτημα Β) ότι τα αρχεία “.dat” πρέπει να βρίσκονται μετά από όλα τα αρχεία “.com” και οποιαδήποτε άλλη δήλωση.

Όσον αφορά το σφάλμα υπ' αριθμόν 2, μπορείτε να κάνετε χειροκίνητα την προεπεξεργασία με την εντολή:

```
gcc -E ranlux.F > ranlux.f
```

αποθηκεύοντας τον προεπεξεργασμένο πλέον κώδικα στο τελικό πηγαίο αρχείο FORTRAN. Μεταγλωττίστε τώρα το αρχείο που χρησιμοποιεί (includes) το *ranlux.f* με την εντολή:

```
f77 -O -w -o phist potts_hist.f
```

όπου ο `-O` διακόπτης (switch) ενεργοποιεί το επίπεδο βελτιστοποίησης του compiler (optimization level), ο `-w` κόβει όλα τα προειδοποιητικά μηνύματα που στην περίπτωσή μας είναι αβλαβή και ο `-o` καθορίζει το όνομα του εκτελέσιμου αρχείου.

## 2.3 Μετρήσεις (απόλυτης) μαγνήτισης

Όπως ευκολα μπορεί κανείς να δει, οι ρουτίνες που επιτελούν τις ουσιαστικές εργασίες (π.χ κατασκευή και επεξεργασία ιστογραμμάτων) στηρίζονται σε κάποια από τις updating routines που υλοποιούν αλγόριθμους όπως εκείνος των Metropolis et al., τον αλγόριθμο Heatbath ή τον αλγόριθμο n-hit Metropolis. Όμως η ρουτίνα pottsmet που υλοποιεί τον πρώτο από τους παραπάνω, δεν υπολογίζει την (απόλυτη) μαγνήτιση παρά μόνο την δράση (προτιμάται από την ενέργεια λόγω της ανάληψης της τελευταίας μόνο ακέραιων τιμών). Θα πρέπει επομένως να προσθέσουμε κώδικα για τον υπολογισμό της μαγνήτισης. Η απόλυτη τιμή της μαγνήτισης για το q-state Potts μοντέλο ορίζεται ως:

$$|M| = J - \frac{N - J}{q - 1} = \frac{q \cdot J - N}{q - 1}$$

όπου  $J$  το πλήθος των spins που βρίσκονται στην πιο “δημοφιλή” κατάσταση του πλέγματος, εκείνη δηλαδή που κυριαρχεί. Θα χρειαστεί λοιπόν να συμπεριλάβουμε στο αρχείο potts.com κάποιες επιπλέον μεταβλητές και τότε αυτό θα πάρει την παρακάτω νέα μορφή:

```

common /sites/ ista(ms)
c iamin,iamax: action minimum and maximum of the MC sweep.
common /links/ nlink, ialink(nd,ms),iact,iamin,iamax
common /delfct/ idel(0:nqm1,0:nqm1)
c acpt: counts accepted updates.
common /weights/ wrat(-n2d:n2d,0:mlink+n2d),acpt
c ia_min,ia_max: action minimum and maximum for a series of sweeps.
common /haction/ ha(0:mlink),ia_min,ia_max
c absm, J: absolute magnetization, spins in most popular state
common /magnet/ stcount, J, Jspin, stcount(nq), absm

```

Εναλλακτικά μπορούμε να τοποθετήσουμε τις σχετικές μεταβλητές για τον υπολογισμό της απόλυτης μαγνήτισης στο αρχείο Fortran κάθε ρουτίνας που τις χρειάζεται. Προσοχή επειδή οι μεταβλητές όπως δηλώνεται στο implicit.sta του καταλόγου βιβλιοθήκης, είναι πραγματικές μόνο αν ξεκινάνε από συγκεκριμένους χαρακτήρες.

Οι τροποποιήσεις στην κύρια ρουτίνα pottshist.f φαίνονται στο παρακάτω αρχείο. Ουσιαστικά έχουν απλά συμπεριληφθεί 2 νέες μέθοδοι που αποθηκεύουν το τελευταίο configuration μετά από ένα run και το διαβάζουν εκ νέου με το ξεκίνημα του καινούριου.

```

program potts_hist
C Copyright, Bernd Berg, Dec 13 2000.
C MC production run to create energy (action variable) histograms.
include '../..//ForLib/implicit.sta'
include '../..//ForLib/constants.par'
character cd*1,cq*2,cl*3
include 'lat.par'
include 'mc.par'
include 'potts.par'
include '../..//ForLib/lat.com'
include '../..//ForLib/potts.com'
C updated {

```

```
common /magnet/ absm
C }
include 'lat.dat'

call potts_init(.false.) ! Initialize Potts Metropolis MC:
C
do iequi=1,nequi          ! Sweeps for reaching equilibrium.
  call potts_met
end do
C
write(cd,'(I1.1)') nd
write(cq,'(I2.2)') nq
write(cl,'(I3.3)') nla(1)
open(iud1,file="p//cd//d//cq//q//cl//.d",
&   form="unformatted",status="unknown")
write(iud1) beta,nd,nq,nla,nlink,nequi,nrpt,nmean
do irpt=1,nrpt ! nrpt repetitions of nmeas measurement sweeps.
  acpt=zero
  call razero(ha,0,nlink)
  do imeas=1,nmeas
    call potts_met
    write(*,'(F12.5)') absm
  end do
  acpt=acpt/(nmeas*ns)
  write(iud1) ha,acpt,irpt
  call write_progress(iud2,"irpt,iact,acpt:",irpt,iact,acpt)
end do
close(iud1)
C
stop
end

include 'potts_init.f'
include 'potts_met.f'

include '../..//ForLib/ipointer.f'
include '../..//ForLib/isfun.f'
include '../..//ForLib/ixcor.f'
include '../..//ForLib/lat_init.f'
include '../..//ForLib/nsfun.f'
include '../..//ForLib/write_progress.f'
C updated {
  include '../..//ForLib/potts_old.f'
  include '../..//ForLib/save_conf.f'
C }
include '../..//ForLib/potts_act.f'
include '../..//ForLib/potts_act_tab.f'
include '../..//ForLib/potts_ran.f'
```

```
include '../..//ForLib/potts_wght.f'
include '../..//ForLib/razero.f'

include '../..//ForLib/ranmar.f'
include '../..//ForLib/rmaset.f'
include '../..//ForLib/rmasave.f'
```

η οποία κάνει βέβαια χρήση της ρουτίνας που υλοποιεί τον αλγόριθμο Metropolis, pottsmet. Η τελευταία μετά από τις σχετικές προσθήκες για υπολογισμό της (απόλυτης) μαγνήτισης (την οποία και χρησιμοποιούμε και ως παράμετρο τάξης - order parameter) παρατίθεται παρακάτω.

```
      subroutine potts_met
      include '../..//ForLib/implicit.sta'
      include '../..//ForLib/constants.par'
C Copyright Bernd Berg, Nov 14 2000.
C Metropolis updating with sequential spin choice.
      include 'lat.par'
      include 'potts.par'
      include '../..//ForLib/lat.com'
      include '../..//ForLib/potts.com'
C Magnetization vars (move this section into potts.com maybe..)
      integer i,J,Jspin, stcount
      dimension stcount(nq)
      common /magnet/ absm
C
      q=nq*ONE
      iamin=iact
      iamax=iact
      do is=1,ns
        istaold=ista(is)
        call ranmar(xr)
        istanew=int(q*xr)
        if(istanew.ne.istaold) then
          idact=0
          do id=1,nd
            ista2=ista(ipf(id,is))
            idact=idact+idel(ista2,istanew)-idel(ista2,istaold)
            ista2=ista(ipb(id,is))
            idact=idact+idel(ista2,istanew)-idel(ista2,istaold)
          end do
          if(idact.ne.0) then
            call ranmar(xr)
            if(xr.lt.wrat(idact,iact)) then
              ista(is)=istanew
              iact=iact+idact
              acpt=acpt+one
              iamin=min(iamin,iact)
              iamax=max(iamax,iact)
            end if
          end if
        end if
      end do
```

```

        end if
    else
        ista(is)=istanew
        acpt=acpt+one
    end if
end if
ha(iact)=ha(iact)+one
end do
ia_min=min(ia_min,iamin)
ia_max=max(ia_max,iamax)
C Magnetization
C :stcount init
do i=1,nq
    stcount(i)=0
end do
C :count the q-state occurrences
do i=1,ns
    stcount(ista(i)+1)=stcount(ista(i)+1)+1
end do
C :calculate noOf spins (J) in the most popular q-state
J=stcount(1)
do i=1,nq
    if(J.lt.stcount(i)) J=stcount(i)
end do
C :find the most popular q-state (not necessary)
do i=1,nq
    if(J.eq.stcount(i)) Jspin=i-1
end do
C :absolute magnetization
absm=(nq*J-ns)/nqm1
C OK
return
end

```

Τέλος παραθέτουμε και το αρχείο pottsinit.f που αρχικοποιεί μια προσομοίωση και το οποίο έχει προσαρμοστεί ώστε να λειτουργεί ορθά όταν εκτελούμε μια σειρά/ακολουθία προσομοιώσεων (μεταβάλλοντας τη θερμοκρασία για παράδειγμα).

```

subroutine potts_init(lpr)
include '../..//ForLib/implicit.sta'
include '../..//ForLib/constants.par'
C Copyright, Bernd Berg, Nov 14 2000.
C Initializes arrays needed for generalized Potts Model MC calculation.
include 'lat.par'
include 'mc.par'
include 'potts.par'
include '../..//ForLib/lat.com'
include '../..//ForLib/potts.com'
dimension ix(nd)

```

```

C Updated {
    integer seq,first
C }

C Initialize:
    if(lpr) call rmaset(iuo,iud1,iseed1,iseed2,'nexiste.pa') ! ran-num
    if(.not.lpr) call rmaset(-iuo,iud1,iseed1,iseed2,'nexiste.pa')
    call ranmar(xr) ! first random number
    acpt=zero ! acceptance rate
    ia_min=mlink
    ia_max=0
    call lat_init(ns,nd,ipf,ipb,nla,ix,nlink) ! lattice

    call potts_act_tab(idel,nqm1) ! potts action table

C Updated {
C if (firsttime) then call potts_ran else call potts_old.
    open(unit=1,file="seqmc.par", form="formatted",
    & status="old")
    read(1,100) seq, first
100 format(I2,I2)
    if (seq.eq.1) then
        if (first.eq.1) then
            call potts_ran(ista,ns,nq)
        else
            call potts_old(ista,ns)
        endif
    else
        call potts_ran(ista,ns,nq)
    endif
C }

    call potts_act(ista,ipf,idel,ns,nqm1,nd,iact) ! potts action
    call potts_wght(wrat,beta,nlink,nd) ! potts weights
    call razero(ha,0,nlink) ! initialize action histogram
C

    if(.not.lpr) return
    write(iuo,(' Initial randon number: xr =",1F12.6)') xr
    write(iuo,(' lat.par: nd,nq,nla =",1I2,1I3,3X,8I4)')
    & nd,nq,nla
    write(iuo,(' ms,mlink,nlink =",3I10)') ms,mlink,nlink
    write(iuo,(' mc.par:"))')
    write(iuo,(' (1X,"iuo,iud1,iseed1,iseed2, beta"))')
    write(iuo,(' ( 2I4, 2I7, 1F11.6)')
    & iuo,iud1,iseed1,iseed2,beta
    write(iuo,(' Initial action: iact =",1I10)') iact
    return
end

```

## 2.4 Δημιουργία script για εκτέλεση διαδοχικών προσομοιώσεων Monte Carlo.

Τέλος, για να ολοκληρώσουμε το προγραμματιστικό πλαίσιο του πρώτου εγχειρήματος μας, δηλαδή αυτού που θα μας δώσει τη δυνατότητα να πραγματοποιήσουμε εύκολα κανονικές προσομοιώσεις (τις αποκαλούμε κανονικές για αναδεικνύεται η διαφορά τους από μια πολυκανονική προσομοίωση η οποία όπως θα δούμε στα επόμενα μπορεί να μας δώσει αποτελέσματα που αντιστοιχούν σε σειρά κανονικών), θα πρέπει να δημιουργήσουμε ένα script που θα αναλάβει να εκτελεί διαδοχικές προσομοιώσεις Monte Carlo σε ένα φάσμα θερμοκρασιών και για διάφορα μεγέθη του πλέγματος ανάλογα με το τις εκάστοτε ανάγκες μας. Όπως ίσως θα αντιληφθείτε σύντομα, το πακέτο STMC διαθέτει διαφορετικά προγράμματα για τον κάθε σκοπό· αν θέλετε να πάρετε μια χρονοσειρά ενέργειας θα πρέπει να μεταγλωττίσετε και να τρέξετε άλλο πρόγραμμα απ' ότι λ.χ για να συλλέξετε ένα ιστόγραμμα ενέργειας. Τα προγράμματα αυτά δέχονται είσοδο από 4 αρχεία παραμέτρων γενικά και αυτά είναι που πρέπει να αλλάζει κανείς πριν ξεκινήσει μια νέα προσομοίωση. Έχουμε 2 (λογικές) επιλογές

1. Να συγκεντρώσουμε όλες τις παραμέτρους σε ένα αρχείο παραμέτρων το οποίο όμως ύστερα θα πρέπει να συμπεριλάβουμε σε όλα τα προγράμματα που τις χρειάζονται (και όπως θα δείτε είναι αρκετά). Αν επιλέξουμε αυτή τη λύση, τότε αρκεί να γράφουμε κάθε φορά μέσα στο αρχείο αυτό τις νέες τιμές παραμέτρων και να μεταγλωττίσουμε εκ νέου τα προγράμματα που μας ενδιαφέρουν.
2. Να χρησιμοποιήσουμε μια επεμβατικής φύσης μέθοδο και να αλλάζουμε τα σημεία μέσα στα 4 αρχεία που αφορούν τις παραμέτρους οι οποίες μας ενδιαφέρουν. Αυτό μπορεί να γίνει με χρήση κάποιων ιδιαίτερα χρήσιμων εργαλείων του Linux όπως η AWK\* ή ο SED†.

Εδώ θα επιλέξουμε τη 2η λύση και ο λόγος είναι βασικά ότι θεωρείται προτιμότερο να αλλάξει η δομή του κώδικα κατά το ελάχιστο δυνατό. Αυτό επιτρέπει στο χρήστη που επιθυμεί να χρησιμοποιήσει το συγκεκριμένο ή - ακόμα ειδικότερα - διαφορετικό κομμάτι του κώδικα που πιθανώς χρησιμοποιεί τα αρχεία παραμέτρων, να μη χρειάζεται να πειράξει τίποτα πριν και μετά την χρήση του script για να επανέλθει στο αρχικό περιβάλλον του πακέτου. Ένας δεύτερος λόγος είναι φυσικά να παρουσιαστούν κάποια χρήσιμα εργαλεία όπως ο SED αλλά και η χρήση των Regular Expressions (οι οποίες υποστηρίζονται πλέον από τα περισσότερα εργαλεία διαχείρισης κειμένου του Linux και σε πολλές περιπτώσεις συρρικνώνουν την προσπάθεια επεξεργασίας κειμένου).

Τέλος θα πρέπει να διαλέξει κανείς και το φλοιό στον οποίο θα δουλεύει το script. Εδώ επιλέγεται ο φλοιός bash ‡ απλώς επειδή είναι η προεπιλογή στο σύστημα που θα τρέξουμε τις προσομοιώσεις και δεν εμφανίστηκε η ανάγκη για χρήση νεότερου φλοιού με περισσότερες δυνατότητες.

Αντιγράφουμε λοιπόν στο φάκελο /STMC/ForProg/ το παρακάτω bash script και ακολουθεί η ανάλυσή του.

---

\*Από τα αρχικά των επωνύμων των δημιουργών της: Alfred Aho, Peter Weinberger, και Brian Kernighan.

†Stream Editor.

‡Bourne-Again Shell: λογοπαίγνιο με βάση το όνομα του Stephen Bourne ο οποίος δημιούργησε τον παλαιότερο βασικό φλοιό sh, Bourne shell, το 1978. Ο Bash δημιουργήθηκε το 1987 από τον Brian Fox.

```

#! /bin/bash
# Invoke as : ./run.sh | tee logfile
# Process priority (max=-20, min=19) and timing :
# sudo nice -n -20 /usr/bin/time ./run.sh | tee logfile
# or use: sudo renice -20 <pid> (during the process)
# Time with: /usr/bin/time ./run.sh
# Canonical MC_Potts parameter files updating for successive runs
# 1. Global backup to folder Backup/
#     (Backup all files at the beginning)
# 2. File backup to "foo.bak"
#     (only the latter instance of the file is saved)

VERBOSE=0 #If set to 1 redirect output from mag.d !!
PRINT_CHANGES=0
#
# ***** Variables ***** #
# Variables
L=40 D=2 Q=10          #lat.par, lat.dat, potts.par
Seed1=1 Seed2=0       #mc.par
#Used only the 1st time, seeds normally updated using 'ranmar.d'

B=0.7130312 H=ZERO NH=1 NEQ=100 #mc.par
NR=32 NM=100 NS=10      #mc.par

Qs=(4 10)
Betas=(0.687 0.694 ... 0.850 0.850 ... 0.694 0.687)
Ls=(10 20 40)

# ***** Arrange Backup folders ***** #
# Global and Previous backup directories.
gdir="./Backup/global"
pdir="./Backup/prev"
# Number of chances to verify the overwriting procedure.
times=0
# Check whether a directory exists or not and overwrite/mkdir.
# Try to use zanity!
if [ -d $gdir -o -d $pdir ]; then
    echo -n "Backup directories already exist. Overwrite? (y/n): "
    read reply
    while [ $reply != "y" -a $reply != "n" -a $times -lt 2 ]; do
        echo -n "(y/n): "
        read reply
        times=$((times+1))
    done
    if [ $times -eq 2 ]; then
        echo "Invalid input, please try again."
        exit 0
    fi
fi

```



Δημιουργία script για εκτέλεση διαδοχικών προσομοιώσεων Monte Carlo.

```
        if [ $reply = "n" ]; then
            echo "Exiting."
            exit 0
        elif [ $reply = "y" ]; then
            echo "Overwriting files."
            # overwrite!
        fi
else
    mkdir Backup; mkdir Backup/global; mkdir Backup/prev;
    echo "Backup directories in place. Writing files."
fi

# ***** #
# Backup original parameter files.
cat lat.par > $gdir/lat.par.bak
cat lat.dat > $gdir/lat.dat.bak
cat potts.par > $gdir/potts.par.bak
cat mc.par > $gdir/mc.par.bak
# Done
# Backup fortran files (updated fortran files, e.g potts_hist.f)
cat potts_hist.f > $gdir/potts_hist.f.bak
# Done

# Create file : seqmc.par : for consecutive mcmc simulations
seq=0
chmod_seq(){
    echo -n "Updating parameter file: seqmc.par"
    echo "$seq"> seqmc.par
    echo " . . . [done]"
}

# Switch to silent mode (lpr=false)
if [ $VERBOSE -eq 0 ];then
    echo -n "Switching to silent mode"
    line=$(cat potts_hist.f | grep "call potts_init")
    #if line.contains 'true' then:
    newline=$(echo "$line" | sed 's/true/false/')
    cat potts_hist.f | sed 's/'"$line"'/'"$newline"'/ ' > tempfile
    mv tempfile potts_hist.f
    echo " . . . [done]"
fi

# ***** Update params *****
# ***** .bak files are moved into ./Backup/prev folder *****
# *****
update_par() {
    echo -n "Updating canonical MCMC parameter files . . . "
    #File: lat.par
```

```

sed -i.bak -e 's/nd=[0-9][0-9]*/nd='$D'/' \
      -e 's/ml=[0-9][0-9]*/ml='$L'/' lat.par
#File: lat.dat
sed -i.bak 's/\/[0-9]*\[0-9]*/\/'$D'*'$L'/' lat.dat
#File: potts.par
sed -i.bak 's/\([^\0-9]*\)[0-9]*/\1'$Q'/' potts.par
#File: mc.par
sed -i.bak -e '6 s/iseed1=[0-9][0-9]*/iseed1='$Seed1'/'
      -e 's/iseed2=[0-9][0-9]*/iseed2='$Seed2'/' \
      -e '14 s/\([^\=]*\)=[^\,]*\([^\=]*\)=[^\,]*\([^\=]*\)=[^\,]*\([^\=]*\) \
          =[\^\\)]*/\1='$B'\2='$H'\3='$NH'\4='$NEQ'/' \
      -e '15 s/\([^\=]*\)=[^\,]*\([^\=]*\)=[^\,]*\([^\=]*\)=[^\^\\)]*/\1='$NR'\
          \2='$NM'\3='$NS'/' mc.par

echo "[done]"
#Move current files' instances to Backup/prev
mv *.par.bak $pdir/; mv *.dat.bak $pdir/
# the last sed command on mc.par is complicated because
# beta could be: beta=0 (number) or beta=ZERO (string)
}

#clear "em.d" if it's already there
if [ -f "em.d" ]; then
    cat em.d > $pdir/em.d.bak
    rm -f em.d
fi
#same for "m.d"
if [ -f "m.d" ]; then
    cat m.d > $pdir/m.d.bak
    rm -f m.d
fi

run(){
    echo -e "*****\nRunning! b=$B L=$L d=$D q=$Q\n*****"
    ./phist > mag.d
    less mag.d | ./jack -j 50 | grep -v '#' | \
        awk -v b=$B -v N=$L*$L '{print b, $1,$2,b*N*$3,b*N*$4}' >> m.d

    ./panal | grep -m 1 "em" | awk -v beta=$B '{print beta, $3,$5}' >> em.d
#if u need energy histograms:
#   echo "plot \"h2d10q020.d\" u 2:4 w his" > hplot.plt
#   echo "pause -1">> hplot.plt
#   gnuplot hplot.plt
}

# Print new files, i.e: status changed less than .5 min ago #
print_changes(){

```

*Δημιουργία script για εκτέλεση διαδοχικών προσομοιώσεων Monte Carlo.*

---

```
    echo "Recently accessed files (updated & backed up):"
    echo "***** Backup files *****"
    find ./ * -name "*.bak" -type f -cmin .5 -exec echo {} \;
    echo "***** Parameter files *****"
    find ./ * -name "*.par" -type f -cmin .5 -exec echo {} \;
    find ./ * -name "*.dat" -type f -cmin .5 -exec echo {} \;
    echo "***** Data files *****"
    find ./ * -name "*.d" -type f -cmin .5 -exec echo {} \;
    echo "***** Scripts *****"
    find ./ * -name "*.sh" -type f -cmin .5 -exec echo {} \;
    #anything else...
}

# Compile main programs for canonical Monte Carlo.
compile(){
    f77 -O -o phist potts_hist.f
    f77 -O -o panal ana_hist.f
}

# **** Run *****
# Seed updated from 'ranmar.d' (ranmar) or 'aaa.seed' (ranlux)
# else use default seed from mc.par .
chmod_seq
for b in ${Betas[@]}
do
    B=$b
    update_par
    compile
    run
    if [ $seq -eq 0 ]; then
seq=1
    fi
#plot histograms or whatever (nothing here).
    chmod_seq
# print_changes
done
# set default
seq=0
chmod_seq
# *****

#echo -e "\a"
#check if betas[] is symmetric around beta_critical
    (useful for the tail command next)
    blen=${#Betas[@]}/2
    if [ $blen -eq 0 ]; then
echo "Not symmetric b array, plot manually."
echo "Exiting."
```

```

exit 0
fi

#prepare gnuplot scripts
echo "set key top left">hyst.plt
echo "plot \"<head -n 17 m.d\" u 1:2:3 w err pt 5, \
      \"<tail -n 17 m.d\" u 1:2:3 w err pt 1">>hyst.plt
echo "pause -1">>hyst.plt
gnuplot hyst.plt

#Magnetic susceptibility (not simultaneously with hyst.plt!)
#echo "plot \"<head -n 17 m.d\" u 1:4:5 w err" > susc.plt
#echo "pause -1">>susc.plt
#gnuplot susc.plt

```

### Ανάλυση του script

Το παραπάνω είναι ένα απλό script το οποίο στην παρούσα εργασία χρησιμοποιείται για την κατασκευή των σχημάτων (4.6),(4.7). Η λειτουργία του έγκειται στην ανανέωση των αρχείων παραμέτρων μιας κανονικής προσομοίωσης Monte Carlo με μια σειρά τιμών, την επαναλαμβανόμενη μεταγλώττιση και κλήση των προγραμμάτων που μας ενδιαφέρουν και τέλος την προετοιμασία κάποιου gnuplot script για γρήγορο σχεδιασμό καμπύλων. Επιτρέπει δηλαδή τη χρήση των βασικών προγραμμάτων για διαδοχικές προσομοιώσεις Monte Carlo σε ένα φάσμα θερμοκρασιών.

