



UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO - MATEMATIČKI
FAKULTET
DEPARTMAN ZA FIZIKU



Termodinamičke karakteristike Izingovog modela na prostim (hiper)kubnim rešetkama

- master rad -

Mentor:

dr Slobodan Radošević

Kandidat:

Miloš Adamović

Novi Sad, 2016.

Sadržaj

Uvod	5
1 Izingov model	7
1.1 Jednodimenzioni Izingov model	9
1.2 Dvodimenzioni Izingov model	10
1.2.1 Rešetka 2×2	13
1.3 Kritični eksponenti	15
1.4 Granični uslovi	17
2 Monte Karlo metod	21
2.1 Osnove Monte Karlo metoda	21
2.2 Markovljev proces i Metropolisov algoritam	23
2.3 Određivanje greške Monte Karlo metoda	25
2.4 Generator slučajnih brojeva	25
3 Poređenje egzaktnog rešenja sa rezultatima Monte Karlo simulacije	27
3.1 Metropolisov algoritam Izingovog feromagneta	27
3.2 Poređenje rezultata za rešetku 2×2	28
4 Monte Karlo simulacija na prostim (hiper)kubnim rešetkama	31
4.1 Monte Karlo simulacija jednodimenzionog Izingovog feromagneta	31
4.2 Monte Karlo simulacija dvodimenzionog Izingovog feromagneta	34
4.2.1 Termodynamičke veličine 2D sistema	34
4.2.2 Kritična temperatura 2D sistema	37
4.2.3 Kritični eksponenti 2D modela	39
4.3 Monte Karlo simulacija trodimenzionog Izingovog feromagneta	40
4.3.1 Termodynamičke veličine 3D sistema	40
4.3.2 Kritična temperatura 3D sistema	42
4.3.3 Kritični eksponenti 3D sistema	43
4.4 Monte Karlo simulacija četvorodimenzionog Izingovog feromagneta	44
4.4.1 Termodynamičke veličine 4D sistema	44
4.4.2 Kritična temperatura 4D sistema	46
4.4.3 Kritični eksponenti 4D sistema	48
4.5 Uticaj generatora slučajnih brojeva na Monte Karlo simulaciju	49
4.5.1 Pregled kritičnih temperatura	51
Zaključak	55
A Osnovni kod	57

B Programski kod generatora slučajnih brojeva	63
Literatura	65

Uvod

Izingov model danas predstavlja jedan od često korišćenih modela u statističkoj fizici, i važi za model od izuzetnog značaja u teoriji interagujućih sistema. Iako je ovaj model predložen još davne 1920. godine, kao jednostavan model koji bi objasnio pojavu feromagnetizma, interesovanje za njega nije opalo tokom vremena. Izingov model je ipak ostao model sa kojim se generalno upoznaje u okviru proučavanja interagujućih sistema.

Istorijski gledano ovaj model je predložio Lenc 1920. godine, i dao ga svom studentu E. Izingu da odredi egzaktno rešenje. Izing je našao egzaktno rešenje za slučaj jednodimenzionog sistema 1925. godine [1]. Generalno gledano sam model bi trebao nositi naziv Lenc - Izingov model ali je ipak ostalo ime čoveka koji je odredio egzaktno rešenje za jednodimenzionalni slučaj. Posle određivanja egzaktnog rešenja u jednoj dimenziji Izing nije bio zadovoljan što model nije pokazao postojanje faznog prelaza na nekoj konačnoj temperaturi, pa je stoga zapostavio dalji rad na razvoju modela i uopštavanju na dve i tri dimenzije [2]. Iako je Izing zapostavio rad na modelu, neki su ipak nastavili. Određivanje egzaktnog rešenja dvodimenzionog modela i činjenice da je pokazao postojanje faznog prelaza druge vrste bilo je od velikog značaja za teoriju faznih prelaza i generalno statističku fiziku. Naime, statističku sumu a na osnovu nje slobodnu energiju i toplotni kapacitet dvodimenzionog sistema u odsustvu spoljašnjeg magnetnog polja prvi je odredio Onzager 1944. godine [3]. Jang 1952. godine publikuje rešenje za spontanu magnetizaciju sistema [4].