Εισαγωγικά μπορείτε να δείτε στα σχόλια των πρώτων γραμμών κάποιους τρόπους κλήσης του· αν πρόκειται να διενεργήσετε μια χρονοβόρα προσομοίωση τότε ίσως ενδιαφέρεστε να μεγιστοποιήσετε την προτεραιότητα της σχετικής διαδικασίας του λειτουργικού ή να τη χρονομετρήσετε. Οι δύο διακόπτες που προστίθενται ακολούθως αφορούν τις πληροφορίες που επιθυμείτε να εμφανίζονται στην κονσόλα κατά το τρέξιμο των προγραμμάτων. Οι πληροφορίες αυτές μπορεί να είναι είτε εκτύπωση των τρεχόντων παραμέτρων (θερμοκρασία, μέγεθος πλέγματος, κατάσταση της γεννήτριας τυχαίων αριθμών κτλ.),ο διακόπτης VERBOSE, είτε πληροφορίες για μεταβολή αρχείων κατά την προσομοίωση, ο διακόπτης PRINT\_CHANGES. Η τελευταία δυνατότητα προστέθηκε για τον εξής λόγο: στον κατάλογο των προγραμμάτων υπάρχουν πολυάριθμα αρχεία Fortran , αρχεία παραμέτρων και δεδομένων και σε μια προσομοίωση θα τροποποιηθούν κάποια από αυτά και θα εμφανιστούν κάποια νέα. Έτσι για να μην ψάχνει κανείς να εντοπίσει τα νέα αρχεία μετρήσεων μπορεί να επιλέξει να εκτυπώνονται· η σχετική μέθοδος είναι η print\_changes(). Στο αμέσως επόμενο κομμάτι δήλωσης μεταβλητών δηλώνονται οι παράμετροι της προσομοίωσης. Στην περίπτωσή μας δε χρειάζεται να πειράξουμε τη θερμοκρασία μιας και αυτή εισάγεται μέσω του πίνακα Betas. Οι άλλοι δύο πίνακες Qs, Ls δε χρησιμοποιούνται για τις ανάγκες της εργασίας αλλά σε μια πιθανή επέκταση του script (για προέκταση μεγέθους συστήματος π.χ) θα ήταν χρήσιμοι. Κατόπιν τακτοποιούνται τα αρχεία που πρόκειται να τροποποιηθούν σε δύο φακέλους ασφαλείας. Ο ένας κρατάει τα αρχικά αρχεία και ο άλλος τα αρχεία στην κατάσταση που βρίσκονταν πριν το ξεκίνημα της αμέσως προηγούμενης προσομοίωσης. Στη συνέχεια δημιουργείται το αρχείο *seqmc.par* που αποτελεί τη σημαία για να καταλαβαίνει το script αλλά και οι ρουτίνες που τρέχουν αν βρισκόμαστε εν μέσω διαδοχικών προσομοιώσεων ή διενεργείται απλά μια (το αρχείο περιέχει απλά το 1 ή το 0). Αμέσως μετά γίνεται χρήση του διακόπτη/σημαίας που αναφέραμε προηγουμένως και αν είναι στο 0 αλλάζουμε με χρήση του sed τη σχετική σημαία flag του προγράμματος (lpr,

i.e: **logical print**). Αυτή η σημαία είναι ορατή από όλες τις ρουτίνες και σηματοδοτεί την εκτύπωση αναλυτικών πληροφοριών. Ως προεπιλογή εδώ την έχουμε στο 0 (όχι εκτύπωση). Στον τομέα ανανέωσης παραμέτρων που έπεται, γίνεται η πιο δυσνόητη εργασία. Εδώ επεμβαίνουμε στα 4 αρχεία παραμέτρων που μας ενδιαφέρουν και αλλάζουμε τις τιμές των παραμέτρων που μεταβάλλονται κατά την ακολουθία προσομοιώσεων. Ο χρήστης δηλαδή αρκείται στην εισαγωγή των επιθυμητών παραμέτρων και του φάσματος θερμοκρασιών, πιο συγκεκριμένα, στον τομέα δηλώσεων στην αρχή το script και η μέθοδος `update_par()` αναλαμβάνει να γράψει τις αλλαγές στα σωστά σημεία των αρχείων (για λεπτομέρειες στη χρήση των εντολών του `sed` και των `regular expressions` που χρησιμοποιούνται, αναζητήστε οδηγούς στο διαδίκτυο). Στο επόμενο κομμάτι διαγράφονται τυχόν υπάρχοντα αρχεία μετρήσεων ενέργειας και μαγνήτισης αφού πρώτα κρατηθεί ένα αντίγραφο ασφαλείας. Οι μέθοδοι `compile()`, `run()` κάνουν τα προφανή: μεταγλωττίζουν τα δύο βασικά για το σκοπό μας προγράμματα και τα τρέχουν αντίστοιχα. Πρόκειται για τα προγράμματα συλλογής κανονικών ιστογραμμάτων και ανάλυσής τους για μέτρηση της μέσης δράσης, ενέργειας και απόλυτης μαγνήτισης. Οι μετρήσεις απόλυτης μαγνήτισης ανακατευθύνονται στο αρχείο *mag.d*, το οποίο και επεξεργαζόμαστε με χρήση της `awk` και του `jack` (για `jackknife` ανάλυση σφαλμάτων) με τα τελικά αποτελέσματα να κατευθύνονται στο αρχείο *m.d*. Οι αντίστοιχες μετρήσεις ενέργειας/δράσης γράφονται στο *em.d*. Η μέθοδος `print_changes()`, που ενεργοποιείται από την ομώνυμη σημαία, εκτυπώνει μετά τη διενέργεια της σειράς προσομοιώσεων τα ονόματα των αρχείων που τροποποιήθηκαν (συμπεριλαμβανομένων και των νεοδημιουργηθέντων βέβαια). Η κατηγοριοποίηση είναι φυσικά αυθαίρετη και καθόλου απαραίτητη.

Το κυρίως κομμάτι του script βρίσκεται υπό τον τίτλο `Run` και απλά καλεί με τη σειρά τις προηγούμενες μεθόδους. Στις τελευταίες γραμμές κατασκευάζονται δύο `gnuplot` scripts για τη δημιουργία της καμπύλης βρόχου υστέρησης και της μαγνητικής επιδεκτικότητας (βλ. τα σχήματα που αναφέρθηκαν στην αρχή της ανάλυσης).

# Κεφάλαιο 3

## Ενδεικτική χρήση του πακέτου STMC

Στο παρόν κεφάλαιο θα παρουσιάσουμε ορισμένες ενδεικτικές χρήσεις της STMC εκτελώντας προσομοιώσεις του μοντέλου Potts (και φυσικά του  $q=2$  Potts που ταυτίζεται με το μοντέλο Ising) στις 2 και 3 διαστάσεις, συγκρίνοντας όπου αυτό είναι δυνατό τα αποτελέσματα της προσομοίωσης με την αναλυτική λύση. Τα αναλυτικά αποτελέσματα δίνονται από το πρόγραμμα `/STMC/ForProg/Ferdinand/ferdinand.f` που στηρίζεται στην εργασία των Ferdinand, Fisher [8] (1989) και τις αναφορές εκεί (για τη μεταγλώττιση του προγράμματος βλ. Παράρτημα Β).

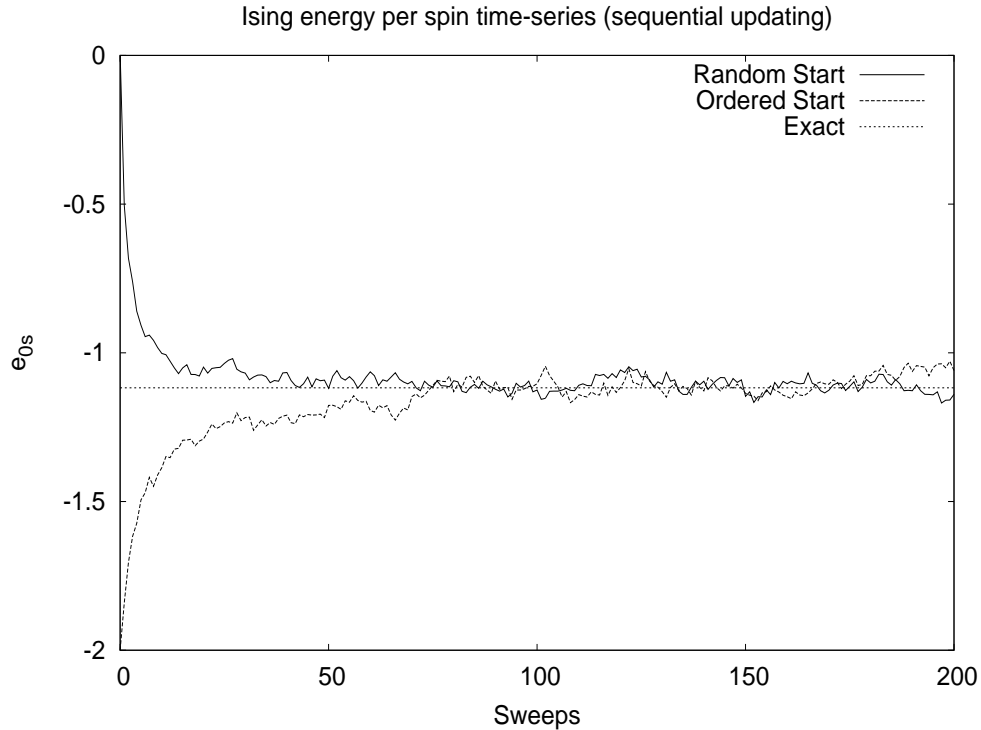
Τονίζουμε ότι όπου χρησιμοποιείται στην εργασία ο όρος *sweep* θα εννοείται **διαπέραση του πλέγματος που επισκέπτεται 1 φορά κάθε πλεγματοειδή θέση**. Για την αναπαραγωγή των σχημάτων παρατίθενται αναλυτικά τα βήματα στο Παράρτημα Β. Τυχόν αποκλίσεις από την ακριβή μορφή τους στο σύγγραμμα του Berg (όταν αυτά υπάρχουν και εκεί) θα οφείλονται στην τρέχουσα κατάσταση της γεννήτριας ψευδο-τυχαίων αριθμών RanMar, ή στη χρήση της εναλλακτικής μας γεννήτριας RanLux. Αν επιθυμείτε πάντως να αναπαράγετε *ακριβώς* κάποιο σχήμα του βιβλίου δεν έχετε παρά να καταργήσετε τις τροποποιήσεις των παραγράφων 2.1, 2.2.

### 3.1 Το μοντέλο $q=2$ Potts (Ising model)

Θα ξεκινήσουμε με την απλή λήψη των χρονοσειρών (time series) της *ενέργειας ανά spin* κάνοντας χρήση αρχικά του περισσότερο δημοφιλούς αλγορίθμου Metropolis.

Για την παραγωγή χρονοσειρών χρησιμοποιούμε το πρόγραμμα `potts_ts.f` το οποίο κάνει χρήση της ρουτίνας `potts_met.f` για την εκτέλεση των sweeps. Το πρόγραμμα λαμβάνει χρονοσειρές της *δράσης* και της *ενέργειας ανά spin* (των οποίων η σχέση μετατροπής είναι η (1.19)) για “ψυχρό” και “θερμό” ξεκίνημα. Στο σχήμα (3.1) παρουσιάζονται οι χρονοσειρές μαζί με την ακριβή μέση τιμή και μπορούμε από αυτό να κάνουμε μια πρόχειρη εκτίμηση για τον αριθμό των sweeps για να φτάσει το σύστημα σε ισορροπία, που εδώ μπορούμε να θεωρήσουμε ως τα 100 πρώτα. Θα επαναλάβουμε τώρα τη διαδικασία με το πρόγραμμα παραγωγής χρονοσειρών `potts_met_r.f`, το οποίο κάνει επίσης χρήση του αλγορίθμου Metropolis, όχι όμως με διαδοχικό πέρασμα των spin του πλέγματος (sequential updating) αλλά με τυχαία επιλογή τους κατά τη διάρκεια του sweep. Καταρχάς είναι σαφές ότι η ρουτίνα καταναλώνει περισσότερο υπολογιστικό χρόνο αφού χρειάζεται να υπολογίζει έναν τυχαίο αριθμό ανά sweep (μια σύγκριση καθαρά υπολογιστικού χρόνου μπορεί να γίνει με το πρόγραμμα `/bin/time` του Linux). Οι χρονοσειρές φαίνονται στο σχήμα (3.2) και πέραν της παραπάνω παρατήρησης παρατηρεί κανείς ότι με μια πρώτη ματιά δεν είναι δυνατό να συγκρίνει την απόδοση των δύο τύπων διαπέρασης του πλέγματος. Παρακάτω επιχειρείται μια σύγκριση μέσω μέτρησης του ολοκλη-

ρωμένου χρόνου αυτοσυσχετισμού. Ακολούθως θα τρέξουμε μια κανονική προσομοίωση



Σχήμα 3.1: Χρονοσειρές 200 sweeps της ενέργειας ανά spin για “θερμό” και “ψυχρό” ξεκίνημα στο μοντέλο Ising (random/ordered start αντίστοιχα). Πλέγμα  $80 \times 80$ , θερμοκρασία  $\beta = 0.4$ , διαδοδική ανανέωση πλεγματοκινών θέσεων. Η ευθεία γραμμή παριστάνει την ακριβή μέση τιμή  $e_{0s} = -1.10608$ .

Monte Carlo για να μετρήσουμε τη μέση τιμή της ενέργειας ανά spin στο  $2d$  Ising μοντέλο. Θέτουμε τη θερμοκρασία στο  $\beta = 0.4$  και χρησιμοποιούμε πλέγμα  $20 \times 20$ . Η στατιστική μας είναι 10000 sweeps για επίτευξη ισορροπίας και  $64 \times 5000$  sweeps μετρήσεων<sup>†</sup>. Με αυτή την επιλογή παραμέτρων τροποποιούμε τα βασικά αρχεία παραμέτρων `lat.dat`, `lat.par`, `potts.par`, `mc.par` και μεταγλωττίζουμε τα προγράμματα `potts_hist.f` και `ana_hist.f`. Η προσομοίωση διενεργείται με χρήση και των δύο γεννητριών τυχαίων αριθμών και τα αποτελέσματα για τη μέση τιμή της ενέργειας ανά spin και του χρόνου χρήσης του επεξεργαστή (στην παρένθεση) είναι

$$\bar{e}_{0s} = -1.11718 \pm 0.00134 \quad (\text{RanMar} : 14.14\text{user sec})$$

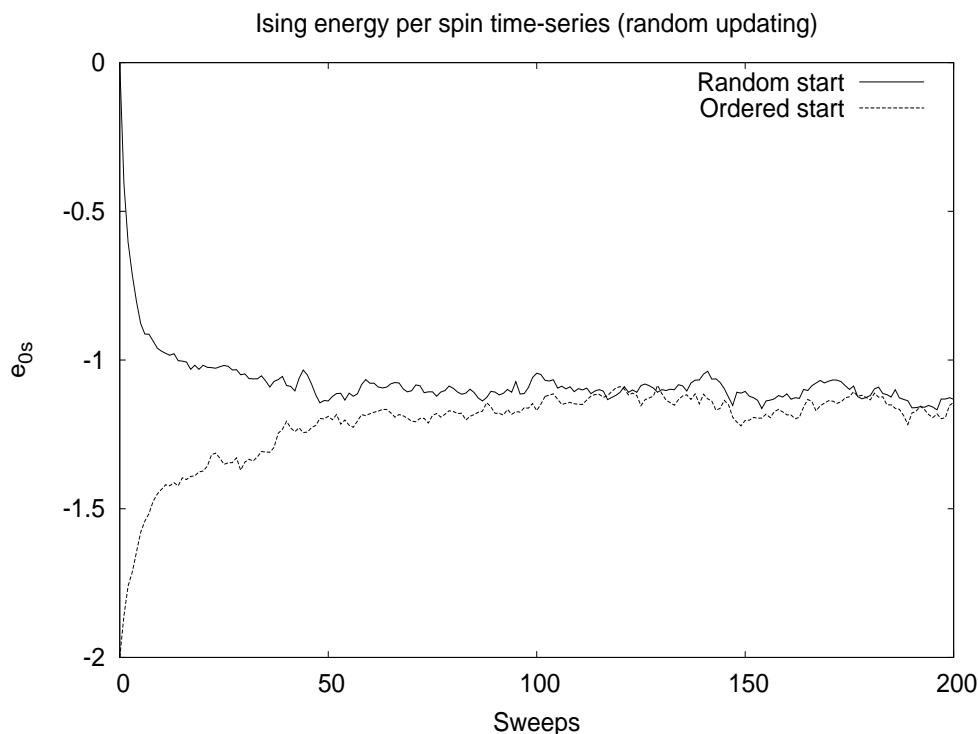
και

$$\bar{e}_{0s} = -1.11692 \pm 0.00138 \quad (\text{RanLux Level 4} : 111.98\text{user sec})$$

με την ακριβή τιμή να δίνεται στο [8]

$$\bar{e}_s = -1.117834$$

<sup>†</sup> **Προσοχή:** το γεγονός ότι στο αρχείο `mc.par` τα sweeps μετρήσεων εκφράζονται ως γινόμενα (πλήθος επαναλήψεων)  $\times$  (πλήθος μετρήσεων) δεν είναι τυχαίο. Το πλήθος επαναλήψεων αντιστοιχεί σε πλήθος bins ενώ το πλήθος μετρήσεων σε μέγεθος bin, καθορίζουν επομένως καταλυτικά τη στατιστική της προσομοίωσης.



Σχήμα 3.2: Όπως το σχ. (3.1) αλλά με Metropolis τυχαίας επιλογής spin. Ο υπολογιστικός χρόνος αυξάνεται ενώ προς το παρόν δε φαίνεται κάποιο χαρακτηριστικό που να επιτρέπει τη σύγκριση των δύο αλγορίθμων.

Ας μεταγλωττίσουμε τώρα πάλι το πρόγραμμα `potts_hist.f`, αυτή τη φορά στην εξελιγμένη του μορφή όπως διαμορφώθηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο ώστε να μετράει και την απόλυτη μαγνήτιση. Ανακατευθύνουμε την έξοδο των μετρήσεων μαγνήτισης στο αρχείο `mag.d` και υπολογίζουμε τη μέση τιμή και το σφάλμα με το πρόγραμμα `jack` που αναλαμβάνει την ανάλυση `jackknife`. Με την εντολή

```
./jack -j 64 -n 400 mag.d
```

με 64 jack bins και με κανονικοποίηση ανά πλεγματική θέση, παίρνουμε

$$\langle |M| \rangle / N = 0.31665 \pm 0.00623$$

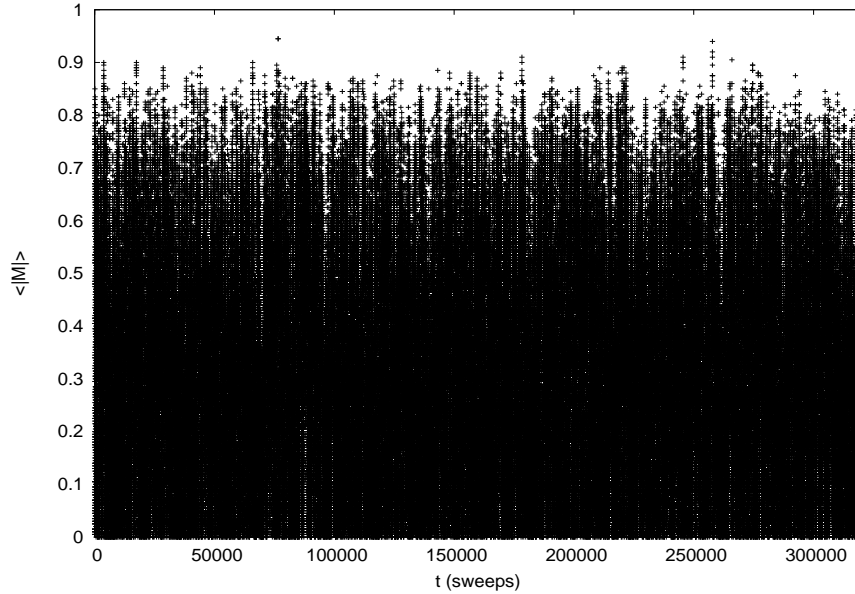
Η χρονοσειρά της παραπάνω μέτρησης παρουσιάζεται στο σχήμα (3.3). Ομοίως ρυθμίζουμε τα αρχεία παραμέτρων για το 3d Ising μοντέλο σε πλέγμα  $14 \times 14 \times 14$  στη θερμοκρασία  $\beta = 0.22165$  η οποία είναι πολύ κοντά στο κρίσιμο σημείο του ορίου  $L \rightarrow \infty$ . Με τα προεπιλεγμένα seeds του πακέτου STMC παίρνουμε

$$\bar{e}_{0s} = -1.0427 \quad vs \quad \bar{e}_{0s} = -1.04369$$

με το δεύτερο αποτέλεσμα να δίνεται ακριβώς στο [Αλες et al. (1990)]. Με ανάλογη ρύθμιση των παραμέτρων μπορούμε να συλλέξουμε το ιστόγραμμα του 3d  $q = 3$  Potts μοντέλου στην ψευδοκρίσιμη θερμοκρασία  $\beta = 0.275229525$ . Επαναλαμβάνουμε την προηγούμενη διαδικασία και με τις 2 γεννήτριες ψευδοτυχαίων αριθμών και παίρνουμε τις μέσες τιμές για τη δράση και την ενέργεια ανά spin

$$\bar{e}_{0s} = -1.39748 \pm 0.01207 \quad (RanMar : 1269.94user \text{ sec})$$





Σχήμα 3.3: Χρονοσειρά απόλυτης μαγνήτισης ανά spin στο 2d Ising μοντέλο σε θερμοκρασία  $\beta = 0.4$  και πλέγμα  $20 \times 20$ . Έγιναν 10000 sweeps για ισορροπία και  $64 \times 5000$  sweeps μετρήσεων.

$$actm = 0.566247195 \pm 0.002013040 \quad (RanMar)$$

$$\bar{e}_{0s} = -1.41327 \pm 0.01265 \quad (RanLux \text{ Level } 4 : 9005.50user \text{ sec})$$

$$actm = 0.56887 \pm 0.00210 \quad (RanLux)$$

και βρίσκονται σε συμφωνία με τη βιβλιογραφία. Το αντίστοιχο ιστόγραμμα παρουσιάζεται στο σχήμα (4.4) επόμενου κεφαλαίου στα πλαίσια της παρουσίασης της πολυκανονικής μεθόδου.

### 3.2 Το 2d μοντέλο $q = 4, 10$ Potts

Με παρόμοιο τρόπο μπορούμε να διαλέξουμε τα  $q, d$  για την περίπτωση που μας ενδιαφέρει και να αλλάξουμε απλά τα αρχεία παραμέτρων. Συνοπτικά παρατίθενται τα αποτελέσματα προσομοίωσης για το  $q = 4$  και  $q = 10$  Potts στις δύο διαστάσεις.

Για την πρώτη περίπτωση σε  $\beta = 0.53361$  εκτελούμε 400000 sweeps για ισορροπία και  $64 \times 200000$  sweeps μετρήσεων. Η μέση τιμή της δράσης προκύπτει

$$actm = 0.646057 \quad vs \quad actm = 0.64604$$

με τη δεύτερη τιμή να είναι αποτέλεσμα μέτρησης πολύ υψηλής στατιστικής σε πλέγμα  $120 \times 120$  [Caselle et al. (1999)].

Τέλος στο  $q = 10$  Potts με χρήση και πάλι του αλγόριθμου Metropolis σε  $\beta = 0.62$  με 40000 sweeps για ισορροπία και  $64 \times 20000$  sweeps μετρήσεων, υπολογίζουμε για εξακρίβωση κυρίως

$$actm = 0.321772$$

### 3.3 Μέτρηση χρόνου αυτοσυσχετισμού

Στο κεφάλαιο 1 αναφερθήκαμε στην ύπαρξη αυτοσυσχετισμών στις χρονοσειρές δεδομένων από μια αλυσίδα Markov και είδαμε κάποιες μεθόδους που μας εξασφαλίζουν πρακτικά ανεξάρτητες μετρήσεις. Θα ξεκινήσουμε με ένα παράδειγμα υπολογισμού της συνάρτησης αυτοσυσχετισμού και του ολοκληρωμένου χρόνου αυτοσυσχετισμού για δεδομένα που παράγονται από μια διαδικασία Metropolis για παραγωγή κανονικά κατανομημένων δεδομένων.

Θεωρούμε τη διαδικασία Markov

$$x' = x + 2\alpha x^r - a$$

με  $x$  το γεγονός υπό επεξεργασία,  $x^r$  έναν ομοιόμορφα κατανομημένο τυχαίο αριθμό στο  $[0, 1]$  και  $\alpha > 0$  μια παράμετρος που σχετίζεται με την απόδοση του αλγορίθμου. Ένα νέο γεγονός  $x'$  γίνεται δεκτό με την πιθανότητα Metropolis

$$P_{accept}(x') = 1, \quad \text{αν } x'^2 \leq x^2$$

και

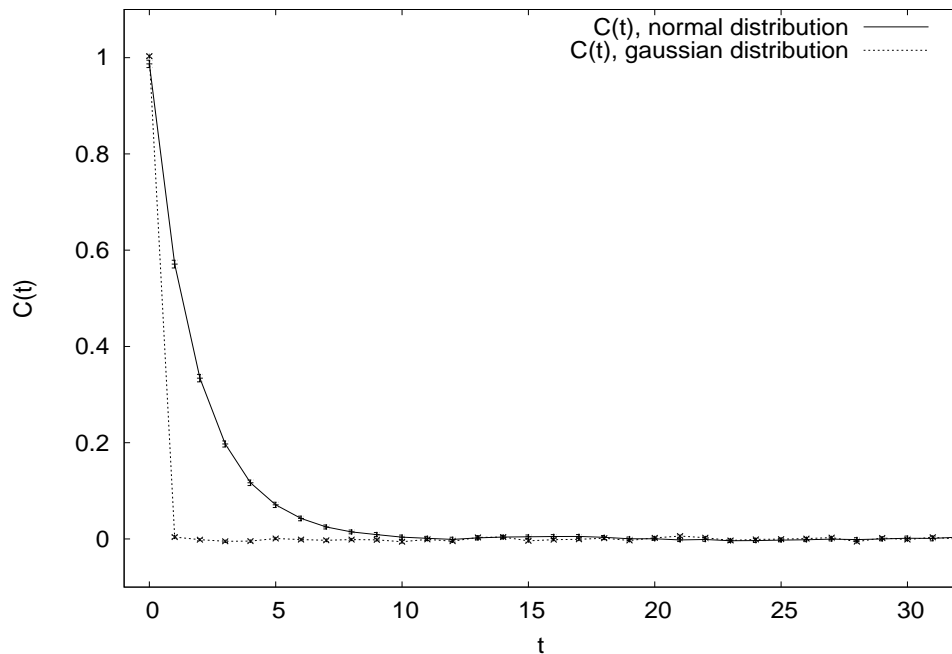
$$P_{accept}(x') = \exp[-(x'^2 - x^2)/2], \quad \text{αν } x'^2 > x^2.$$

Αν το  $x'$  απορριφθεί, τότε το  $x$  καταμετράται ξανά· έτσι η διαδικασία Metropolis εισάγει έναν χρόνο αυτοσυσχετισμού.

Διαλέγοντας την παράμετρο  $\alpha = 3$  (που έχει εξακριβωθεί να δίνει λόγο αποδοχής  $\sim 50\%$ ) και για  $K = 17$  - ακολουθώντας το συμβολισμό του κεφαλαίου 1 - χρησιμοποιούμε τα προγράμματα παραγωγής δεδομένων που αναφέρονται στο Παράρτημα Β για να κατασκευάσουμε το σχήμα (3.4). Παρατηρούμε ότι η συνάρτηση αυτοσυσχετισμού για τα τυχαία γκαουσιανά δεδομένα, όπως αναμένεται, κινείται εξ' αρχής γύρω από το μηδέν. Αυτό δείχνει ότι τα δεδομένα είναι ασυσχέτιστα. Αντίθετα, τα δεδομένα της διαδικασίας Metropolis χρειάζονται κάποιο χρόνο (εδώ περίπου 10 sweeps) ώστε να μειωθεί επαρκώς ο αυτοσυσχετισμός τους. Αυτό σημαίνει ότι αν κάνουμε μια μέτρηση πάνω σε κάποιο γεγονός της ακολουθίας Markov που εξετάζουμε, θα πρέπει να περιμένουμε κάποιο χρόνο ( $\sim \tau_{int}$ ) ώστε να επαναλάβουμε μια αξιόπιστη μέτρηση. Δηλαδή η διαδικασία της μέτρησης καθιστά αναξιόπιστα τα επόμενα γεγονότα για το χρόνο αυτό.

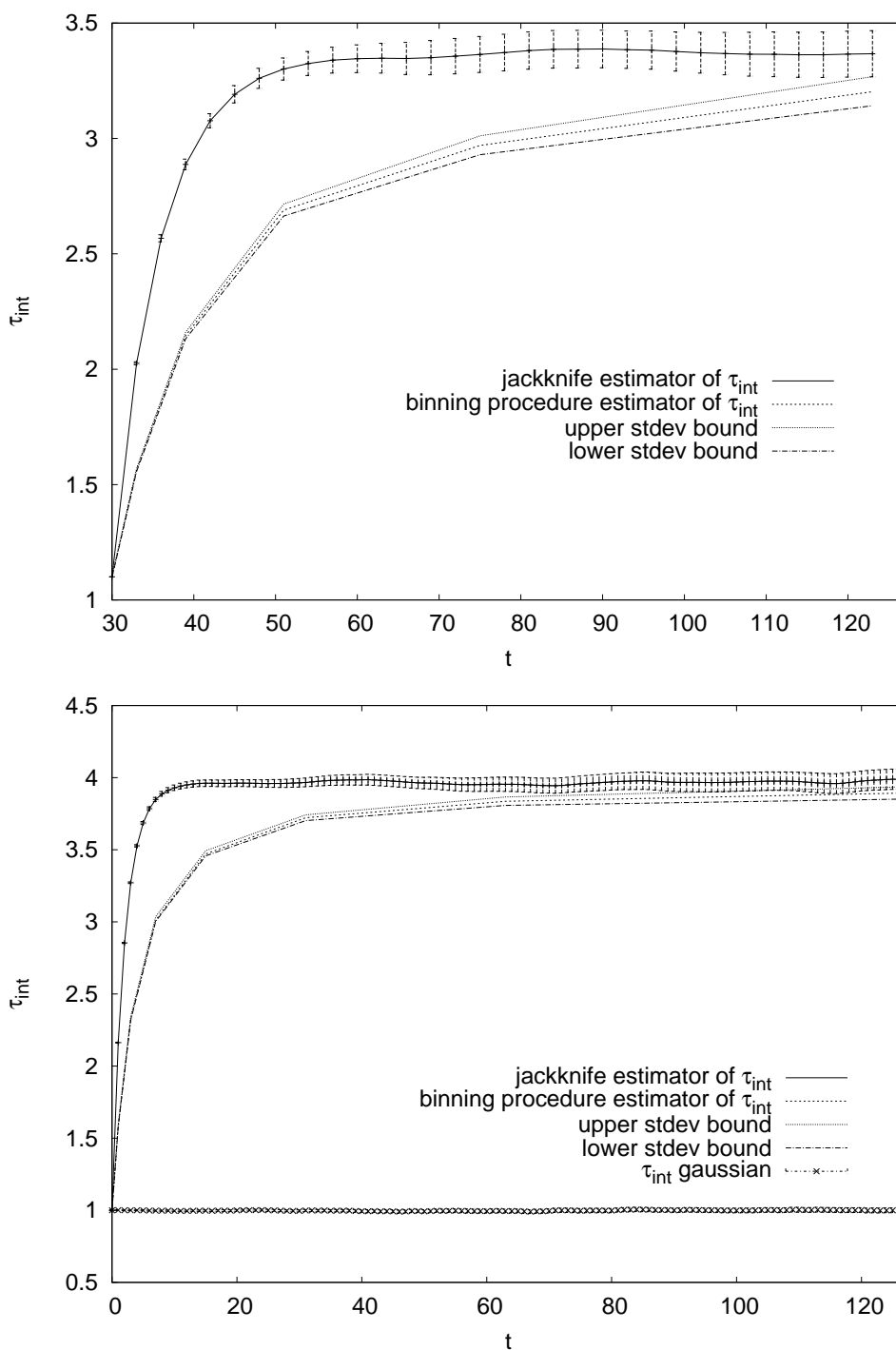
Εν συνεχεία υπολογίζεται ο ολοκληρωμένος χρόνος αυτοσυσχετισμού για  $K = 17$ , σε αντιστοιχία με το προηγούμενο σχήμα, και η ακραία περίπτωση  $K = 21$  για να εξακριβωθεί η συμπεριφορά του  $\tau_{int}$  σε οριακές περιπτώσεις. Το αποτέλεσμα παρουσιάζεται στο σχήμα (3.5). Τα σημεία της πάνω καμπύλης και στις δύο περιπτώσεις προκύπτουν από τον ακριβή υπολογισμό του  $\tau_{int}$  μέσω της σχέσης (1.17) και τα σημεία που αντιστοιχούν στην οριζόντια καμπύλη στο  $\tau_{int} \approx 1$  είναι ο ολοκληρωμένος χρόνος αυτοσυσχετισμού των τυχαίων γκαουσιανών αριθμών. Όπως φαίνεται από το πρώτο sweep τα δεδομένα αυτά μπορεί να θεωρηθούν ασυσχέτιστα. Τέλος, οι καμπύλες στο κάτω μέρος των σχημάτων παριστάνουν τον εκτιμητή του  $\tau_{int}$  όπως προκύπτει από τη διαδικασία binning. Οι περιβάλλουσες της κεντρικής καμπύλης αποτελούν το άνω και κάτω όριο σε μια τυπική απόκλιση.

Θα επιστρέψουμε τώρα στο ερώτημα που ανέκυψε στην αρχή του κεφαλαίου, αν δηλαδή είναι πιο αποδοτική η διαδοχική ανανέωση των spin ή τυχαία (sequential vs random updating). Για να αποφανθούμε θα κάνουμε μια μέτρηση του ολοκληρωμένου χρόνου αυτοσυσχετισμού στο

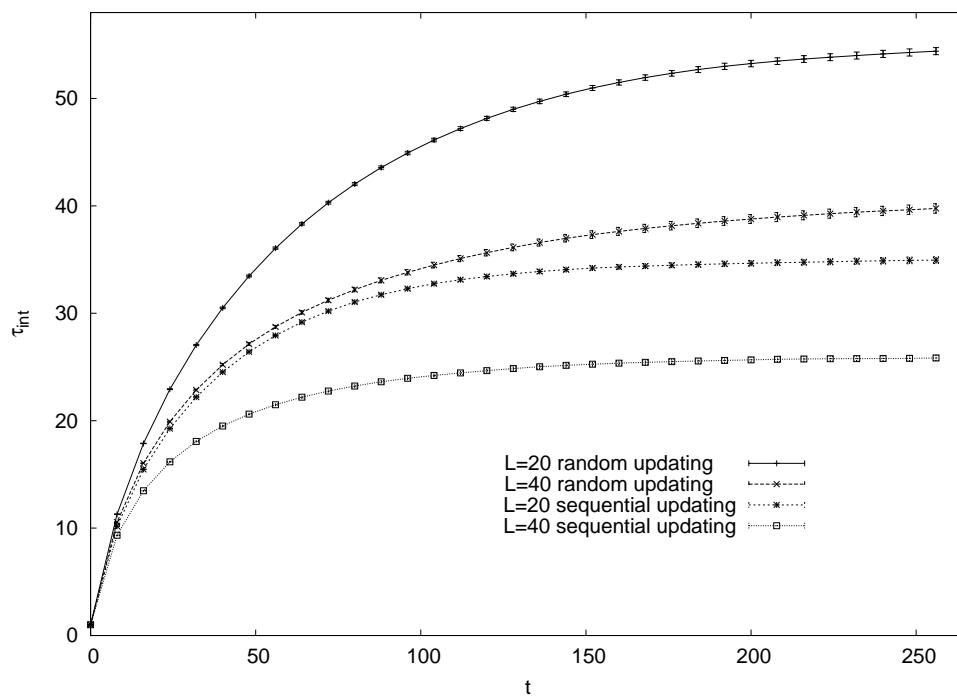


Σχήμα 3.4: Η συνάρτηση αυτοσυσχετισμού της χρονοσειράς Metropolis για την κανονική κατανομή μαζί με εκείνη μιας γκαουσιανής γεννήτριας τυχαίων αριθμών (κάτω). Το σχήμα αναπαράχθηκε όπως εμφανίζεται στο [4].

Ising μοντέλο και σε πλέγμα  $20 \times 20$  και  $40 \times 40$  στη  $\beta = 0.4$  χρησιμοποιώντας τα αντίστοιχα προγράμματα παραγωγής χρονοσειρών διαδοχικής και τυχαίας αναβάθμισης. Στο σχήμα (3.6) παρατηρούμε την υπεροχή της διαδοχικής αναβάθμισης του πλέγματος έναντι της τυχαίας. Παρόλο που οι καμπύλες των ολοκληρωμένων χρόνων αυτοσυσχετισμού δεν έχουν φτάσει ακόμα σε plateau, δεν αναμένεται να αλλάξει η σχετική τους διάταξη και άρα το συμπέρασμά μας είναι ασφαλές. Επίσης παρατηρείται η αύξηση του  $\tau_{int}$  με το  $L$ , κάτι που εξακριβώνεται και αν εφαρμόσετε τα προγράμματα του συνοδευτικού κώδικα για διάφορα μεγέθη πλέγματος.



Σχήμα 3.5: Ο ολοκληρωμένος χρόνος αυτοσυσχετισμού της διαδικασίας Metropolis που εξετάζεται. **Πάνω:** Μεγάλο πλήθος δεδομένων ( $K=21$ ), απευθείας υπολογισμός και μέθοδος binning για τον  $\tau_{int}$ . Επίσης φαίνεται κάτω ο  $\tau_{int}$  για τυχαίους γκαουσιανούς αριθμούς. **Κάτω:** Πλήθος δεδομένων όπως στο σχ. (3.4),  $K=17$ . Το σχήμα αναπαράχθη με το STMC όπως εμφανίζεται στο [4].



Σχήμα 3.6: Σύγκριση των δύο τρόπων αναβάθμισης του πλέγματος μέσω του ολοκληρωμένου χρόνου αυτοσυσχετισμού. Η εφαρμογή έγινε στο μοντέλο Ising 2 διαστάσεων στη θερμοκρασία  $\beta = 0.4$ . Το σχήμα αναπαράχθη με το STMC όπως εμφανίζεται στο [4].

# Κεφάλαιο 4

## Η πολυκανονική συλλογή

### 4.1 Η ανάγκη για μια νέα προσέγγιση στα βάρη

Κατά τη μελέτη συστημάτων που παρουσιάζουν μεταβάσεις φάσης 1ης τάξης (που είναι η περίπτωση στην παρούσα εργασία), ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει η εξέταση της συμπεριφοράς μεγεθών στη μεταβατική περιοχή. Στις κανονικές προσομοιώσεις Monte Carlo (canonical simulations), οι συνήθεις αλγόριθμοι δειγματοληπτούν στο χώρο των καταστάσεων του συστήματος (configurations) με τα βάρη Boltzmann:

$$p \propto e^{-\beta E} \quad (4.1)$$

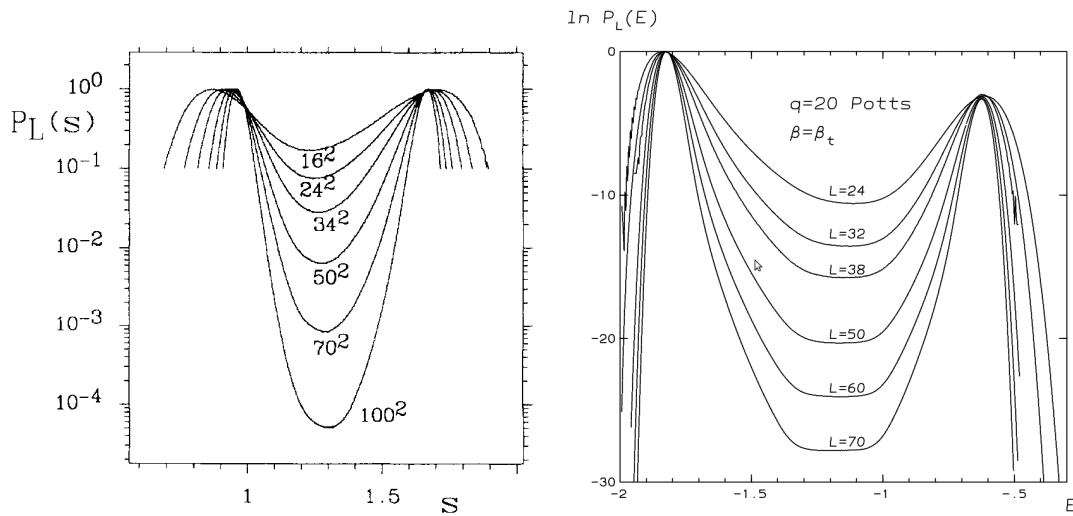
τα οποία είναι βέβαια *a-priori* γνωστά. Όμως, για συστήματα με μετάβαση φάσης 1ης τάξης η επιλογή αυτή δημιουργεί σοβαρά προβλήματα στην ακρίβεια των μετρήσεων στην περιοχή της μετάβασης. Για να γίνει σαφές το πρόβλημα και τα χαρακτηριστικά του εκείνα που οδήγησαν στην κατασκευή νέων μεθόδων πέραν των συμβατικών Monte Carlo προσομοιώσεων, παραθέτουμε κάποια παραδείγματα που αναδεικνύουν την ισχυρή καταστολή στην οποία υπόκεινται οι μεταβατικές καταστάσεις σε μια μετάβαση φάσης 1ης τάξης <sup>†</sup>.

Για  $q = 10$  το μοντέλο Potts εμφανίζει μετάβαση φάσης 1ης τάξης στην κρίσιμη θερμοκρασία  $\beta_t = 1/2 \ln(1 + \sqrt{10}) = 0.7130312$  και στο σχήμα 4.1 παρουσιάζεται το *ιστόγραμμα δράσης* όπως αυτό εμφανίστηκε στην εργασία των [B.A.Berg, T.Neuhaus (1991)][6]. Στο ίδιο σχήμα παρουσιάζεται και η παρόμοια δομή διπλής κορυφής (doubly-peaked) του *ιστογράμματος ενέργειας ανά spin* στο  $q = 20$  Potts για  $\beta_t = 1/2 \ln(1 + \sqrt{20}) = 0.849834512$ , όπως εκείνη εμφανίστηκε στην εργασία των [A.Billoire, T.Neuhaus, B.A.Berg (1993)][7]. Παρατηρεί κανείς ότι οι ενδιάμεσες καταστάσεις καταπιέζονται όλο και περισσότερο με την αύξηση του μεγέθους του πλέγματος και επιπλέον από κάποιο  $L$  και ύστερα, για  $q = 20$ , εμφανίζεται μια επίπεδη περιοχή (plateau<sup>‡</sup>) η οποία διαπλατύνεται με το  $L$ . Στα σχήματα 4.2 και 4.3 παρουσιάζουμε δύο ατνίστοιχα ιστογράμματα όπως επιχειρήσαμε να αναπαράγουμε με χρήση του πακέτου STMC, εκείνα για  $q = 4, 10$ . Η στατιστική μας είναι

- $q = 10$  : 100000 sweeps για ισορροπία και  $64 \times 100000$  sweeps μετρήσεων. Η απόκλιση οφείλεται στην αρκετά χειρότερη στατιστική μιας και οι προσομοιώσεις είχαν ήδη γίνει αρκετά χρονοβόρες για τις προδιαγραφές του συστήματος (τα ίδια συμπεράσματα όμως

<sup>†</sup>Για μια συνοπτική και αρκετά παιδαγωγική παρουσίαση ο αναγνώστης παραπέμπεται και στις σημειώσεις του Kari Rummukainen στην ιστοσελίδα του [16] και εκείνες του Kai Nordlund στην ιστοσελίδα [15] που θα βρείτε και σε σύνδεσμο της προηγούμενης.

<sup>‡</sup>Μια ενδιαφέρουσα σχετική παρατήρηση είναι ότι αυτή η συμπεριφορά μπορεί να ενισχυθεί με χρήση πλεγμάτων με επιμηκυμένη τη μια διάσταση [9]. Με τον τρόπο αυτό η επίπεδη περιοχή διευρύνεται και γίνεται πιο εύκολος ο υπολογισμός του  $P_{min}$ .



Σχήμα 4.1: **Αριστερά:**  $P_L(\beta_t, S)$  για επιλεγμένα  $L$  στο 2d 10–state Potts. Η κλίμακα είναι λογαριθμική και τα μέγιστα είναι κανονικοποιημένα στο 1. **Δεξιά:**  $\ln P_L(\beta_t, E)$  για επιλεγμένα  $L$  στο 2d 20–state Potts.

εξάγονται και από αυτά). Παρατίθενται επίσης και τα διαγράμματα χρόνου εκτέλεσης του προγράμματος συλλογής των ιστογραμμάτων συναρτήσεως του  $L$ .

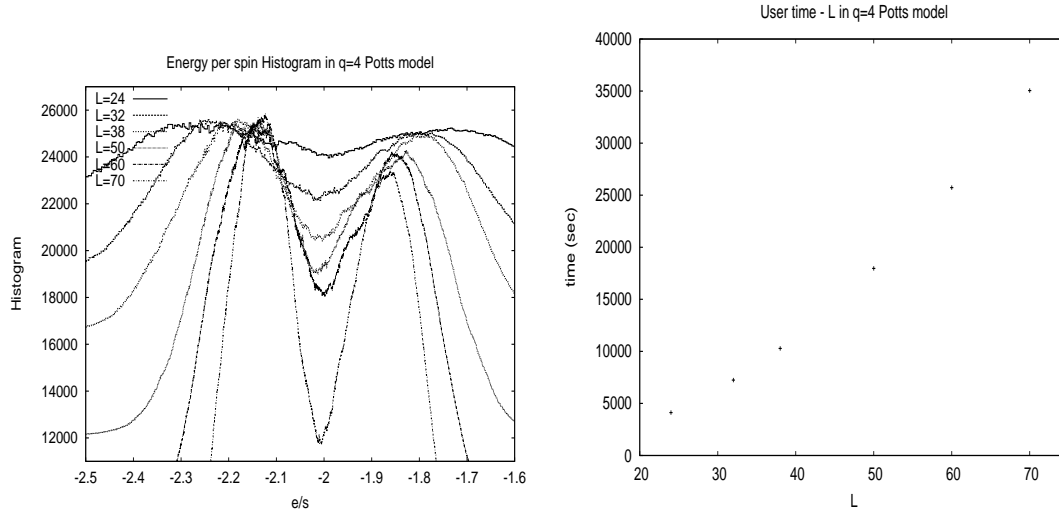
- $q = 4$  : 400000 sweeps για ισορροπία και  $64 \times 200000$  sweeps μετρήσεων.

Στις 3 διαστάσεις, αναπαράγοντας ιστόγραμμα του [4] κάνοντας χρήση του συνοδευτικού κώδικα Fortran, τρέχουμε την προσομοίωση για το 3d 3-state Potts μοντέλο χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο 1-hit Metropolis στη θερμοκρασία  $\beta = 0.275229525$  σε πλέγμα  $24^3$ . Αφήνουμε 20000 περάσματα (sweeps) για να φτάσει το σύστημα στην ισορροπία και κατόπιν εκτελούμε  $64 \times 10000$  περάσματα για να πάρουμε μετρήσεις. Βάσει αυτών, κατασκευάζουμε το *ιστόγραμμα δράσης* του σχήματος (4.4). Παρατηρείστε ότι οι δύο κορυφές δεν είναι ισοϋψείς και για το λόγο αυτό μιλάμε για *ψευδοκρίσιμη θερμοκρασία*: η κρίσιμη είναι εκείνη που αντιστοιχεί σε  $P_{max}^1 = P_{max}^2$  (βλ. σχήμα 4.1).

## 4.2 Η πολυκανονική μέθοδος

Η ιδέα ότι μπορούν να διενεργηθούν προσομοιώσεις Monte Carlo με *a-priori άγνωστα* βάρη υπήρχε από τη δεκαετία του 70' όταν η εργασία των [G.M. Torrie, J.P. Valleau (1977)][19] πρότεινε τη μέθοδο Umbrella Sampling. Η ευρύτερη ιδέα επανεφευρέθηκε και στα επόμενα χρόνια αλλά μόνο για πολύ εξειδικευμένες περιπτώσεις και έγινε τελικά ευρέως αποδεκτή με τη δουλειά των Berg και Neuhaus [5][6]. Έκτοτε χρησιμοποιείται με αυξανόμενο ρυθμό σε διάφορα πεδία της έρευνας όπως η Φυσική, η Χημεία και η Δομική Βιολογία.

Αυτό που τελικά πετυχαίνει κανείς με μια πολυκανονική προσομοίωση είναι να πάρει κανονικές αναμενόμενες τιμές (με τον όρο κανονικές εννοούνται αυτές που προκύπτουν από συμβατικές/κανονικές προσομοιώσεις Monte Carlo) που αντιστοιχούν σε ένα φάσμα θερμοκρασιών. Κάτι τέτοιο δεν είναι δυνατό μέσα από μια κανονική προσομοίωση, κατά την οποία μπορεί κανείς να κάνει μετρήσεις μόνο για ένα συγκεκριμένο  $T$  και με χρήση τεχνικών αναζύγισης να παρεκτείνει (extrapolate) τα αποτελέσματα σε μια μικρή περιοχή της θερμοκρασίας αυτής.



Σχήμα 4.2: **Αριστερά:**  $P_L(\beta_t, e/s)$  για επιλεγμένα  $L$  στο 2d 4-state Potts. **Δεξιά:** Μέτρηση χρόνου εκτέλεσης User Time όπως δίνεται από το `/usr/bin/time` συναρτήσεϊ του αντίστοιχου μεγέθους πλέγματος. Παρατίθεται αντί πίνακα, χωρίς φυσική σημασία. Έγιναν 100000 sweeps για ισορροπία και  $32 \times 100000$  sweeps μετρήσεων.

Παρ' όλο που είχε εμφανιστεί η ανάγκη για ανάπτυξη μιας νέας τεχνικής, ένα τυχερό... ατύχημα βοήθησε την ταχεία αποδοχή της πολυκανονικής μεθόδου. Συγκεκριμένα, στο  $2d$   $q = 7$  μοντέλο Potts είχαν υπολογιστεί σε δύο διαφορετικές εργασίες εκτιμητές της επιφανειακής τάσης οι οποίοι διέφεραν κατά μια ολόκληρη τάξη μεγέθους: στη μία με συμβατικό Monte Carlo και στην άλλη με την πολυκανονική μέθοδο. Όμως την ίδια χρονιά και λίγο καιρό αφ' ότου είχαν ολοκληρωθεί οι προσομοιώσεις, εξήχθησαν οι ακριβείς τιμές για τις επιφανειακές τάσεις στο  $2d$   $q - state$  Potts. Τα ακριβή αποτελέσματα βρέθηκαν σε εξαιρετική συμφωνία με εκείνα από την πολυκανονική προσομοίωση και αυτό έδωσε σημαντική ώθηση στη νέα μέθοδο.

Μια διεξοδική ανασκόπηση της μεθόδου σε αρκετά σημεία της οποίας στηρίζεται και η παρακάτω παρουσίαση μπορεί να βρει ο αναγνώστης στο [2]. Ως γνωστόν οι κανονικές προσομοιώσεις Monte Carlo δειγματοληπτούν στο χώρο των μικροκαταστάσεων με το βάρος Boltzmann την μικροκατάστασης ( $k$ )

$$\hat{w}_B(k) = w_B(E^{(k)}) = e^{-\beta E^{(k)}} \quad (4.2)$$

όπου  $E^{(k)}$  η ενέργεια της μικροκατάστασης και  $\beta = 1/T$  η παράμετρος θερμοκρασίας σε μονάδες  $k_B = 1$ . Τότε

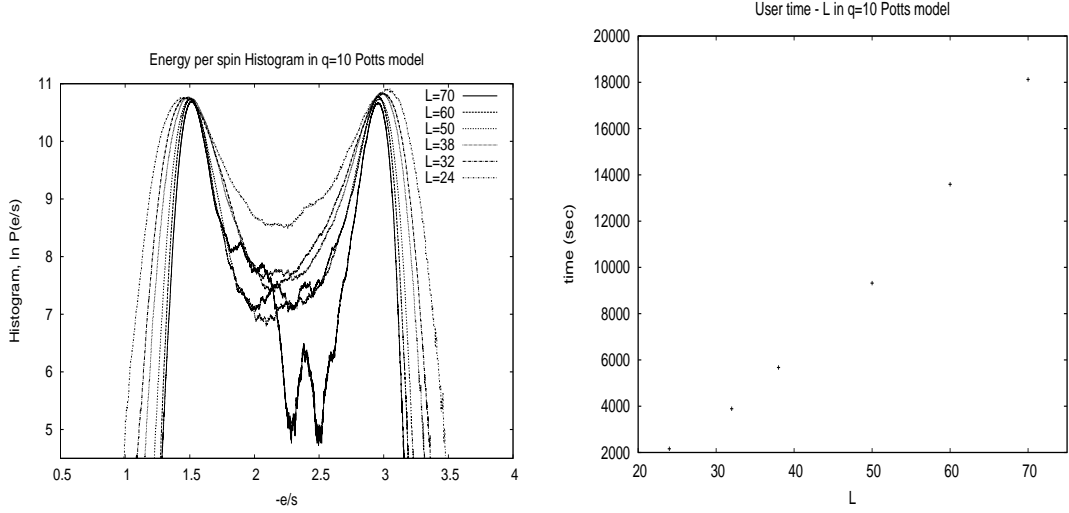
$$P(E) = c_B w_B(E) = c_B n(E) e^{-\beta E} \quad (4.3)$$

όπου  $n(E)$  η φασματική πυκνότητα μικροκαταστάσεων και η σταθερά εξασφαλίζει τη συνθήκη κανονικοποίησης για την κατανομή πιθανότητας.

Έστω  $L$  το μέγεθος του πλέγματος έτσι ώστε πλέγμα μήκους  $L$  να αποτελείται από  $L^d$  spins. Όπως συμβαίνει και στο σχήμα (4.4) σε μεταβάσεις φάσης 1ης τάξης υπάρχουν ψευδοκρίσιμες θερμοκρασίες  $\beta_c^{ps}(L)$  για τις οποίες το ιστόγραμμα ενέργειας σχηματίζει μια δομή διπλής κορυφής και υπάρχει κάποια τιμή  $\beta_c(L)$  για την οποία οι δύο κορυφές γίνονται ισοψείς

$$E_{max}^1 < E_{max}^2 \rightarrow P(E_{max}^1) = P(E_{max}^2)$$





Σχήμα 4.3: **Αριστερά:**  $\ln P_L(\beta_t, e/s)$  για επιλεγμένα  $L$  στο 2d 10–state Potts. **Δεξιά:** Μέτρηση χρόνου εκτέλεσης User Time όπως δίνεται από το `/usr/bin/time` συναρτήσεϊ του αντίστοιχου μεγέθους πλέγματος. Παρατίθεται αντί πίνακα, χωρίς φυσική σημασία. Έγιναν 500000 sweeps για ισορροπία και  $32 \times 500000$  sweeps μετρήσεων.

Τέτοια παραδείγματα παρουσιάζονται στα σχήματα (4.1), (4.2), (4.3). Παρατεί κανείς ότι στην περιοχή κοντά στο ελάχιστο για κάποιο  $E_{min}$  ανάμεσα από τις δύο κορυφές οι μικροκαταστάσεις καταστέλλονται εκθετικά και πιο συγκεκριμένα μπορεί να υπολογιστεί

$$P_{min} = P(E_{min}) = c_f L^p e^{-f^s A} \quad (4.4)$$

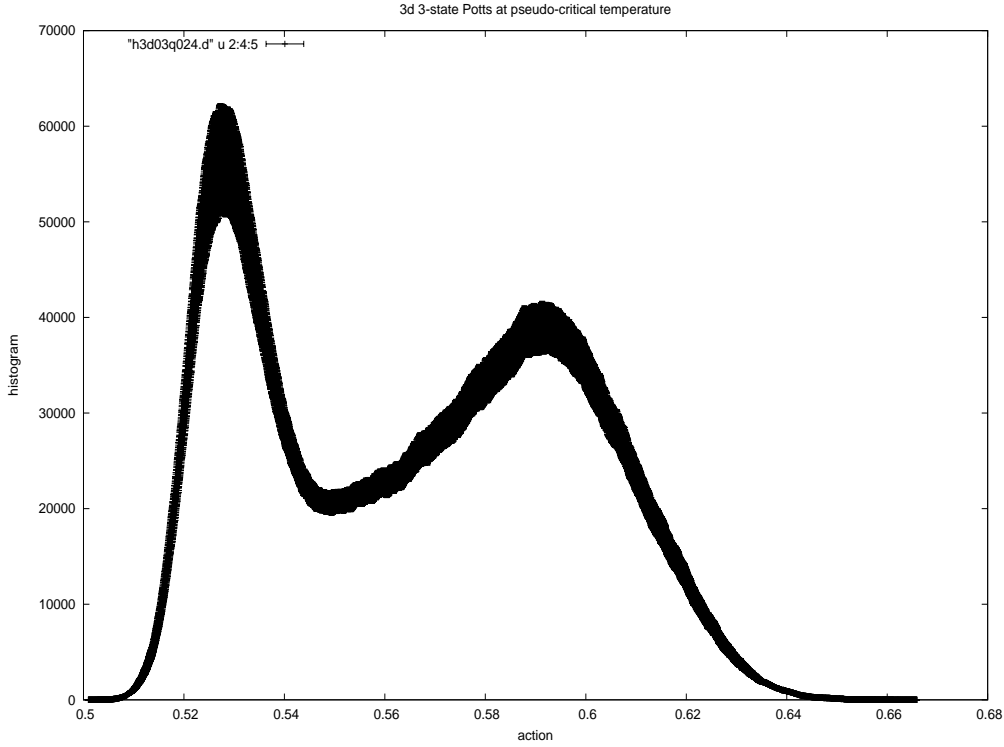
όπου  $f^s$  η **επιφανειακή τάση** και  $A$  η ελάχιστη επιφάνεια μεταξύ των φάσεων,  $A = 2L^{d-1}$  για  $L^d$  πλέγμα και  $c_f, p$  είναι σταθερές με την  $p = d-1$  στην προσέγγιση τριχοειδούς κύματος. Έτσι, για να υπολογίσει κανείς επιφανειακή τάση πρέπει να υπολογίσει τις ποσότητες

$$f^s(L) = -\frac{1}{A(L)} \ln R(L), \quad \mu\epsilon \quad R(L) = \frac{P_{min}(L)}{P_{max}(L)} \quad (4.5)$$

και να χρησιμοποιήσει **κλιμάκωση μεγέθους συστήματος** (finite size scaling: FSS) για παράεκταση της τάσης για  $L \rightarrow \infty$ .

Όμως, όπως θα έχετε ήδη παρατηρήσει, για μεγάλα συστήματα η συμβατική προσομοίωση Monte Carlo που καταλήγει στην (4.3) θα επισκεφθεί ελάχιστα τις ενδιαφέρουσες για μας μικροκαταστάσεις στην  $E = E_{min}$  - αφού η  $n(E)$  εκεί είναι ελάχιστη - και ως εκ τούτου ο εκτιμητής του  $R(L)$  θα έχει πολύ μεγάλο σφάλμα. Το φαινόμενο αυτό της εκθετικής μείωσης της στατιστικής με το μέγεθος του πλέγματος στην περιοχή μετάβασης έχει ονομαστεί **υπερκρίσιμη καθυστέρηση** (supercritical slowing down). Όπως μπορείτε εύκολα να διαπιστώσετε, η προφανής επιλογή που λύνει το πρόβλημα είναι να διαλέξουμε τα βάρη έτσι ώστε να αντισταθμίζουν την  $n(E)$  στην κατανομή πιθανότητας (4.3) ή, ακόμα καλύτερα, να την απαλοφουν. Θα πρέπει επομένως να εισάγουμε βάρη που να συμπεριφέρονται σαν  $1/n(E)$ , δηλαδή

$$\hat{w}_{1/n}(k) = w_{1/n}(E^{(k)}) = \frac{1}{n(E^{(k)})} \quad (4.6)$$



Σχήμα 4.4: 3d 3-state Potts μοντέλο σε πλέγμα  $24^3$  στην ψευδοκρίσιμη θερμοκρασία  $\beta_t^{ps} = 0.275229525$ . Το σχήμα αναπαράχθηκε με τον κώδικα του STMC όπως εμφανίζεται στο [4].

που θα αποτελούν φυσικά το ιδανικό όριο της προσέγγισης που θα επιχειρήσουμε. Και λέμε προσέγγιση αφού τελικά θα πρέπει να διαλέξουμε ένα σύνολο παραμέτρων μέσω των οποίων θα προσεγγίσουμε τα βάρη αυτά. Η επιλογή αυτής της προσέγγισης που ορίζει και την πολυκανονική συλλογή είναι η

$$\hat{w}_{mu}(k) = w_{mu}(E^{(k)}) = e^{-b(E^{(k)})E^{(k)} + \alpha(E^{(k)})} \quad (4.7)$$

όπου  $b(E)$  η μικροκανονική θερμοκρασία σε ενέργεια  $E$  και η  $\alpha(E)$  είναι κάποιο είδος χημικού δυναμικού. Πρέπει να τονιστεί ότι προσεγγίσεις σε παράγοντες βάρους  $1/n(E)$  είχαν ήδη χρησιμοποιηθεί στη μέθοδο Umbrella Sampling στην οποία αναφερθήκαμε και παραπάνω. Είναι η συγκεκριμένη παραμετροποίηση μέσω των  $b$ ,  $\alpha$  που συνιστά την πολυκανονική μέθοδο. Επιπλέον, ιδιαίτερα σημαντική είναι η ομαλή εξάρτηση της  $b(E)$  από το όρισμά της, μιας και πρόκειται να τη χρησιμοποιήσουμε σε συντελεστές βάρους οι οποίοι βέβαια δε θέλουμε να μεταβάλλονται απότομα.

Με την προσέγγιση (4.7) επομένως στα βάρη (4.6) δειγματοληπούμε μια νέα πολυκανονική κατανομή

$$P_{mu}(E) = c_{mu} n(E) w_{mu}(E) \approx c_{mu} \quad (4.8)$$

όπου καταφέραμε συνεπώς προσεγγιστικά να απαλοίσουμε την  $n(E)$ . Για να λάβουμε τώρα την επιθυμητή κανονική κατανομή (4.3) αναζυγίζουμε σε εκείνη

$$P(E) = \frac{c_{\beta}}{c_{mu}} \frac{P_{mu}(E)}{w_{mu}(E)} e^{-\beta E} \quad (4.9)$$

η οποία ισότητα είναι αυστηρή (και όχι προσεγγιστική) μιας και τα βάρη  $w_{mu}(E)$  που χρησιμοποιούνται στην προσομοίωση είναι γνωστά ακριβώς. Έχοντας πετύχει την προσέγγιση σε μια σχεδόν σταθερή κατανομή<sup>1</sup>, ο μέσος αριθμός μικροκαταστάσεων δεν εξαρτάται πλέον ισχυρά από την ενέργεια και καθίσταται δυνατή η ακριβής μέτρηση του λόγου  $R(L)$  της (4.5)

$$R(L) = R_{mu}(L) \frac{w_{mu}(E_{max}^i) e^{-\beta_c E_{min}}}{w_{mu}(E_{min}^i) e^{-\beta_c E_{max}}}, \text{ με } R_{mu}(L) = \frac{P_{mu}(E_{min})}{P_{mu}(E_{max}^i)} \quad (4.10)$$

όπου ο δείκτης  $i$  τρέχει στα δύο μέγιστα και το στατιστικό σφάλμα καθορίζεται από τον παράγοντα  $R_{mu}$ , πολ/σμένο απλά με το σταθερό παράγοντα που ακολουθεί.

Αυτό που πετύχαμε είναι ότι τώρα τα σφάλματα του  $R_{mu}(L)$  δεν πάσχουν από υπερκρίσιμη καθυστέρηση αφού η πολυκανονική προσομοίωση επισκέπτεται τις μικροκαταστάσεις με  $E_{min}$ , πρακτικά, τόσο συχνά όσο και εκείνες με  $E_{max}^1$  ή  $E_{max}^2$ . Έχουμε δηλαδή, εποπτικά, πετύχει να μετατρέψουμε το κανονικό ιστόγραμμα όπως φαίνεται στο σχήμα (4.5)

Θα μπορούσε κάποιος σε αυτό το σημείο να ενίσταται ότι το επιχείρημα που ακολουθήσαμε από την εισαγωγή των προσεγγιστικών βαρών μέχρι εδώ είναι κυκλικό: τα βάρη (4.6) είναι a-priori άγνωστα αλλά ακόμα και στην περίπτωση που ήταν γνωστά, θα μπορούσε κάποιος με την επιλογή  $w_{mu}(E^{(k)}) = w_{1/n}(E^{(k)})$  να λάβει

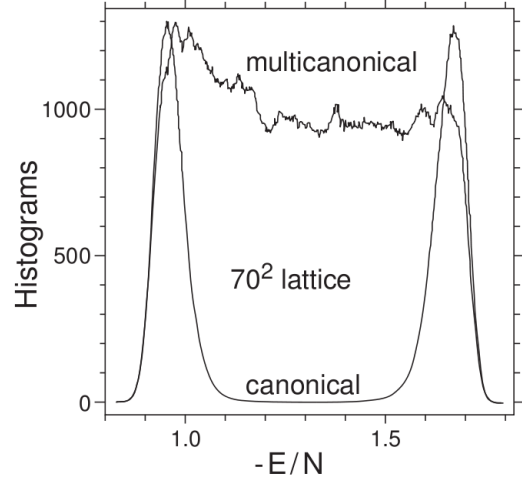
$$R_{mu} = \frac{P_{mu}(E_{min})}{P_{mu}(E_{max})} = 1$$

οπότε δεν θα συνέτρεχε λόγος να γίνει προσομοίωση: η ποσότητα θα ήταν ακριβώς γνωστή. Για το λόγο αυτό η πολυκανονική μέθοδος έγκειται σε δύο βήματα

1. Λαμβάνουμε έναν λειτουργικό εκτιμητή  $\hat{w}_{mu}$  των βαρών  $\hat{w}_{1/n}$ , δηλαδή τέτοιο που η προσέγγιση (4.7) να είναι αρκετά καλή ώστε να εξασφαλίζει κίνηση στο επιθυμητό φάσμα ενέργειας. Φυσικά αποκλίσεις της  $P_{mu}$  από την ιδανική συμπεριφορά (=  $c_{mu}$ ) κατά ένα παράγοντα, π.χ: 10, είναι ανεκτές.
2. Διενεργούμε μια κανονική προσομοίωση Monte Carlo με τα βάρη  $\hat{w}_{mu}(k)$  και έτσι παράγονται μικροκαταστάσεις στην πολυκανονική συλλογή. Για να πάρουμε αναμενόμενες τιμές της κανονικής συλλογής, αναζυγίζουμε σε εκείνη και χρησιμοποιούμε κάποια μέθοδο υπολογισμού σφαλμάτων, γενικά τη jackknife.

Είμαστε έτοιμοι να ξεκινήσουμε σε πρακτικό επίπεδο με τις πολυκανονικές προσομοιώσεις. Το πρώτο και σημαντικότερο εμπόδιο στο δρόμο μας είναι ότι σε αντίθεση με τα βάρη (4.2)

<sup>1</sup>Όπως αποδεικνύεται εξακολουθεί να υπάρχει εκθετική μείωση αλλά με πολύ μικρότερο χαρακτηριστικό χρόνο.



Σχήμα 4.5:  $2d q = 10$  Potts σε πλέγμα  $70 \times 70$ . Παρουσιάστηκε στο [6].

των κανονικών προσομοιώσεων που είναι γνωστά, τα  $\hat{w}_{mu}(k)$  δεν είναι. Για το σκοπό αυτό, σε διακριτά συστήματα μικρού έως μέτριου μεγέθους ο B.Berg προτείνει την γενική αναδρομή που αναλύεται στην αμέσως επόμενη παράγραφο. Αφού καθοριστούν τα πολυκανονικά βάρη η προσομοίωση γίνεται κατά τα γνωστά. Το δεύτερο και σαφώς μικρότερο εμπόδιο που συναντάει κανείς, είναι ότι πλέον οι αναμενόμενες τιμές των ενδιαφερόντων μεγεθών δεν είναι απλοί αριθμητικοί μέσοι των παραγόμενων “μετρήσεων”, αλλά χρειάζονται λίγο πολυπλοκότερες εξισώσεις. Για παράδειγμα, για καταστάσεις που παράγονται με τον αλγόριθμο Metropolis στην κανονική συλλογή, ο εκτιμητής της ενέργειας είναι απλά ο αριθμητικός μέσος

$$\bar{E} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n E_i$$

ενώ για τον ίδιο εκτιμητή υπολογισμένο πάνω στην πολυκανονική συλλογή θα είναι

$$\bar{E}(\beta) = \frac{\sum_{i=1}^n E^i w_{mu}^{-1}(E^i) e^{-\beta E^i}}{\sum_{i=1}^n w_{mu}^{-1}(E^i) e^{-\beta E^i}} .$$

Η δυσκολία όμως είναι ουσιαστικά προγραμματιστική και είναι φυσικά αμελητέα δεδομένου ότι το κέρδος μας είναι μεγάλο: μπορούμε πια να πάρουμε άμεσα εκτιμητές της ελεύθερης ενέργειας και της εντροπίας, εγχείρημα που θα ήταν πολύ δυσκολότερο με τις απλές μεθόδους.

#### 4.2.1 Αναδρομή για τα βάρη

Σκοπός μας είναι η παρουσίαση μιας αναδρομής[3] που δίνει λειτουργικούς εκτιμητές  $w_{mu}(k)$  των παραγόντων βάρους  $\hat{w}_{1/n}(k)$ .

##### Μια “αφελής” αναδρομή

Θα ξεκινήσουμε με τη διατύπωση μιας απλοϊκής ιδέας η οποία παρ’ όλο που όπως θα διαπιστώσετε αμέσως αποτυγχάνει, εμπεριέχει την ουσία του εγχειρήματός μας. Προτείνεται να ξεκινάει κανείς την αναδρομή στην άτακτη (disordered) φάση του συστήματος καθώς τότε μπορεί αυτό να κινείται ελεύθερα κάτω από Monte Carlo updates. Ας κάνουμε τη μηδενική προσομοίωση με τα βάρη

$$w^0(k) = 1, \forall k$$

Η πιο προφανής αναδρομή που θα προσεγγίζει τα βάρη (4.6) είναι η εξής: η  $n$ -οστή προσομοίωση θα πραγματοποιείται με τον εκτιμητή  $w^n(k)$  και θα παράγει το ιστόγραμμα  $H^n(E)$ . Τότε θα θεωρούμε εκτιμητή  $n + 1$  για τα βάρη

$$w^{n+1}(k) = \frac{w^n(k)}{H^n(E^k)}. \quad (4.11)$$

Σκεφτείτε ότι η διακριτή συνάρτηση  $H(E)$  παίρνει μεγάλες τιμές για τις συχνά εμφανιζόμενες ενέργειες (και τις αντίστοιχες καταστάσεις προφανώς) και μικρές για τις σπάνια εμφανιζόμενες. Η παραπάνω αναδρομή επομένως ενισχύει στο βήμα  $n + 1$  εκείνες τις καταστάσεις που εμφανίστηκαν σπάνια στο βήμα  $n$ : όσο πιο μικρή ήταν η συχνότητά τους τόσο μεγαλύτερη πιθανότητα θα έχουν να εμφανιστούν στο επόμενο βήμα. Αυτή η απλοϊκή προσέγγιση όμως αποτυγχάνει για τρεις βασικούς λόγους

1. Πώς να αντιμετωπίσουμε την περίπτωση που  $H^n(E) = 0$  ή μικρό;

2. Κάθε συλλογή του  $H^n(E)$  ιστογράμματος ξεκινάει με μηδενική στατιστική. Αν υποθεθεί ότι κάποιος μας δίνει τα ακριβή βάρη (4.6) και τα χρησιμοποιούμε στη μηδενική προσομοίωση:  $w^0(k) = w_{1/n}(k)$ , τότε το  $w^1(k)$  θα είναι χειρότερο. Θα είναι παράσιτα από το  $w_{1/n}(k)$ .
3. Τα αρχικά βάρη  $w^0(k) = 1$  αντιστοιχούν σε άπειρη θερμοκρασία και δε λειτουργούν στο όριο  $E^{(k)} \rightarrow E_g$ , όπου  $E_g$  είναι η κατάσταση ελάχιστης ενέργειας (groundstate) του συστήματος η οποία προσεγγίζεται στο όριο της μηδενικής θερμοκρασίας.

Παρακάτω παρουσιάζεται η τελική αναδρομή που ξεπερνάει τα παραπάνω προβλήματα.

### Η λειτουργική αναδρομή

Όπως έχουμε ήδη αναφέρει, συμφέρει να τυποποιήσει κανείς την αναδρομή μέσω των ποσοτήτων  $b(E), \alpha(E)$ , επομένως ξεκινάμε με τη σχέση ορισμού

$$w(k) = e^{-S(E^{(k)})} = e^{-b(E^{(k)})E^{(k)} + \alpha(E^{(k)})} \quad (4.12)$$

όπου  $S(E)$  η μικροκανονική εντροπία. Η παραπάνω επιλογή είναι διαισθητικά ορθή μιας και προσδίδει σε μικροκαταστάσεις μεγαλύτερης εντροπίας (ή αταξίας αν θέλετε) μικρότερα βάρη, μη επιτρέποντας έτσι στο σύστημα να εγκλωβιστεί σε μια από τις δύο περιοχές ενέργειας στις οποίες το ίδιο προτιμά να βρίσκεται. Αυτό που επιχειρούμε λοιπόν είναι να “πειράζουμε” τον εκθέτη του βάρους Boltzmann ώστε να συμπεριφέρεται όπως η μικροκανονική εντροπία.

Ισχύει επίσης ο ορισμός της μικροκανονικής θερμοκρασίας

$$b(E) = \frac{1}{T(E)} = \frac{\partial S(E)}{\partial E} \quad (4.13)$$

όπως και εκείνος της αδιάστατης, μικροκανονικής ελεύθερης ενέργειας

$$\alpha(E) = \frac{F(E)}{T(E)} = \frac{E}{T(E)} - S(E) = b(E)E - S(E) \quad (4.14)$$

Επειδή όμως η έννοια της παραγώγου είναι ελαφρώς δυσνόητη για έναν υπολογιστή (στον οποίο όλα τα προβλήματα αντιμετωπίζονται σε μια “διακριτοποιημένη” αλγοριθμική μορφή), θα θεωρήσουμε τη διακριτή ποσότητα ενέργειας  $\epsilon$  και τότε ο ορισμός (4.13) θα γίνει

$$b(E) = \frac{S(E + \epsilon) - S(E)}{\epsilon} \quad (4.15)$$

Με εξίσωση των εκθετών στην (4.12) θα πάρουμε

$$S(E) = b(E^{(k)})E^{(k)} - \alpha(E^{(k)}) \quad (4.16)$$

Θα έχουμε λοιπόν

$$S(E) - S(E - \epsilon) = b(E)E - b(E - \epsilon)(E - \epsilon) - \alpha(E) + \alpha(E - \epsilon) \stackrel{(4.15)}{=} \epsilon b(E - \epsilon)$$

ή τελικά

$$\alpha(E - \epsilon) = \alpha(E) + [b(E - \epsilon) - b(E)] \cdot E \quad (4.17)$$

Έχουμε τώρα δείξει κάτι ιδιαίτερα βολικό: το  $\alpha(E)$  προσδιορίζεται μέσω του  $b(E)$  με απροσδιοριστία μιας προσθετικής σταθεράς. Έτσι, αν ορίσω μια τιμή εκκίνησης για το  $\alpha(E)$ , πράγμα

το οποίο και θα κάνω θέτοντας  $\alpha(E_{max}) = 0$ , τότε αυτό μετατρέπεται σε μια φιξαρισμένη παράμετρο της προσομοίωσης. Αν δίνεται δηλαδή το  $b$ , το  $\alpha$  έπεται άμεσα. Χρησιμοποιούμε επομένως σαν αρχική συνθήκη για την πρώτη προσομοίωση ( $n = 0$ ), την επιλογή παραμέτρων

$$\begin{aligned} b^0(E) &= b_0 \geq 0 \\ \alpha^0(E) &= 0 \end{aligned} \quad (4.18)$$

Θα χρησιμοποιήσουμε συνεπώς το  $b^n(E)$  για τη  $n$ -οστή προσομοίωση και έστω  $H^n(E)$  τα αντίστοιχα ιστογράμματα ενέργειας. Για να αποφευχθεί η περίπτωση  $H^n(E) = 0$  (δείτε την περίπτωση των glassy systems και της μεθόδου entropic sampling όπου εμφανίζεται επίσης αυτό το πρόβλημα), χρησιμοποιούμε την απεικόνιση

$$H^n(E) \rightarrow \hat{H}^n(E) = \max [h_0, H^n(E)] \quad (4.19)$$

με  $0 < h_0 < 1$  (το όριο  $h_0 \rightarrow 0$  δεν πρέπει να θεωρηθεί ασφαλές προς το παρόν αλλά τελικά θα γίνει). Με την αντικατάσταση αυτή θα μετατρέψουμε ακολουθώντας την εξίσωση (4.11) σε μια εξίσωση για τα  $b(E)$ . Προς τούτο ορίζουμε το βάρος

$$w_0^{n+1}(E) = e^{-S_0^{n+1}(E)} = c \cdot \frac{w^n(E)}{\hat{H}^n(E)} \quad (4.20)$$

όπου στη σχέση αυτή και στα επόμενα, ο δείκτης 0 αναφέρεται σε ποσότητες που δεν αποτελούν ακόμη τελικό εκτιμητή από τη  $n$ -οστή προσομοίωση. Ο παράγοντας  $c$  εξασφαλίζει ότι η  $S_0^{n+1}(E)$  μπορεί να γίνει εκτιμητής της μικροσκοπικής εντροπίας

$$S_0^{n+1}(E) = -\ln c + S^n(E) + \ln \hat{H}^n(E) \quad (4.21)$$

Όμως από την (4.13):

$$\begin{aligned} b_0^{n+1}(E) &= \frac{S_0^{n+1}(E + \epsilon) - S_0^{n+1}(E)}{\epsilon} \\ b_0^n(E) &= \frac{S_0^n(E + \epsilon) - S_0^n(E)}{\epsilon} \end{aligned} \quad (4.22)$$

με την πρώτη να δίνει

$$\begin{aligned} b_0^{n+1}(E) &= \frac{\left[ -\ln c + S^n(E + \epsilon) + \ln \hat{H}^n(E + \epsilon) \right] - \left[ -\ln c + S^n(E) + \ln \hat{H}^n(E) \right]}{\epsilon} \\ &= \frac{S^n(E + \epsilon) - S^n(E)}{\epsilon} + \frac{\ln \hat{H}^n(E + \epsilon) - \ln \hat{H}^n(E)}{\epsilon} \end{aligned} \quad (4.23)$$

με τελικό αποτέλεσμα

$$b_0^{n+1}(E) = b^n(E) + \frac{\ln \hat{H}^n(E + \epsilon) - \ln \hat{H}^n(E)}{\epsilon} \quad (4.24)$$

Η εκτιμήτρια της απόκλισης του  $b_0^{n+1}(E)$  δίνεται από τη σχέση

$$\sigma^2 [b_0^{n+1}(E)] = \sigma^2 [b^n(E)] + \frac{\sigma^2 [\ln \hat{H}^n(E + \epsilon)]}{\epsilon} + \frac{\sigma^2 [\ln \hat{H}^n(E)]}{\epsilon}$$

στην οποία όμως

$$\sigma^2 [b^n(E)] = 0$$

αφού πρόκειται για μια συνάρτηση γνωστή από την προηγούμενη ( $n$ -οστή) προσομοίωση. Η εξάρτηση της διακύμανσης μεταφέρεται αποκλειστικά στο  $H(E)$  εφ' όσον

$$\sigma^2 [\ln \hat{H}^n] = \sigma^2 [\ln H^n] = [\ln(H^n + \Delta H^n) - \ln H^n]^2$$

όπου το  $\Delta H^n$  είναι η διακύμανση του ιστογράμματος και αυξάνει με την τετραγωνική ρίζα του αριθμού των entries:  $\Delta H^n \sim \sqrt{H^n}$ . Κάνοντας την προσέγγιση ότι γειτονικά ιστογράμματα έχουν ταυτόσημους χρόνους αυτοσυσχετισμού, παίρνουμε την εξίσωση

$$\sigma^2 [b_0^{n+1}(E)] = \frac{[\ln(H^n + \Delta H^n) - \ln H^n]^2}{\epsilon} \Big|_{(E+\epsilon)} + \frac{[\ln(H^n + \Delta H^n) - \ln H^n]^2}{\epsilon} \Big|_{(E)}$$

και τελικά

$$\sigma^2 [b_0^{n+1}(E)] = \frac{c'}{H^n(E+\epsilon)} + \frac{c'}{H^n(E)} = c' \cdot \frac{H^n(E+\epsilon) + H^n(E)}{H^n(E+\epsilon) \cdot H^n(E)} \quad (4.25)$$

όπου  $c'$  άγνωστη σταθερά. Παρατηρήστε ότι το 2ο μέλος απειρίζεται όταν ένα από τα ιστογράμματα έχει μηδενική στατιστική, δηλαδή:  $H^n(E) = 0$  ή  $H^n(E+\epsilon) = 0$ .

Βρισκόμαστε πια πολύ κοντά στο στόχο μας, την αναδρομική τυποποίηση του  $b(E)$  δηλαδή. Το στατιστικό βάρος του  $b_0^{n+1}(E)$  είναι αντιστρόφως ανάλογο της απόκλισής του και αγνοώντας την άγνωστη (και άνευ στατιστικής σημασίας) πολλαπλασιαστική σταθερά  $c'$ , ορίζουμε

$$g_0^n(E) = \frac{H^n(E+\epsilon) \cdot H^n(E)}{H^n(E+\epsilon) + H^n(E)} \quad (4.26)$$

που τώρα η περίπτωση του μηδενισμού κάποιου  $H(E)$  δε δημιουργεί πρόβλημα μιας και απλά μηδενίζει το βάρος. Η  $n$ -οστή προσομοίωση πραγματοποιήθηκε χρησιμοποιώντας το  $b^n(E)$ . Μπορούμε τώρα να συνδυάσουμε τα  $b_0^{n+1}(E)$  και  $b^n(E)$  βάσει των αντίστοιχων στατιστικών βαρών τους στον ζητούμενο εκτιμητή

$$b^{n+1}(E) = \hat{g}^n(E) \cdot b^n(E) + \hat{g}_0^n(E) \cdot b_0^{n+1}(E) \quad (4.27)$$

όπου τα  $\hat{g}$  αποτελούν τα κανονικοποιημένα βάρη

$$\hat{g}_0^n(E) = \frac{g_0^n(E)}{g^n(E) + g_0^n(E)}, \quad \hat{g}^n(E) = 1 - \hat{g}_0^n(E) \quad (4.28)$$

και προσδιορίζονται από την αναδρομική σχέση

$$g^{n+1}(E) = g^n(E) + g_0^n(E) \quad (4.29)$$

αν διαλέξουμε την απαραίτητη βάση της αναδρομής:  $g^0(E) = 0$ . Αντικαθιστώντας στην (4.27) το  $b_0^{n+1}(E)$  από την (4.24) για να απαλοφεί, παίρνουμε αμέσως

$$b^{n+1}(E) = b^n(E) + \hat{g}_0^n(E) \cdot \frac{\ln \hat{H}^n(E+\epsilon) - \ln \hat{H}^n(E)}{\epsilon} \quad (4.30)$$

Σε αντίθεση με την αρχική πρόχειρη προσέγγιση του προβλήματος (4.11), η τελευταία σχέση αναδρομής εμπεριέχει όλη την πληροφορία. Παρατηρούμε επιπλέον ότι το όριο  $h_0 \rightarrow 0$  του ορισμού της  $\hat{H}$  (4.19) είναι πια ασφαλές επειδή

$$\hat{g}_0^n \xrightarrow{h_0 \rightarrow 0} 0$$

και έτσι δε θα χρειαστεί να πάρει κάποια τεράστια τιμή το  $b(E)$  (αυτό θα ήταν πρόβλημα γιατί οι υπολογιστές δε χειρίζονται σωστά οσοδήποτε μεγάλους αριθμούς, υπερχειλίζουν π.χ το bit προσήμου προκειμένου να καταφέρουν να αποθηκεύσουν έναν αριθμό κάνοντάς τον να φαίνεται αρνητικός).

Κλείνοντας, η τελευταία σχέση μπορεί να μετατραπεί σε αναδρομή για τους λόγους των γειτονικών βαρών ορίζοντας

$$R^n(E) = \epsilon \cdot b^n(E) \stackrel{(4.15)}{=} e^{S^n(E+\epsilon) - S^n(E)} = \frac{e^{-S^n(E)}}{e^{-S^n(E+\epsilon)}} = \frac{w^n(E)}{w^n(E+\epsilon)} \quad (4.31)$$

που στο  $n+1$  βήμα θα δώσει:

$$R^{n+1}(E) = e^{\epsilon b^{n+1}(E)} \stackrel{(4.30)}{=} \exp \left[ \hat{g}_0^n(E) \cdot \ln \left( \frac{\hat{H}^n(E+\epsilon)}{\hat{H}^n(E)} \right) \right]$$

και η τελευταία σχέση καταλήγει στην τελική σχέση αναδρομής

$$R^{n+1}(E) = R^n(E) \cdot \left( \frac{\hat{H}^n(E+\epsilon)}{\hat{H}^n(E)} \right)^{\hat{g}_0^n(E)} \quad (4.32)$$

η οποία παρουσιάζει ενδιαφέρον όταν τίθεται θέμα περιορισμένης RAM.

### 4.3 Εφαρμογές στις μεταβάσεις φάσης 1ης τάξης

#### 4.3.1 Βρόχοι υστέρησης σε προσομοίωση Monte Carlo

Ένας τρόπος να “μετρήσει” κανείς το χάσμα  $E_{min} - E_{max}^i$  που εμφανίζεται κατά μια μετάβαση φάσης 1ης τάξης είναι να διενεργήσει κανονικές προσομοιώσεις σε ένα φάσμα θερμοκρασιών, αρχικά προς τη μία κατεύθυνση και ακολούθως προς την αντίθετη επιστρέφοντας στην αρχική τιμή της  $\beta$  ( $\beta_{min} \rightsquigarrow \beta_{max} \rightsquigarrow \beta_{min}$ ). Αν φροντίσει να διατηρήσει μικρό τον αριθμό των sweeps, έτσι ώστε να μη δειγματοληπτεί σωστά στο χώρο των καταστάσεων αλλά να εγκλωβίζεται ηθελημένα σε κάποια περιοχή, τότε γύρω από την κρίσιμη θερμοκρασία θα παρατηρήσει τη δημιουργία κάποιου είδους **βρόχου υστέρησης**. Το πρόβλημα εμφανίζεται έντονα στη  $\beta_c$  και έγκειται στο γεγονός ότι “πηγαίνοντας” το σύστημα εγκλωβίζεται (βασικά δεν προλαβαίνει να ξεφύγει) στην πρώτη περιοχή γύρω από το  $E_{max}^i$  ενώ “επιστρέφοντας” στη 2η γύρω από το  $E_{max}^2$ . Έτσι η μέση τιμή της μαγνήτισης (η οποία παρουσιάζει κι αυτή ανάλογη συμπεριφορά με την ενέργεια στην περιοχή μετάβασης) στην περιοχή αυτή θα κυριαρχείται από τις τιμές της μαγνήτισης του αντίστοιχου υποσυνόλου του χώρου των καταστάσεων. Με την παραπάνω μέθοδο, ακόμα και με απλή παρατήρηση του εύρους του παραπάνω βρόχου, μπορεί να γίνει μια εκτίμηση της ισχύος της μετάβασης φάσης, για το αν είναι δηλαδή ασθενής ( $E_{max}^i - E_{min}$  μικρό) ή ισχυρή ( $E_{max}^i - E_{min}$  μεγάλο). Αυτή η δυνατότητα δεν πρέπει να θεωρηθεί τετριμμένη μιας και μέχρι πριν κάποια χρόνια η διενέργεια προσομοιώσεων μεγάλου αριθμού sweeps



ήταν απαγορευτικά χρονοβόρα διαδικασία για κάποιον χωρίς πρόσβαση σε επαρκείς πόρους (εξειδικευμένους υπολογιστές κτλ.).

Για να αναδειχθεί το τεχνικό στην ουσία του αυτό πρόβλημα (τεχνικό μιας και έχουμε ήδη δημιουργήσει τον αλγόριθμο που μας βοηθάει να το ξεπεράσουμε) θα χρησιμοποιήσουμε το script που παρουσιάστηκε στο 2ο κεφάλαιο εφαρμόζοντάς το στην περίπτωση του μοντέλου  $2d$  Potts για  $q = 4, 10$ .

Στις δύο διαστάσεις το  $q \leq 4$  Potts αναφέρεται στο [Bazavon et al.(2008)] να εμφανίζει μετάβαση φάσης 2ης τάξης και για  $q > 5$  1ης. Παρ' όλα αυτά η δομή διπλής κορυφής του σχήματος (4.2) υποδεικνύει πιθανώς ασθενή μετάβαση 1ης τάξης και δίνει ένα έναυσμα για να επιχειρήσουμε να εξετάσουμε αν το επιχείρημα υποστηρίζεται και από εμφάνιση βρόχου υστέρησης.

Το script μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να παράγει μια σειρά ιστογραμμάτων απόλυτης μαγνήτισης για κάθε θερμοκρασία και τη μέση απόλυτη μαγνήτιση συναρτήσει της  $\beta$ . Προετοιμάζει επίσης, προαιρετικά, δεδομένα για τον υπολογισμό της μαγνητικής επιδεικτικότητας αλλά αρχικά οι σχετικές εντολές είναι ανενεργές (σα σχόλια). Αυτό συμβαίνει γιατί θα πρέπει να αποφασίσει κανείς ποια από τις δύο μετρήσεις θα διεξάγει. Η πρώτη, για την ανάδειξη του βρόχου υστέρησης, απαιτεί πολύ μικρό αριθμό sweeps ενώ η δεύτερη, για τη  $\chi$ , μεγάλο αριθμό sweeps.

#### 4.3.2 Αναζύγιση στην κανονική συλλογή και μετρήσεις ενδιαφερουσών ποσοτήτων

Ο σκοπός μας τώρα είναι να καταφέρουμε με μια πολυκανονική προσομοίωση να καλύψουμε τα ιστογράμματα δράσης κανονικών προσομοιώσεων που αντιστοιχούν σε ένα φάσμα θερμοκρασιών<sup>†</sup>

$$\beta_{min} \leq \beta \leq \beta_{max} \quad (4.33)$$

Οι παράμετροι που καθορίζουν την ελάχιστη και τη μέγιστη τιμή της δράσης στον κώδικά μας ( $namin, namax$ ) θα πρέπει τότε να είναι τέτοιες ώστε να περιλαμβάνουν ολόκληρα τα ακραία κανονικά ιστογράμματα για  $\beta_{min}, \beta_{max}$

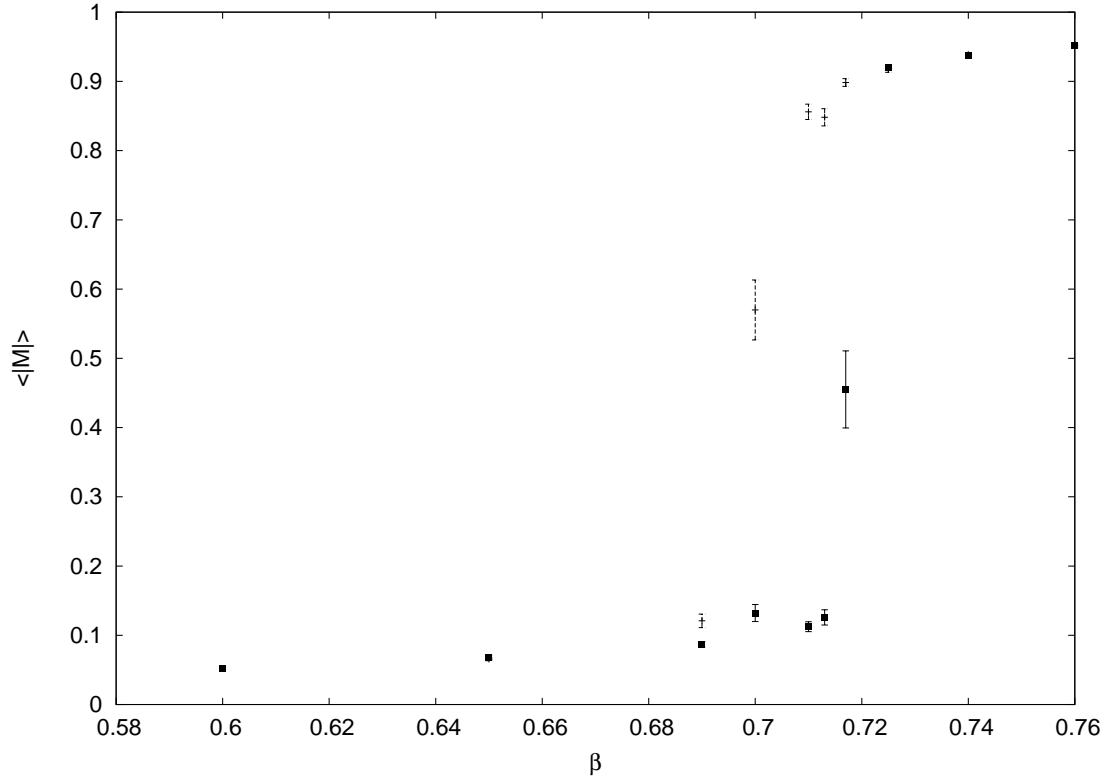
$$namin \ll \overline{act}(\beta_{min}) \quad \overline{act}(\beta_{max}) \ll namax$$

Δεδομένης τώρα μιας χρονοσειράς  $n$  μικροκαταστάσεων που παρήχθη από την πολυκανονική προσομοίωση, με το δείκτη  $i$  να τρέχει πάνω στις μικροκαταστάσεις, μπορούμε να πάρουμε τον εκτιμητή την ποσότητας  $\mathcal{O}$

$$\overline{\mathcal{O}} = \frac{\sum_{i=1}^n \mathcal{O}^{(i)} \exp[-\beta E^{(i)} + b(E^{(i)})E^{(i)} - \alpha(E^{(i)})]}{\sum_{i=1}^n \exp[-\beta E^{(i)} + b(E^{(i)})E^{(i)} - \alpha(E^{(i)})]}$$

όπου παρατηρώντας το εκθετικό αντιλαμβανόμαστε ότι ουσιαστικά επαναφέραμε τον παράγοντα Boltzmann στις μικροκαταστάσεις (βασικά αφαιρούμε από τον εκθέτη την τροποποίηση που εισάγαμε στην (4.7)). Για διακριτά συστήματα, όπως στην περίπτωσή μας, αρκεί να αποθηκεύσουμε ιστογράμματα ενέργειας αντί για χρονοσειρές όταν πρόκειται να υπολογίσουμε

<sup>†</sup> Αντίστροφα θα μπορούσε κανείς να φανταστεί το πολυκανονικό ιστογράμματα να δημιουργείται από την υπέρθεση πολλών κανονικών ιστογραμμάτων γειτονικών θερμοκρασιών αγνοώντας τις περιοχές πιο φτωχής στατιστικής μακριά από την κορυφή.



Σχήμα 4.6: Βρόχος υστέρησης γύρω από την κρίσιμη θερμοκρασία  $\beta_c = 0.7130312$  στο  $2d$   $q = 10$  Potts για μέγεθος πλέγματος  $L = 20$ . Εκτελέστηκαν 100 sweeps για ισορροπία και  $32 \times 100$  sweeps μετρήσεων. Το τεχνικό αυτό πρόβλημα προκαλείται από ανεπαρκή δειγματοληψία λόγω καθυστέρησης στο ενεργειακό φράγμα κοντά στην  $\beta_c$ .

συναρτήσεις της ενέργειας, μιας και για  $\mathcal{O}^{(i)} = f(E^{(i)})$  η παραπάνω εξίσωση γίνεται επίσης

$$\bar{f} = \frac{\sum_E f(E) h_{mu}(E) \exp[-\beta E + b(E)E - \alpha(E)]}{\sum_E h_{mu}(E) \exp[-\beta E + b(E)E - \alpha(E)]} \quad (4.34)$$

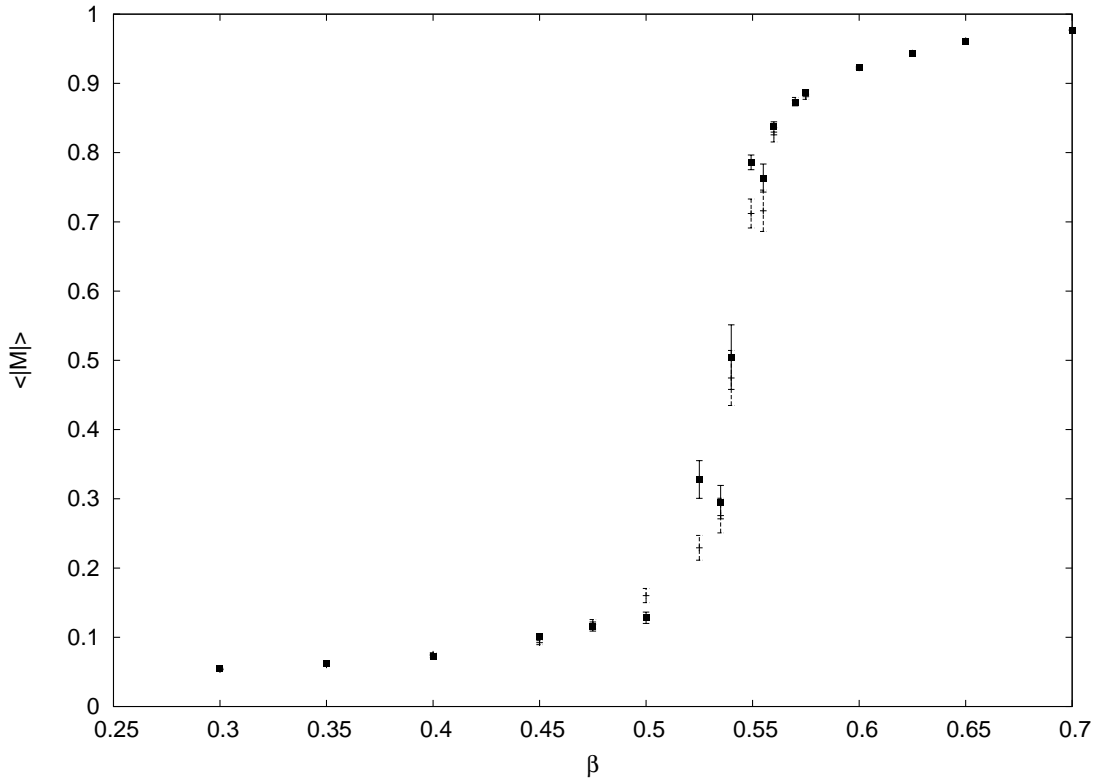
όπου βέβαια μαζέψαμε όλες τις μικροκαταστάσεις που αντιστοιχούν σε ίδια ενέργεια και αθροίσαμε σε όλες τις ενέργειες.

### Μέτρηση ενέργειας και ειδικής θερμότητας

Θα διεξάγουμε ακολούθως, και βάσει των παραπάνω, μετρήσεις φυσικών ποσοτήτων με χρήση του πακέτου STMC. Όπως μπορείτε να δείτε και στο Παράρτημα Β το πρόγραμμα που διενεργεί την πολυκανονική προσομοίωση είναι το **p\_mu.f** και εκείνο που αναλαμβάνει την ανάλυση των πολυκανονικών δεδομένων το **ana\_pmu.f**. Το τελευταίο στηρίζεται κυρίως στη ρουτίνα */STMC/ForLib/potts\_zln.f* η οποία υπολογίζει τις απαραίτητες ποσότητες που είναι συναρτήσεις του λογαρίθμου της συνάρτησης επιμερισμού. Λόγω του κεντρικού ρόλου της ρουτίνας στις μετρήσεις, παρατίθεται παρακάτω και ακολουθούν κάποια διευκρινιστικά σχόλια.

```

SUBROUTINE POTTS_ZLN(nlink,namin,beta0,b,ha,hasum,iopt,
&
&                               Zln,Aln,A2ln)
C Copyright Bernd Berg, May 12 2002.
    
```



Σχήμα 4.7: Βρόχος υστέρησης γύρω από την κρίσιμη θερμοκρασία  $\beta_c = 0.5493061$  στο  $2d$   $q = 4$  Potts για μέγεθος πλέγματος  $L = 20$ . Εκτελέστηκαν 100 sweeps για ισορροπία και  $32 \times 100$  sweeps μετρήσεων. Το σχήμα αυτό φαίνεται να συμφωνεί με πρόσφατη βιβλιογραφία και μη εμφάνιση μετάβασης πρώτης τάξης. Ακόμη και για μεγαλύτερο πλέγμα δεν είναι σαφής η ύπαρξη βρόχου υστέρησης. Παρόλα αυτά στο σχήμα (4.2) η εμφάνιση της χαρακτηριστικής δομής διπλής κορυφής είναι ξεκάθαρη.

```

C Potts model ln of the partition function Z and related variables.
  include 'implicit.sta'
  include 'constants.par'
  dimension b(0:nlink),ha(0:nlink),hasum(0:nlink)
C
  iloop_ha=0 ! Counts runs through the ha(iact).gt.half loop.
  if(namin.le.0) stop "POTTS_ZLN: namin false."
  do iact=0,nlink
    ha(iact)=hasum(iact)-ha(iact) ! Jackknife histogram.
    if(ha(iact).gt.half) then
      iloop_ha=iloop_ha+1
      if(iloop_ha.eq.1) then
        a=-(beta0-b(iact))*namin ! Ferdinand-Fisher normalization.
        Zln=log(ha(iact))+two*((beta0-b(iact))*iact+a)
        Zln1_max=Zln
        Aln=Zln+log(iact*one)
        A2ln=Zln+two*log(iact*one)
      else

```

```

a=a+(b(iact)-b(iact_old))*iact_old
Zln1=log(ha(iact))+two*((beta0-b(iact))*iact+a)
Zln1_max=max(Zln1_max,Zln1)
Aln1=Zln1+log(iact*one)
A2ln1=Zln1+two*log(iact*one)
Zln=addln(Zln,Zln1)
Aln=addln(Aln,Aln1)
A2ln=addln(A2ln,A2ln1)
end if
iact_old=iact
end if
end do
C
if(iopt.ne.1) return
C
C iact probability density at beta0: (Zln1_max used only here.)
iloop_ha=0
hsum=zero
do iact=0,nlink
if(ha(iact).gt.half) then
iloop_ha=iloop_ha+1
if(iloop_ha.eq.1) then
a=-(beta0-b(iact))*namin
else
a=a+(b(iact)-b(iact_old))*iact_old
end if
Zln1=log(ha(iact))+two*((beta0-b(iact))*iact+a)-Zln1_max
if(Zln1.gt.0.01d00) stop "Zln1."
ha(iact)=exp(Zln1)
hsum=hsum+ha(iact)
iact_old=iact
else
ha(iact)=zero
end if
end do
do iact=0,nlink
ha(iact)=ha(iact)/hsum
end do
C
return
end

```

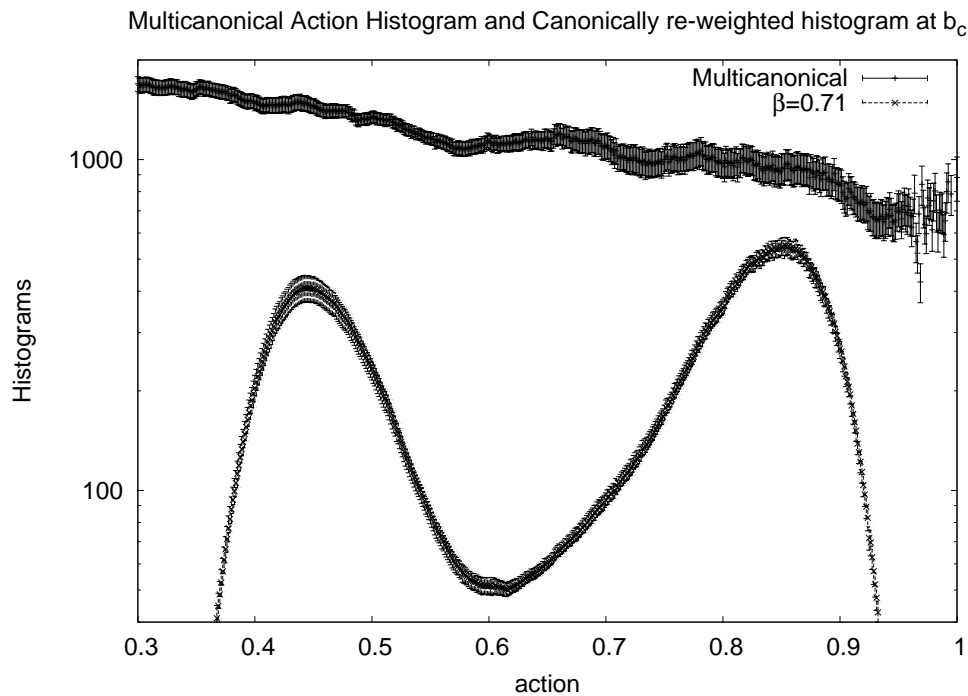
Ας εστιάσουμε αρχικά την προσοχή μας στο πρώτο μισό της ρουτίνας (πρώτο do-loop) στο οποίο γίνεται ο υπολογισμός των ποσοτήτων **Zln**, **Aln**, **A2ln** που χρειάζονται για τον υπολογισμό της αναμενόμενης τιμής της δράσης και της 2ης ροπής της (γί αυτό και ο παράγοντας 2 μπροστά από τον αντίστοιχο λογάριθμο). Αυτό που κάνει στην ουσία είναι το εξής: Για κάθε τιμή της δράσης θεώρησε το αντίστοιχο jackknife ιστόγραμμα και έλεγξε ότι δεν είναι μηδενικό το entry. Αν αυτή είναι η πρώτη επανάληψη τότε εισήγαγε τη σταθερά κανονικοποίησης  $a$  (για συμφωνία με τα αναλυτικά αποτελέσματα) και εκχώρησε τις πρώτες τιμές στις

ενδιαφέρουσες μεταβλητές, αλλιώς εκχώρησε στις μεταβλητές τιμές βάσει των προηγούμενων τιμών τους. Για να γίνουν κατανοητές οι βασικές ποσότητες  $Z_{ln}$  (φυσικός λογάριθμος της συνάρτησης επιμερισμού) και  $A_{ln}$ , δείτε τις σε σχέση με τον τύπο (4.34) αν  $f(E) = E$ . Η δεύτερη παριστάνει το λογάριθμο του αριθμητή που ουσιαστικά διαφέρει μόνο κατά τον παράγοντα  $E$  (δράσης εδώ) και επομένως κατά ένα λογαριθμικό όρο από την  $Z_{ln}$ . Στο δεύτερο μέρος της η ρουτίνα κάνει με παρόμοια λογική την αναζύγιση από το πολυκανονικό ιστόγραμμα σε κανονικό για κάποια θερμοκρασία  $\beta$  που αναφέρεται στον κώδικα ως  $\beta_{c0}$ .

Στηριζόμενοι στα παραπάνω προγράμματα εκτελούμε πολυκανονική προσομοίωση για το  $2d, q = 10$  Potts και σχεδιάζουμε το πολυκανονικό ιστόγραμμα μαζί με το αναζυγισμένο στην ψευδοκρίσιμη θερμοκρασία  $\beta_c^{ps} = 0.71$ . Η στατιστική μας είναι 100000 sweeps για επίτευξη ισορροπίας και  $32 \times 100000$  sweeps μετρήσεων. Το αποτέλεσμα φαίνεται στο σχήμα (4.8).

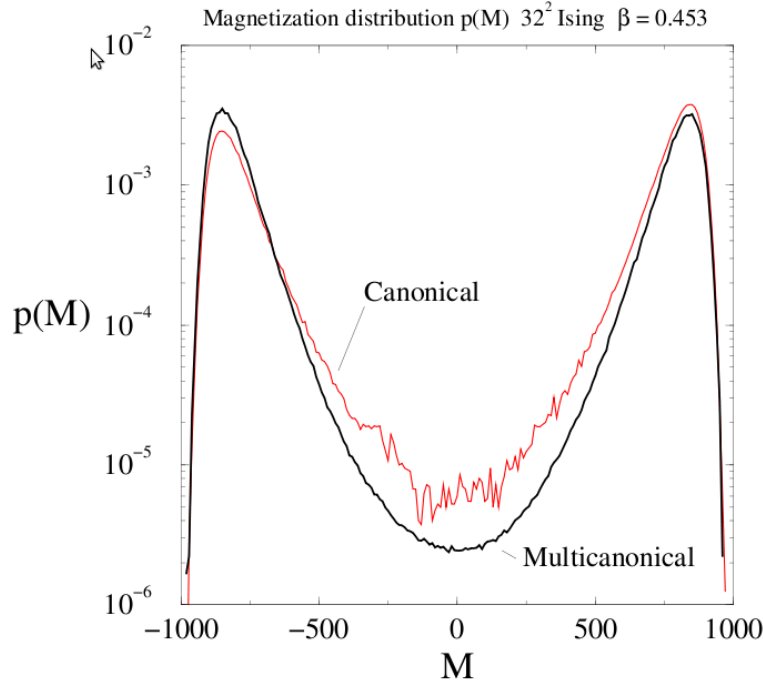
Επαναλαμβάνουμε τη διαδικασία για το μοντέλο Ising ( $q=2$  Potts) σε πλέγμα  $20 \times 20$ . Εκτελούμε 10000 sweeps για ισορροπία και  $32 \times 10000$  sweeps μετρήσεων. Στο σχήμα (4.10) φαίνεται το πολυκανονικό ιστόγραμμα και τα αναζυγισμένα στις τρεις θερμοκρασίες  $\beta = 0, 0.2, 0.4$ .

Παρατηρείστε τώρα ότι από το σχεδόν επίπεδο πολυκανονικό ιστόγραμμα έχουμε αναζυγίσει



Σχήμα 4.8: Πολυκανονικό ιστόγραμμα δράσης και το αναζυγισμένο στην κανονική συλλογή για  $\beta_c^{ps} = 0.71$  στο  $2d, q = 10$  Potts σε πλέγμα  $20 \times 20$ . Διενεργήθηκαν 100000 sweeps για ισορροπία και  $32 \times 100000$  sweeps μετρήσεων. Οι μη ισούψεις κορυφές υποδεικνύουν την ψευδοκρίσιμη φύση της θερμοκρασίας. Το σχήμα αναπαράχθηκε με χρήση του πακέτου STMC όπως εμφανίζεται στο [4].

για να πάρουμε εκείνο που θα παίρναμε με μια κανονική προσομοίωση στην κρίσιμη θερμοκρασία (που για  $q = 10$  είναι  $\beta_c = 0.7130312$ ). Ποιά είναι λοιπόν η διαφορά; Για να γίνει αυτό απόλυτα σαφές δείτε το επόμενο σχήμα (4.9). Η ουσία αυτού του “κύκλου” που κάναμε μέσω



Σχήμα 4.9: Κανονικές κατανομές μαγνήτισης όπως προκύπτουν από κανονική προσομοίωση και από πολυκανονική με αναζύγιση (200000 μετρήσεις)[16]. Είναι εμφανές ότι μέσω της πολυκανονικής μεθόδου η διακύμανση του ιστογράμματος στην κεντρική περιοχή του  $P_{min}$  έχει γίνει ελάχιστη, σε αντίθεση με εκείνη της κανονικής προσομοίωσης Monte Carlo.

της πολυκανονικής μεθόδου είναι ότι τώρα το κανονικό ιστόγραμμα διέπεται από *ομοιόμορφη στατιστική* καθώς οι καταστάσεις εκείνες που **φαινομενικά** είναι καταπιεσμένες (στην περιοχή του ελαχίστου δηλ.), δε διαφέρουν ουσιαστικά στην ακρίβεια που προσφέρουν σε μετρήσεις ενδιαφερόντων μεγεθών από τις υπόλοιπες. Βάσει των ποσοτήτων που υπολογίζει λοιπόν το πρόγραμμα ανάλυσης των πολυκανονικών δεδομένων, εξάγονται οι αναμενόμενες τιμές της δράσης και της 2ης ροπής της,  $actm$ ,  $a2ctm$

$$actm = \frac{\overline{iact}}{nlink} = \frac{\exp(Aln - Zln)}{nlink}, \quad a2ctm = \frac{\overline{iact^2}}{nlink} = \frac{\exp(A2ln - Zln)}{nlink^2} \quad (4.35)$$

όπου  $nlink$  το πλήθος των δεσμών στο πλέγμα (έτσι ώστε η δράση να υπολογίζεται ανά μονάδα αλληλεπίδρασης). Υπολογίζονται ακολούθως οι **ειδική θερμότητα**

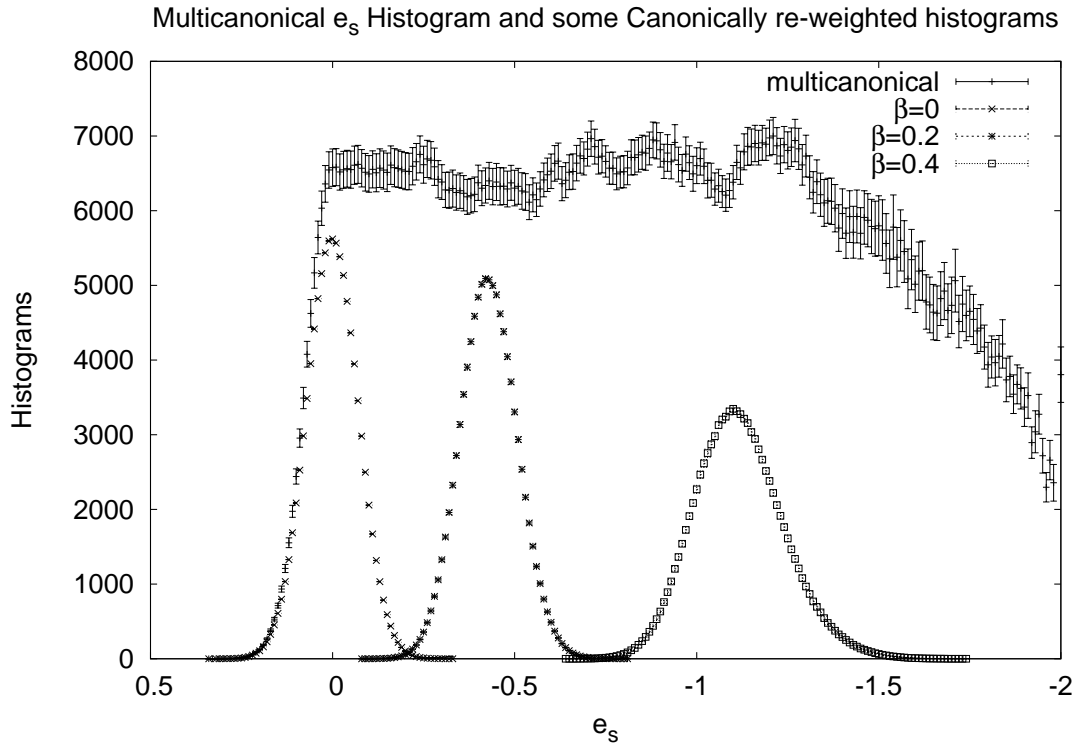
$$C = \frac{d\hat{E}}{dT} = \beta^2(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$$

και σε σχέση με τη μεταβλητή της δράσης που χρησιμοποιείται στον κώδικα που χρησιμοποιείται στην εργασία

$$C = \beta^2 Nd^2 (a2ctm - actm^2)$$

για το μοντέλο Ising και ανάλογα για διαφορετικά  $q$  (βλ. σχέση δράση-ενέργειας).

### Μέτρηση ελεύθερης ενέργειας και εντροπίας



Σχήμα 4.10: Πολυκανονικό ιστόγραμμα της ενέργειας ανά spin και κανονικά αναζυγισμένα ιστογράμματα για  $\beta = 0$ ,  $\beta = 0.2$ ,  $\beta = 0.4$  στο Ising μοντέλο σε πλέγμα  $20 \times 20$ . 10000 sweeps για ισορροπία και  $32 \times 10000$  sweeps μετρήσεων. Το σχήμα αναπαράχθηκε με χρήση του πακέτου STMC όπως εμφανίζεται στο [4].

Μια πολυκανονική προσομοίωση επιτρέπει την ορθή κανονικοποίηση της συνάρτησης επιμερισμού αν η θερμοκρασία  $\beta = 0$  περιλαμβάνεται στο φάσμα (4.33). Για όλα τα  $\beta$  το παραπάνω επιτυγχάνεται αν θεωρήσει κανείς την αντικατάσταση

$$Zln \rightarrow Zln + Zln_{dif}$$

όπου  $Zln$  η μεταβλητή που συζητήθηκε στην τελευταία ανάλυση ρουτίνας και  $Zln_{dif}$  η διαφορά μεταξύ του  $\ln Z$  όπως υπολογίζεται μετά από πολυκανονική προσομοίωση και αναζύγιση στη  $\beta = 0$ , και του ακριβούς αποτελέσματος

$$Z(0) = q^N \rightarrow \ln Z(0) = N \ln q$$

που προκύπτει αν  $\beta = 0$ . Με τη  $Z$  κανονικοποιημένη ακολουθεί αμέσως η **ελεύθερη ενέργεια Helmholtz**

$$F = -\beta^{-1} \ln Z$$

και η **εντροπία**

$$S = \frac{F - E}{T} = \beta(F - E)$$

της κανονικής συλλογής με τα  $F$ ,  $Z$ ,  $S$  να αναφέρονται, αν και όχι εκπεφρασμένα, σε αναμενόμενες τιμές. Στις μετρήσεις που διεξάγονται για τη δημιουργία των σχημάτων στα οποία θα

αναφερθούμε αμέσως έχουν υπολογιστεί αντί των παραπάνω οι ποσότητες

$$f = F/N, \quad s = S/N, \quad c = C/N$$

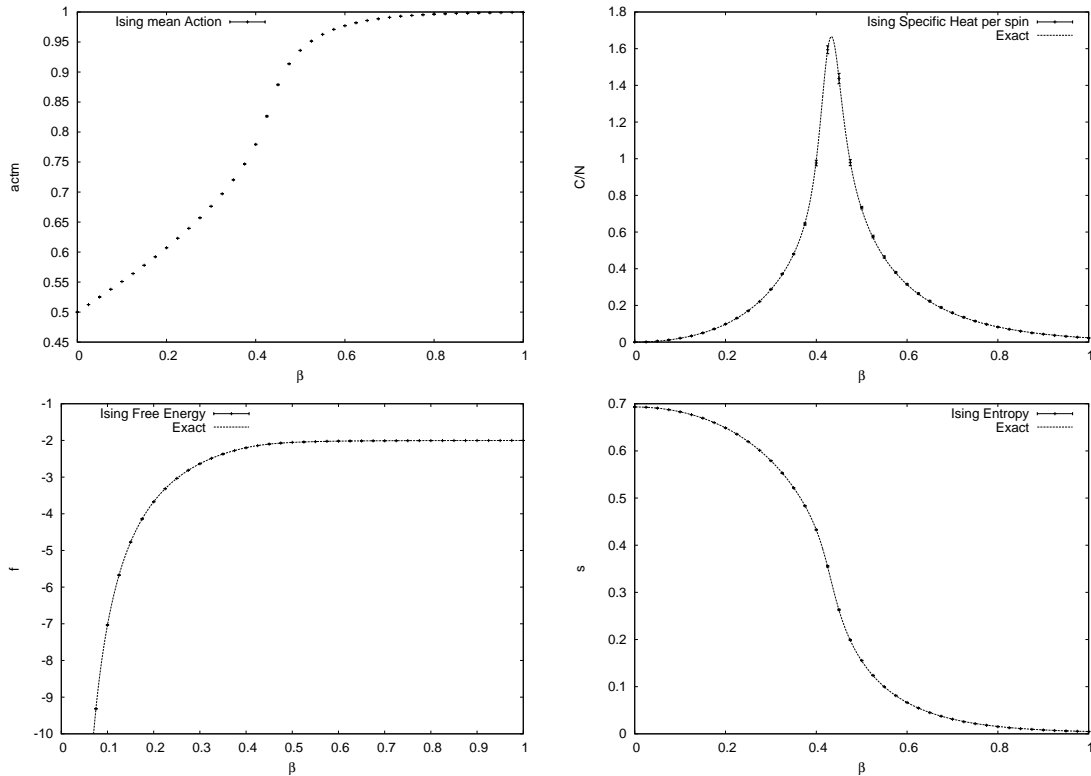
καθώς επίσης στα διαγράμματα ελεύθερης ενέργειας ανά spin φαίνεται και η ασυμπτωτική τιμή

$$f_{as} = \frac{2d}{q} - 2d - \beta^{-1} \frac{\ln q}{N}$$

η οποία προκύπτει αν από το όριο της συνάρτησης επιμερισμού για  $\beta \rightarrow \infty$

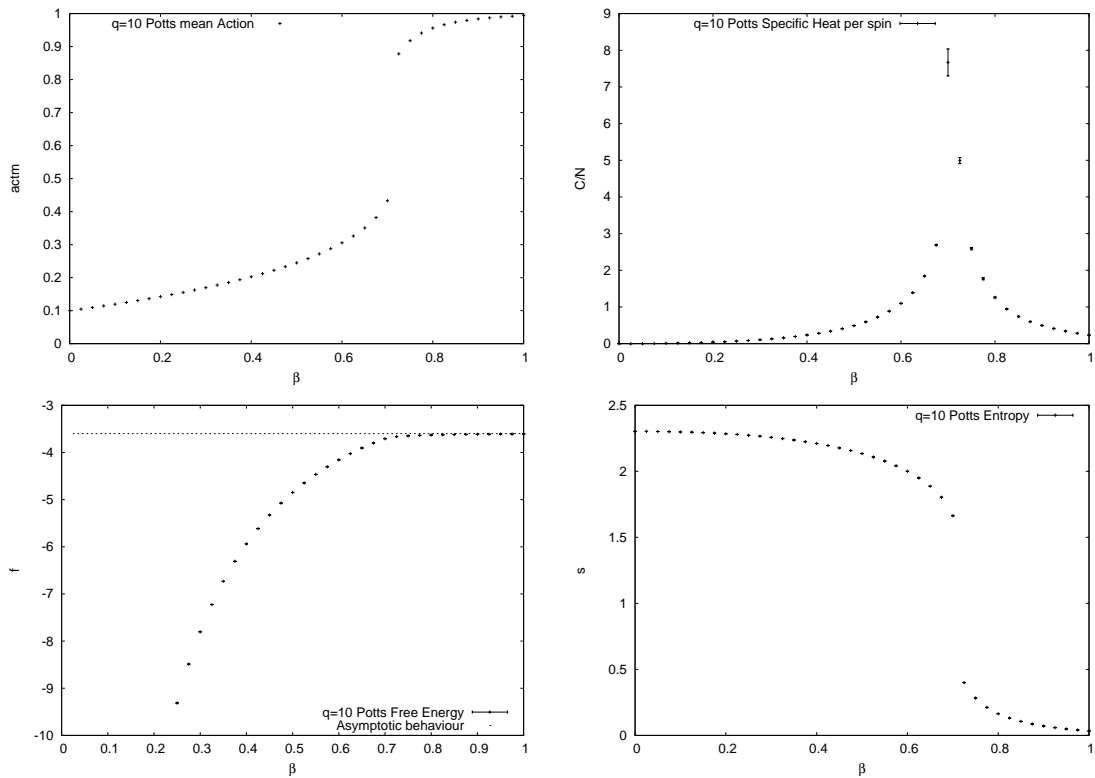
$$Z(\beta \rightarrow \infty) = q \exp(\beta 2dN - \beta 2d \frac{N}{q}).$$

Χρησιμοποιώντας τις πολυκανονικές μετρήσεις που διεξάγαμε για τη δημιουργία των πολυκανονικών ιστογραμμάτων, και με χρήση του προγράμματος *ana\_ptm.f* (βλ. Παράρτημα Β) κατασκευάζουμε τα σχήματα (4.11), (4.12). Φαίνονται οι μετρήσεις για τη δράση, την ειδική θερμότητα, την ελεύθερη ενέργεια και την εντροπία στα μοντέλα Ising και  $q = 10$  Potts. Στην περίπτωση του Ising έγιναν 10000 sweeps για επίτευξη ισορροπίας και  $32 \times 10000$  sweeps μετρήσεων σε πλέγμα  $20 \times 20$  ενώ στη δεύτερη περίπτωση αυξήσαμε τα sweeps κατά ένα παράγοντα 10.



Σχήμα 4.11: Δράση, ειδική Θερμότητα, ελεύθερη ενέργεια και εντροπία στο  $2d$  Ising. Φαίνονται μαζί και οι καμπύλες των αναλυτικών αποτελεσμάτων. Έγιναν 10000 sweeps για επίτευξη ισορροπίας και  $32 \times 10000$  sweeps μετρήσεων σε πλέγμα  $20 \times 20$ . Τα σχήματα παρουσιάστηκαν πρώτη φορά στο [Berg (2003)] και έχουν αναπαραχθεί με χρήση των προγραμμάτων του πακέτου STMC.

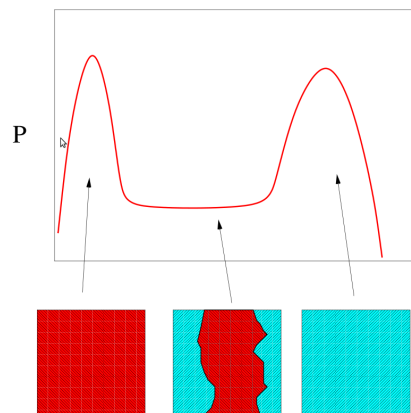




Σχήμα 4.12: Δράση, ειδική Θερμότητα, ελεύθερη ενέργεια και εντροπία στο  $2d$   $q = 10$  Potts. Στην καμπύλη ελεύθερης ενέργειας παρουσιάζεται και η ασυμπτωτική της συμπεριφορά. Έγιναν 100000 sweeps για επίτευξη ισορροπίας και  $32 \times 100000$  sweeps μετρήσεων σε πλέγμα  $20 \times 20$ . Τα σχήματα παρουσιάστηκαν πρώτη φορά στο [Berg (2003)] και έχουν αναπαραχθεί με χρήση των προγραμμάτων του πακέτου STMC.

### 4.3.3 Μέτρηση επιφανειακής τάσης

Όπως έχουμε ήδη αναφέρει, σε μια μετάβαση φάσης 1ης τάξης το σύστημα προτιμά να βρίσκεται σε μια περιοχή καταστάσεων ενέργειας  $E_{max}^1$  με μικρές αποκλίσεις και σε μια δεύτερη περιοχή που αντιστοιχεί σε ενέργεια  $E_{min}^2$  (όπου τα  $min$ ,  $max$  αναφέρονται στις κορυφές των ιστογραμμάτων). Οι καταστάσεις που αντιστοιχούν στις ενδιάμεσες ενέργειες όπως είδαμε καταπιέζονται εκθετικά περιορίζοντας το σύστημα σε μια από τις δύο "φάσεις" για σημαντικό χρόνο (ανάλογα με το μέγεθος του πλέγματος). Το το σύστημα βρίσκεται σε κάποια από τις δύο καθαρές φάσεις ανάλογα με τη θερμοκρασία: για  $\beta < \beta_c$  επικρατεί η μία και για  $\beta > \beta_c$  η άλλη. Για να βρεθεί το σύστημα στην ενδιάμεση περιοχή θα πρέπει να σχηματιστούν "μικτές" καταστάσεις που θα αποτελούνται και από τις δύο καθαρές φάσεις (βλ. σχήμα (4.13)), και οι οποίες διαχω-



Σχήμα 4.13: Καταστάσεις καθαρής και μικτής φάσης.

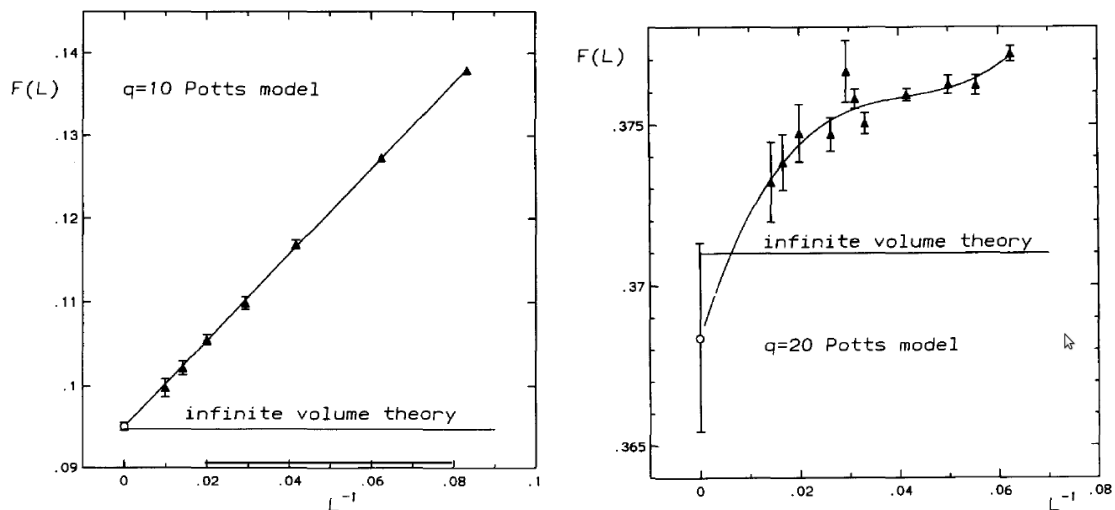
ρίζονται από **επιφάνειες** (interfaces). Η επιφάνεια αυτή φέρει επιπλέον **ελεύθερη ενέργεια**

$$f_A = f^s A$$

όπου  $A$  το εμβαδό της επιφάνειας και  $f^s$  η επιφανειακή τάση (surface tension), η μέτρηση της οποίας αποτελεί μια από τις σημαντικότερες εφαρμογές της πολυκανονικής μεθόδου στη στατιστική φυσική. Για δύο διαστάσεις και σε πλέγμα με περιοδικές συνοριακές συνθήκες  $A = 2L$  και έτσι βλέπει κανείς πώς προκύπτει η εκθετική καταπίεση των καταστάσεων μικτής φάσης

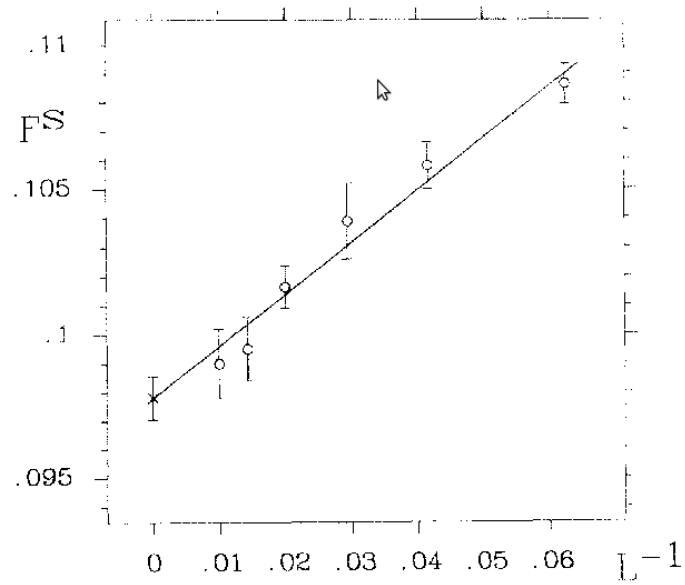
$$P_{min}/P_{max} \sim e^{f^s 2L}$$

Για να διεξάγουμε μετρήσεις της επιφανειακής τάσης όπως η τελευταία ορίζεται από την (4.5) θα πρέπει να υπολογίσουμε βέβαια με κάποιο τρόπο το λόγο  $R(L)$  και την ποσότητα  $A(L)$  για αυξανόμενο μέγεθος πλέγματος  $L$ . Τρέχουμε επομένως την πολυκανονική προσομοίωση για το δεδομένο διάστημα ενεργειών συλλέγοντας το πολυκανονικό ιστόγραμμα και κατόπιν αναζυγίζοντας παίρνουμε το κανονικό ιστόγραμμα (ακριβώς όπως στο σχήμα (4.8)). Το οποίο όμως τώρα μπορεί να μας δώσει ακριβή τιμή του λόγου  $R(L)$ . Προσοχή χρειάζεται στην αναζύγιση μιας και το κανονικό ιστόγραμμα που θα πάρουμε πρέπει να αντιστοιχεί στην κρίσιμη και όχι σε κάποια ψευδοκρίσιμη θερμοκρασία, πρέπει δηλαδή οι δύο κορυφές να είναι ισούψεις. Για το σκοπό αυτό μια πρώτη προσέγγιση είναι να τρέξουμε την αναζύγιση σε ένα φάσμα θερμοκρασιών κοντά στην κρίσιμη. Επαναλαμβάνοντας τέλος για διαφορετικές τιμές του  $L$  παίρνουμε μετρήσεις της επιφανειακής τάσης και εν συνεχεία της ελεύθερης ενέργειας. Τέτοιες μετρήσεις έχουν πραγματοποιηθεί στα [7] για ελεύθερη ενέργεια στο  $q = 10$ ,  $q = 20$  Potts σχήμα (4.14) και στο [6] για επιφανειακή τάση στο  $q = 10$  Potts, σχήμα (4.15). Η ακριβής



Σχήμα 4.14: Μετρήσεις ελεύθερης ενέργειας στο  $q = 10$  και  $q = 20$  Potts όπως παρουσιάζεται στο [7].

μέτρηση βέβαια της ελεύθερης ενέργειας όπως έχει γίνει στις εργασίες αυτές προϋποθέτει μια αρκετά λεπτομερέστερη και χρονοβόρα ανάλυση (φτάνει σε αρκετά μεγάλα μεγέθη πλέγματος) που δεν επιχειρείται στην παρούσα εργασία. Παρ' όλα αυτά τη δυνατότητα να διεξαχθεί η μέτρηση την προσφέρει η πολυκανονική μέθοδος βάσει της λογικής που παρουσιάσαμε.



Σχήμα 4.15: Μετρήσεις επιφανειακής τάσης στο  $q = 10$  Potts όπως παρουσιάζονται στο [6].

## Επίλογος

Αυτό που επιχειρήθηκε στην παρούσα διπλωματική είναι, αρχικά, να επιχειρηθεί μια εκτεταμένη και σχετικά αυστηρή παρουσίαση των βασικών αρχών της μεθόδου Monte Carlo και οι δυνατότητες που αυτή προσφέρει. Ακολούθως, έγινε προσπάθεια να αναδειχθεί, στα πλαίσια που το επέτρεπε ο χρόνος, η χρήση του πακέτου STMC για μέτρηση διαφόρων μεγεθών και να εμπλουτιστεί καταλλήλως για μετρήσεις μαγνήτισης στο γενικευμένο Potts μοντέλο όπως και για τη διενέργεια σειράς προσομοιώσεων Monte Carlo με στόχο μετρήσεις βρόχων υστέρησης, μαγνητικής επιδεκτικότητας και ιστογραμμάτων. Επιχειρήθηκε επιπλέον μια εισαγωγική ανάλυση της ευρέως χρησιμοποιούμενης για μεταβάσεις φάσης 1ης τάξης Πολυκανονικής Μεθόδου και των δυνατοτήτων που αυτή προσφέρει.

Η αίσθηση που αφήνει σε κάποιον η ενασχόληση με γενικευμένα μοντέλα όπως το μοντέλο Potts είναι εκείνη των πολυάριθμων δυνατοτήτων για εξερεύνηση που εμφανίζονται κατά τη μελέτη των ενδιαφερουσών ιδιοτήτων του. Η εξακρίβωση ήδη υπάρχοντων αποτελεσμάτων είναι επίσης μια πολύ ενδιαφέρουσα και καθόλου τετριμμένη εργασία. Η φύση της μεθόδου Monte Carlo είναι άκρως δυναμική, με μικρές αλλαγές στα συστήματα να απαιτούν πιθανώς μεγάλες αλλαγές στον υπολογιστικό τρόπο αντιμετώπισής τους, και η Πολυκανονική Μέθοδος ενδείκνυται για μια τέτοια μελέτη. Το σημαντικότερο πλεονέκτημα της μεθόδου είναι ότι παρέχει τη θερμοδυναμική για ένα ολόκληρο εύρος θερμοκρασιών σε μια και μόνο προσομοίωση, ενώ παραδοσιακά θα χρειαζόνταν αρκετές κανονικές προσομοιώσεις για μετρήσεις σε όλο το φάσμα. Το σημαντικό μειονέκτημά της είναι ότι απουσιάζουν γενικά σενάρια αναδρομής για προσαρμογή των βαρών σε κάθε περίπτωση συστήματος, όπως και τα αντίστοιχα προγράμματα ανάλυσης. Αυτά όμως είναι εμπόδια που ξεπερνώνται.

# Παράρτημα Α΄

## Fortran

Στο παράρτημα αυτό αναφέρονται τα βασικά χαρακτηριστικά της Fortran. Στα πλαίσια της περιγραφής αυτής θα έχει κάποιος την ευκαιρία να δει τα σημαντικότερα πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα της γλώσσας, αλλά και τους λόγους για τους οποίους αποτελεί (ή τουλάχιστον αποτελούσε μέχρι πριν μερικά χρόνια) συχνά την προτιμώμενη λύση για επιστημονικές εφαρμογές, όταν κανείς ενδιαφέρεται για υπολογιστική ταχύτητα.

Η Fortran είναι μια από τις παλαιότερες γλώσσες προγραμματισμού που συνεχίζουν να χρησιμοποιούνται. Αναπτύχθηκε αρχικά από την IBM κατά τη δεκαετία του '50 και το όνομά της προέρχεται από το *IBM Mathematical **F**ormula **T**ranslating **S**ystem*. Πρόκειται για μια προστακτική συναρτησιακή γλώσσα γενικού σκοπού και ενδείκνεται για αριθμητικούς υπολογισμούς (numerical computation) και επιστημονική υπολογιστική (scientific computing). Έχει δε αποτελέσει επί δεκαετίες την αγαπημένη γλώσσα των επιστημόνων σε κλάδους όπως η μετεωρολογία, η ανάλυση πεπερασμένων στοιχείων, η υπολογιστική ρευστομηχανική, η υπολογιστική φυσική και η υπολογιστική χημεία, και έχει γενικότερα κυριαρχήσει σε προβλήματα High Performance Computing όπως αυτά που συναντώνται σε ποικίλες πτυχές των εφαρμοσμένων επιστημών.

Οι κύριοι λόγοι που έχει επιβιώσει η Fortran μέχρι τις μέρες μας είναι οι εξής:

- είναι πολύ δημοφιλής στους κύκλους των επιστημόνων και των μηχανικών
- υπάρχει άφθονος κώδικας σε βιβλιοθήκες, υψηλής ποιότητας, τεσταρισμένος και πλήρως διορθωμένος (debugged) (για παράδειγμα, ένα μεγάλο ποσοστό του κώδικα στη Netlib[1] είναι γραμμένο σε Fortran)
- υπάρχουν ήδη πολλά έτοιμα επιστημονικά προγράμματα και εφαρμογές μηχανικών σε Fortran
- εξακολουθεί να είναι σχετικά εύκολη στην εκμάθηση και τη χρήση της
- η μεγάλη προσπάθεια που έχει καταβληθεί στην τελειοποίηση των compilers της Fortran έχει οδηγήσει στην παραγωγή εξαιρετικά γρήγορου κώδικα, καθιστώντας την την καλύτερη γλώσσα αν η ταχύτητα είναι το μόνο που ενδιαφέρει

Η πιο διαδεδομένη έκδοση της Fortran είναι η Fortran77, κυρίως λόγω των compilers (π.χ: f77, g77) και των ιδιαίτερα αποτελεσματικών επιπέδων βελτιστοποίησης (optimization levels) που διαθέτουν. Ακόμα και στην έκδοση αυτή όμως, διαθέτει σημαντικά μειονεκτήματα τα σημαντικότερα από τα οποία - στα πλαίσια του επιστημονικού προγραμματισμού - είναι:

- δεν προσφέρεται η δυνατότητα δυναμικής κατανομής της μνήμης (dynamic memory allocation) και για να τρέξει κανείς ένα μεγαλύτερο - ως προς τη χρησιμοποιούμενη μνήμη - πρόβλημα πρέπει να κάνει ξανά compile
- δεν υπάρχουν δομές (structures) ή συνδεδεμένα συστατικά (μιας και δεν υπάρχουν pointers)
- δεν υποστηρίζεται η πρόσβαση χαμηλού επιπέδου στα θεμελιώδεις λειτουργίες εισόδου/εξόδου (I/O primitives)
- ο χειρισμός των αλφαριθμητικών (Strings) δεν είναι άμεσος

Παρά τα προβλήματά της, η Fortran77 παραμένει ένα ισχυρό εργαλείο αφού οι διάδοχοί της, Fortran90 και Fortran95 δεν κατάφεραν να εξαπλωθούν γρήγορα και να τύχουν της ανάλογης προσοχής και βελτιστοποίησης. Όμως, τα τελευταία χρόνια παρατηρείται μια στροφή όλο και μεγαλύτερου μέρους του ενδιαφερόμενου κοινού προς τη Fortran90, στην οποία έχουν ήδη καλυφθεί ελλείψεις της προηγούμενης έκδοσης: υπάρχουν pointers, είναι δυνατή η δυναμική κατανομή μνήμης, υπάρχει βελτιωμένο συντακτικό για χειρισμό πινάκων και κάποια στοιχεία αντικειμενοστρεφή προγραμματισμού. Ο κώδικας έτσι γίνεται περισσότερο ευανάγνωστος και μαθηματικοποιημένος.

Πρέπει πάντως να τονιστεί ότι πολλές φορές σε υπολογιστικά απαιτητικές εργασίες αξίζει τον κόπο να δημιουργήσει κανείς, ή να αναζητήσει έτοιμα τα υποστρώματα ρουτίνων που θα του επιτρέψουν να καλύψει τις όποιες αρχικές ελλείψεις σε προγραμματιστικά χαρακτηριστικά. Έτσι με λίγη επιπλέον δουλειά μπορεί να απολαύσει τις δυνατές επιδόσεις της Fortran77 παρακάμπτοντας τις “τυπικές” δυσκολίες.

# Παράρτημα Β΄

## Οδηγός χρήσης του πακέτου STMC

Σε αρκετά σημεία στην εργασία αυτή έχουμε κάνει χρήση του κώδικα που συνοδεύει το [4], είτε για να εκτελέσουμε κάποια προσομοίωση με κύριο ενδιαφέρον σε ακριβή μέτρηση κάποιου μεγέθους είτε απλά για να παρουσιάσουμε κάποιο ενδιαφέρον διάγραμμα που εξυπηρετεί τον εκάστοτε σκοπό μας. Για το λόγο αυτό θα παραθέσουμε στο παράρτημα αυτό τον ακριβή τρόπο με τον οποίο χρησιμοποιήθηκαν τα κομμάτια του κώδικα στις παραπάνω περιπτώσεις, με σκοπό να βοηθηθεί ο αναγνώστης που επιθυμεί να τον χρησιμοποιήσει και δεν σκοπεύει να διατρέξει εξονυχιστικά το βιβλίο για να αντιληφθεί το ρόλο των διαφόρων μεταβλητών, common blocks, αρχείων κλπ. Είναι επίσης αρκετά χρήσιμο για μια δεύτερη χρήση του κώδικα και αναπαραγωγή των ίδιων αποτελεσμάτων χωρίς να χρειάζεται να έρθει κανείς πάλι αντιμέτωπος με τα ίδια προβλήματα. Δε θα εστιάσουμε φυσικά εδώ την προσοχή μας στον τρόπο με τον οποίο λειτουργεί ένας αλγόριθμος ή στο ρόλο της κάθε μεταβλητής - κάτι το οποίο γίνεται στο [4] - αλλά στις τροποποιήσεις που απαιτούνται για την κάθε περίπτωση, την είσοδο που πιθανώς παίρνει κάποιο πρόγραμμα και την έξοδό του. Τονίζεται δε ότι ο τρόπος με τον οποίο έχουν εκτελεστεί τα παραπάνω δε συνιστά σε καμία περίπτωση το βέλτιστο, παρά μόνο μια προσωπική προσέγγιση. Οι επεξηγήσεις δίνονται ανά κεφάλαιο και η δομή τους θα γίνει φανερή στο μεθέπόμενο κεφάλαιο Β.2. Ας δούμε όμως πρώτα τα βασικά χαρακτηριστικά του πακέτου προγραμμάτων για Monte Carlo στατιστικής φυσικής STMC, ώστε να διευκολυνθεί η παρουσίαση και κατανόηση του κώδικα.

### Β΄.1 Βασικά χαρακτηριστικά του STMC

### Β΄.2 Οδηγός αναπαραγωγής αποτελεσμάτων

Καταρχάς, η πλατφόρμα στην οποία τρέχουν τα προγράμματα είναι:

Ubuntu 9.10, Intel Pentium 4 CPU: 3.00 GHz 64-bit, DDRAM2 2x512 Mb

και ο compiler που χρησιμοποιείται είναι ο `fort77` Version 1.15 μιας και αυτός θεωρείται πιο διαδεδομένος από τους πιο σύγχρονους `f90`, `f95` για εργασίες τέτοιου είδους. Επίσης, όπου χρησιμοποιείται κάποιο επίπεδο βελτιστοποίησης του compiler, αυτό είναι το `f77-0`.

Κάτι που πρέπει να τονιστεί ακόμα είναι ότι αρκετές προσομοιώσεις γίνονται με χρήση της `RanLux` αντί της προεπιλεγμένης `RanMar`. Έτσι στις οδηγίες κάθε σχήματος θα αναφέρεται και η γεννήτρια που χρησιμοποιήθηκε. Παρ' όλα αυτά - εκτός αν αναφέρεται διαφορετικά - και οι δύο χρησιμοποιούνται με **τυχαία** αρχικοποίηση κάθε φορά, οπότε αν προσπαθήσετε να αναπαράγετε κάποιο σχήμα θα πρέπει να χρησιμοποιήσετε τα έτοιμα δεδομένα που συνοδεύουν την εργασία: διαφορετικά θα υπάρχουν μικρο-αποκλίσεις.

Γενικά, για το σχεδιασμό γραφημάτων χρησιμοποιείται το `gnuplot`[18]:

```
G N U P L O T
Version 4.2 patchlevel 5
last modified Mar 2009
System: Linux 2.6.31-21-generic
```

ενώ για την όποια επεξεργασία εικόνων που έχουν χρησιμοποιηθεί από εργασίες ή το διαδίκτυο, έχει χρησιμοποιηθεί το GIMP (**G**NU **I**mage **M**anipulator **P**rogram) [17].

Θα μας φανεί πολύ χρήσιμο να κρατήσουμε σε ένα αρχείο (π.χ: *pltform.plt* - προσοχή στην κατάληξη!) μια γενική φόρμα εντολών την οποία θα καλούμε για να κάνει την προκαταρκτική δουλειά. Μια μορφή του αρχείου αυτού είναι η παρακάτω:

```
#eps enhanced allows for greek letters
#e.g: "{/Symbol b}" -> beta, super/sub-scripts
set term postscript eps enhanced "Helvetica" 26
set output "img3.1.eps"
set autoscale
set key right top
set size 1.5,1.5
set title "Ising energy per spin time-series"
set xlabel "Sweeps"
set ylabel "e_{0s}"
```

και είναι προσαρμοσμένη για τη δημιουργία του γραφήματος χρονοσειρών 3.1. Έτσι λοιπόν, πριν κάνουμε **plot** τα δεδομένα του αρχείου που μας ενδιαφέρει ή μιας συνάρτησης καλούμε το παραπάνω script μέσα από το gnuplot με την εντολή:

```
call "pltform.plt"
```

(Βάσει της πρώτης γραμμής το γράφημα θα αποθηκευτεί στο αρχείο που καθορίζεται στη δεύτερη, επομένως δε θα δείτε κάποιο παράθυρο με την εικόνα να ανοίγει από μόνο του).

### B'.2.1 Κεφάλαιο 3

Υπολογισμός χρονοσειρών για το μοντέλο Ising με διαδοχική αναβάθμιση πλέγματος. Για τον υπολογισμό της ακριβούς λύσης θα πρέπει να μεταγλωττίσουμε το αρχείο */STMC/ForProg/Ferdinand/ferdinand.f*. Αν ο compiler σας δώσει μήνυμα σφάλματος (για ορισμό πίνακα μεταβλητού μεγέθους), μεταγλωττίστε με έναν πιο σύγχρονο όπως ο *f95*. Όσον αφορά την παραγωγή των δεδομένων, παρατίθεται το παρακάτω σκαρίφημα (όπως θα συμβαίνει και για κάθε σχήμα):

```
Programs: potts_ts.f
Changed : lat.dat, lat.par, potts.par, mc.par
Input   : from changed files
Output  : potts_ts.d : energy per spin + action timeseries for random
          +ordered start

call "pltform.plt"
y(x)=-1.10608
plot "./potts_ts.d" using 1:2 title "Ordered Start" with line 1, \
     "potts_ts.d" using 1:3 title "Random Start" with line 2, \
     y(x) title "Exact" with line 3
```



## Οδηγός αναπαραγωγής αποτελεσμάτων

όπου βέβαια οι πλάγιες γραμμές δε χρειάζονται αν γράψετε την εντολή σε μια γραμμή και από δω και μπρος θα χρησιμοποιούμε μόνο τα αρχικά γράμματα από τις οδηγίες προς το gnuplot, π.χ: *w l* αντί για *with line*.

Τυχαία αναβάθμιση.

```
Programs: potts_ts_r.f
Changed : lat.dat, lat.par, potts.par, mc.par
Input   : from changed files
Output  : potts_ts.d : energy per spin timeseries for random
          +ordered start

call "pltform.plt"
y(x)=-1.10608
plot "./potts_ts.d" u 1:2 ti "Ordered Start" w l 1, \
     "potts_ts.d" u 1:3 ti "Random Start" w l 2, \
     y(x) title "Exact" w l 3
```

### **B'.2.2 Κεφάλαιο 4**

Ιστόγραμμα δράσης σε ψευδοκρίσιμη θερμοκρασία.

**Γεννήτρια:** RanMar

```
Programs: potts_hist.f, ana_hist.f, gnuplot(plot "foo.d" \
          using 2:4:5 with err)
Changed : lat.dat, lat.par, potts.par, mc.par
Input   : from changed files
Output  : energy(action) histogram data
```

Ανάδειξη του ενεργειακού φράγματος στο Potts  $q = 4$  για αυξανόμενο μέγεθος πλέγματος. Οι κορυφές μεγίστου είναι κανονικοποιημένες στην πρώτη κορυφή του ιστογράμματος για  $L = 70$ . Οι στήλες 3,5 των σχετικών αρχείων περιλαμβάνουν το ιστόγραμμα ενέργειας ανά spin ενώ οι 2,4 το ιστόγραμμα δράσης.

**Γεννήτρια:** RanLux, level 4

```
Programs: potts_hist.f, ana_hist.f,
Changed : lat.dat, lat.par, potts.par, mc.par
Input   : from changed files
Output  : energy(action) histogram data (h2d04q0*.d)
Plotting: call "./pltform.plt" #properly modified
          plot [-2.5:-1.6] [11000:27000] \
             "./h2d04q024.d" u 3:($5+22000) ti "L=24" w his,\
             "./h2d04q032.d" u 3:($5+19000) ti "L=32" w his,\
             "./h2d04q038.d" u 3:($5+16500) ti "L=38" w his,\
             "./h2d04q050.d" u 3:($5+12142) ti "L=50" w his,\
             "./h2d04q060.d" u 3:($5+8000) ti "L=60" w his,\
             "./h2d04q070.d" u 3:5 ti "L=70" w his
```

Ανάδειξη του ενεργειακού φράγματος στο Potts  $q = 10$  για αυξανόμενο μέγεθος πλέγματος.

**Γεννήτρια:** RanLux, level 4

```

Programs: potts_hist.f, ana_hist.f,
Changed : lat.dat, lat.par, potts.par, mc.par
Input   : from changed files
Output  : energy(action) histogram data (h2d10q0*.d)
Plotting: call "./pltform.plt" #properly modified
         plot [4.5:11] \
            "./h2d10q070.d" u (-$3):(log($5)) ti "L=70" w his, \
            "./h2d10q060.d" u (-$3):(log($5)) ti "L=60" w his, \
            "./h2d10q050.d" u (-$3):(log($5)) ti "L=50" w his, \
            "./h2d10q038.d" u (-$3):(log($5)+.7) ti "L=38" w his, \
            "./h2d10q032.d" u (-$3):(log($5)+.9) ti "L=32" w his, \
            "./h2d10q024.d" u (-$3):(log($5)+1.8) ti "L=24" w his
    
```

Εφαρμογή της πολυκανονικής μεθόδου στο μοντέλο Ising 2 διαστάσεων σε πλέγμα  $20^2$ , σχεδιασμός του πολυκανονικού ιστογράμματος και των αναζυγισμένων ιστογραμμάτων στην κανονική συλλογή.

**Γεννήτρια:** RanMar με προεπιλεγμένο seed.

```

Programs: p_mu.f, ana_pmuh.f
Changed : lat.dat, lat.par, potts.par, mc.par, muca.par
Input   : from changed files
Output  : Action histogram data, canonically reweighted histograms
Plotting: call "pltform.plt" #properly modified
         plot [0.5:-2][0:] \
            "./hmu2d02q020.d" u 1:2:3 ti "multicanonical" w err, \
            "./hb2d02q020.d" u 1:2:5 ti "{/Symbol b}=0" w err, \
            "./hb2d02q020.d" u 1:4:5 ti "{/Symbol b}=0.2" w err, \
            "./hb2d02q020.d" u 1:6:7 ti "{/Symbol b}=0.4" w err
    
```

Παράθεση των ιστογραμμάτων του προηγούμενου σχήματος όπως συλλέγονται με διενέργεια κανονική προσομοίωσης Monte Carlo.

Μεταφερθείτε στον κατάλογο `STMC/Assignments/a0303_02/` και διαβάστε το αρχείο `readme`.

```

Programs: potts_hist.f, ana_h01.f (ana_hist.f: modified)
Changed : lat.dat, lat.par, potts.par, mc.par, muca.par
Input   : from changed files
Output  : Action histogram data
Plotting: call "pltform.plt" #properly modified
         plot [0.4:-2][0:6000] \
            "./h2d02q2.d" u 3:4:5 w err ti "MC {/Symbol b}=0.2", \
            "./h2d02q4.d" u 3:4:5 w err ti "MC {/Symbol b}=0.4"
    
```

Εφαρμογή της πολυκανονικής μεθόδου στο μοντέλο  $q = 10$  Potts 2 διαστάσεων σε πλέγμα  $20^2$ , σχεδιασμός του πολυκανονικού ιστογράμματος και του κανονικά αναζυγισμένου στην κρίσιμη θερμοκρασία.

**Γεννήτρια:** RanMar με προεπιλεγμένο seed.

```

Programs: p_mu.f, ana_pmuh.f
Changed : lat.dat, lat.par, potts.par, mc.par, muca.par
    
```

```
Input   : from changed files
Output  : multicanonical action histogram & canonically
          reweighted histogram data
Plotting: call "pltform.plt" #properly modified
          set log y
          plot [.:][40:2000] \
              "./hmu2d10q020.d" u 1:3:4 ti "Multicanonical" w err,\
              "./hb2d10q020.d" u 1:5:6 ti "{/Symbol b}=0.71" w err
```

Εφαρμογή της πολυκανονικής μεθόδου στη λήψη μετρήσεων μέσης δράσης, ειδικής θερμότητας, ελεύθερης ενέργειας και εντροπίας για το μοντέλο Ising 2 διαστάσεων. Στην περίπτωση αυτή και μόνο παρουσιάζονται τα δεδομένα που παράγει η μέθοδος σε αντιπαραβολή με τα ακριβή αποτελέσματα όπως έχουν παρουσιαστεί στο [8]. Η συμφωνία είναι απόλυτη.

```
Programs: p_mu.f, ana_pmu.f (Multicanonical data),
          /STMC/ForProg/Ferdinand/ferdinand.f
          (Exact results for Ising). Compile with f95
Changed  : lat.dat, lat.par, potts.par, mc.par, muca.par
Input    : from changed files
Output   : multicanonical data for 2d Ising. Applied for:
          Mean Action per spin, Specific Heat per spin,
          Free Energy per spin, Entropy per spin
Plotting: call "pltform.plt" #properly modified
#Free Energy per spin
  plot [.:][-10:-1] "./F2d02q020.d" u 1:3:4 w err ti "Ising Free Energy",
          "./ferdi.D" u 1:2 w l ti "Exact"
#Specific Heat per spin
  plot "./C2d02q020.d" u 1:3:4 w err ti "Ising Specific Heat per spin",
          "./ferdi.D" u 1:6 w l ti "Exact"
#Entropy:
  plot "./S2d02q020.d" u 1:3:4 w err ti "Ising Entropy",
          "./ferdi.D" u 1:5 w l ti "Exact"
#Mean Action
  plot "./a2d02q020.d" u 1:3:4 w err ti "Ising mean Action"
```

Με τον ίδιο τρόπο μπορεί κανείς να πάρει τις παραπάνω καμπύλες και για τα  $q = 4, 10$  Potts χωρίς βέβαια τα αναλυτικά αποτελέσματα.



# Βιβλιογραφία

- [1] Netlib Repository at UTK and ORNL. Netlib is a collection of mathematical software, papers, and databases. <http://www.netlib.org/>.
- [2] Bernd A. Berg. Introduction to multicanonical monte carlo simulations. *Fields Inst. Commun.* 26 (2000) 1. arXiv:cond-mat/9909236v1.
- [3] Bernd A. Berg. Generalized ensemble simulations for complex systems. *Computer Physics Communications*, 147(1-2):52 – 57, 2002.
- [4] Bernd A. Berg. *Markov chain Monte Carlo simulations and their statistical analysis*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Hackensack, NJ, 2004. With web-based Fortran code.
- [5] Bernd A. Berg and Thomas Neuhaus. Multicanonical algorithms for first order phase transitions. *Physics Letters B*, 267(2):249 – 253, 1991.
- [6] Bernd A. Berg and Thomas Neuhaus. Multicanonical ensemble: A new approach to simulate first-order phase transitions. *Phys. Rev. Lett.*, 68(1):9, Jan 1992.
- [7] Alain Billoire, Thomas Neuhaus, and Bernd A. Berg. A determination of interface free energies. *Nuclear Physics B*, 413(3):795 – 812, 1994.
- [8] Arthur E. Ferdinand and Michael E. Fisher. Bounded and inhomogeneous ising models. i. specific-heat anomaly of a finite lattice. *Phys. Rev.*, 185(2):832–846, Sep 1969.
- [9] B. Grossmann and M.L. Laursen. preprint. *HLRZ-93-7*.
- [10] Kenneth G. Hamilton. Assembler ranlux for pcs. *Computer Physics Communications*, 101(3):249 – 253, 1997.
- [11] Bobby Hesselbo and R. B. Stinchcombe. Monte carlo simulation and global optimization without parameters. *Phys. Rev. Lett.*, 74(12):2151–2155, Mar 1995.
- [12] Martin Luescher. A portable high-quality random number generator for lattice field theory simulations. *Comput. Phys. Commun.*, 79:100 – 110, 1994. arXiv:hep-lat/9309020v1.
- [13] Franz Mandl. *Statistical Physics*. John Wiley and Sons Ltd., 1988.
- [14] George Marsaglia, Arif Zaman, and Wai Wan Tsang. Toward a universal random number generator. *Statistics and Probability Letters*, 9(1):35 – 39, 1990.

- 
- [15] Kai Nordlund. Course materials on: Basics of monte carlo simulations, monte carlo simulations in physics. Professor in Computational Materials Physics, University of Helsinki <http://www.gimp.org/http://beam.acclab.helsinki.fi/~knordlun/mc/>.
- [16] Kari Rummukainen. Lecture notes on monte carlo simulation methods. Professor of theoretical particle physics, University of Oulu, <http://cc.oulu.fi/~tf/tiedostot/pub/montecarlo/>.
- [17] Peter Mattis Spencer Kimball and the GIMP Development Team. Gnu image manipulation program, version 2.6.7. <http://www.gimp.org/>.
- [18] Colin Kelley Thomas Williams and many others. Gnuplot. <http://www.gnuplot.info>.
- [19] G. M. Torrie and J. P. Valleau. Nonphysical sampling distributions in monte carlo free-energy estimation: Umbrella sampling. *Journal of Computational Physics*, 23(2):187 – 199, 1977.
- [20] Simon Trebst, David A. Huse, and Matthias Troyer. Optimizing the ensemble for equilibration in broad-histogram monte carlo simulations. *Phys. Rev. E*, 70(4):046701, Oct 2004.
- [21] Fugao Wang and D. P. Landau. Efficient, multiple-range random walk algorithm to calculate the density of states. *Phys. Rev. Lett.*, 86(10):2050–2053, Mar 2001.
- [22] Lee Young. 8.044 statistical physics i, Spring 2008. (Massachusetts Institute of Technology: MIT OpenCourseWare), <http://ocw.mit.edu> (Accessed 31 May, 2010). License: Creative Commons BY-NC-SA.