Danas se u literaturi odomačio izraz Onzager - Jangovo rešenje dvodimenzionog Izingovog modela koje obuhvata doprinose oba pomenuta naučnika na određivanju egzaktnog rešenja dvodimenzionog sistema. Vremenom su usledila neka pojednostavljenja Onzager - Jangovog rešenja pošto njega generalno odlikuje komplikovanost samog postupka razmatranja dvodimenzionog sistema [5, 6]. Godine 1964. su Lib, Šulc i Matis objavili rešenje dvodimenzionog modela u kojem su oni koristili tretman pomoću kojeg je Izingov model sveden na gas neinteragujućih fermiona [7, 8]. Mnogi radovi koji su usledili su svakako dodatno doprineli razvoju modela koji je Izing generalno zanemario, ali je zadržao slavu da po njemu model nosi naziv jer je izazvao interesovanje kod drugih koji su ga dalje proučavali.

Ispostavilo se da se Izingov model može iskoristiti za opis nekih realnih jedinjenja poput CoCs_3Cl , CoRb_3Cl_5 , DyPO_4 [9]. Izingov model je takođe iskorišćen i za razmatranje nekih bioloških i društvenih sistema [9]. Sistemi binarnih legura takođe su tretirani Izingovim modelom [9]. Postojanje sistema koji se mogu razmatrati datim modelom je podgrejalo pažnju za razmatranje Izingovog modela. Poznavanje egzaktnog rešenja u jednodimenzionom i dvodimenzionom slučaju svakako daje dosta dobru podlogu za dalje razmatranje generalizacija modela ne bi li mogao poslužiti za razmatranje realnih sistema. Izingov model se razmatra i u trodimenzionom slučaju iako do danas nije određeno egzaktno rešenje za ovaj sistem. Pri razmatranju trodimenzionog Izingovog modela koriste se aproksimativne i numeričke metode poput Monte Karlo simulacija. Monte Karlo simulacijama se mogu odrediti kritična temperatura i tip faznog prelaza kod trodimenzionog modela. U ovom tekstu je razmatrana Monte Karlo simulacija Izingovog modela.

U prvom odeljku su date osnovne postavke Izingovog modela, uz prikaz opštih postavki egzaktnih rešenja jednodimenzionog i dvodimenzionog sistema. Posebno će pri predstavljanju egzaktnog rešenja jednodimenzionog sistema biti razmatrani slučajevi sa i bez prisustva spoljašnjeg magnetnog polja.

Egzaktno rešenje dvodimenzionog sistema će biti dato kao prikaz rešenja do kojih su došli Onzager i Jang.

Drugi odeljak je rezervisan za uvodnu priču o Monte Karlo metodu i njegovoju primeni za analizu sistema poput Izingovog modela. U odeljku koji zatim sledi dat je prikaz poređenja rezultata Monte Karlo simulacije sa rezultatima koje imamo na osnovu korišćenja egzaktnih rešenja. Testiranjem Monte Karlo simulacije na sistemima sa poznatim egzaktnim rešenjima dobijamo na sigurnosti da našu simulaciju možemo generalisati na sisteme za koje ne postoji trenutno egzaktno rešenje, poput trodimenzionog Izingovog modela.

U četvrtom odeljku su dati rezultati Monte Karlo simulacije Izingovog modela na (hiper)kubnim rešetkama, gde je dat pregled kritičnih temperatura, kritičnih indeksa kao parametara od značaja u teoriji faznih prelaza.

Konačno u Prilogu A je dat osnovni programski kod koji je korišćen za Monte Karlo simulaciju Izingovog modela, dok je u Prilogu B dat programski kod generatora slučajnih brojeva koji je korišćen pri simulaciji a koji predstavlja centralni deo Monte Karlo algoritma.

Glava 1

Izingov model

Kao što je u uvodu rečeno, Izingov model je uveden prvenstveno sa namerom da se objasni pojava feromagnetizma. Generalno pri opisu feromagnetizma pratimo ponašanje magnetnih momenata, tj. spinova. Izingov model tretira feromagnet kao skup spinova koji se nalaze na čvorovima d-dimenzione rešetke. Svojstveno ovom modelu je da je svakom spinu zadržana samo z komponenta, odnosno spinovi na čvorovima rešetke mogu uzimati samo vrednosti $+1$ (spin gore (up)) ili -1 (spin dole (down)). Izingov model se stoga tretira kao klasični model i opisan je sledećim hamiltonijanom [9–11]:

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - \mu_B B \sum_i S_i \quad (1.1)$$

gde su S_i lokalizovani spinovi koji mogu uzimati vrednosti ± 1 . Prva suma u hamiltonijanu Izingovog modela predstavlja sumiranje po parovima susednih spinova¹. Interakcija između spinova, zvana čak i integral izmene ili interakcija izmene, je data parametrom J_{ij} ². Drugi član u hamiltonijanu Izingovog modela predstavlja interakciju spinova sa spoljašnjim magnetnim poljem jačine B . U zavisnosti od interakcije izmene javljaju se različita uređenja sistema spinova datih ovim modelom. Ukoliko je $J_{ij} > 0$ spinovi će težiti da se orijentisu paralelno, odnosno postoji feromagnetno uređenje, a ako je $J_{ij} < 0$ postojaće tendencije spinova da se orijentisu antiparalelno, tj. javlja se antiferomagnetno uređenje.

Na osnovu poznavanja hamiltonijana sistema mogu se odrediti termodinamičke veličine od značaja jednostavnom primenom znanja statističke fizike. Na početku postavlja se zadatak određivanja particione funkcije³ sistema spinova, jer njenim poznavanjem mogu se odrediti sve potrebne termodinamičke funkcije poput unutrašnje energije i toplotnog kapaciteta. Particiona funkcija za rešetku sa N spinova je definisana kao:

$$Z = \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} \exp(-\beta H) = \sum_{\{S\}} \exp(-\beta H) \quad (1.2)$$

gde sumiranje ide po svim mogućim konfiguracijama spinova $\{S\}$, a koristi se definicija $\beta = \frac{1}{k_B T}$. Očekivana (srednja) vrednost unutrašnje energije sistema je data na osnovu poznavanja particione funkcije kao:

$$\langle E \rangle = Z^{-1} \sum_{\{S\}} H \exp(-\beta H) = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \quad (1.3)$$

¹Obično su to prvi susedi.

²Često je opravdano uzeti da interakcija izmene ne zavisi od pozicije, tj. $J_{ij} = J$

³Statistička suma

Korisno je uvesti i očekivanu vrednost kvadrata unutrašnje energije:

$$\langle E^2 \rangle = Z^{-1} \sum_{\{S\}} H^2 \exp(-\beta H) = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} \quad (1.4)$$

Toplotni kapacitet je funkcija koja se lako dobija poznavanjem očekivanih vrednosti unutrašnje energije i kvadrata unutrašnje energije:

$$C_v = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = -\beta^2 \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta} = \beta^2 [\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2] \quad (1.5)$$

U okviru priče o feromagnetizmu (antiferomagnetizmu) nezaobilazna veličina je magnetizacija. Ukupni magnetni moment sistema se dobija jednostavno:

$$M = \sum_i S_i \quad (1.6)$$

dok je magnetizacija data kao usrednjeni ukupni magnetni moment sistema:

$$\langle M \rangle = Z^{-1} \sum_{\{S\}} M \exp(-\beta H) \quad (1.7)$$

Često se određuje i vrednost apsolutne magnetizacije:

$$\langle |M| \rangle = Z^{-1} \sum_{\{S\}} |M| \exp(-\beta H) \quad (1.8)$$

Određivanje apsolutne magnetizacije se pokazalo kao korisno pri radu sa Monte Karlo simulacijama Izingovog sistema. Korišćenje definicije (1.7) nije pogodno za Monte Karlo simulaciju Izingovog feromagneta. Naime, pokazalo se da postoji konačna verovatnoća da u nekom koraku svi spinovi na rešetki okrenu znak, odnosno da $M \rightarrow -M$ [12]. Ukoliko se ne bi koristila apsolutna magnetizacija kao rezultat simulacije bi se dobilo pogrešno rešenje $\langle M \rangle = 0$.

Poznavanjem magnetizacije lako se da odrediti veličina magnetne susceptibilnosti na osnovu definicije:

$$\chi = \left. \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial B} \right|_{B=0} \quad (1.9)$$

Određivanjem vrednosti magnetizacije i kvadrata magnetizacije susceptibilnost se određuje na osnovu definicije:

$$\chi = \beta [\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2] \quad (1.10)$$

ili ako se koristi vrednost apsolutne magnetizacije⁴:

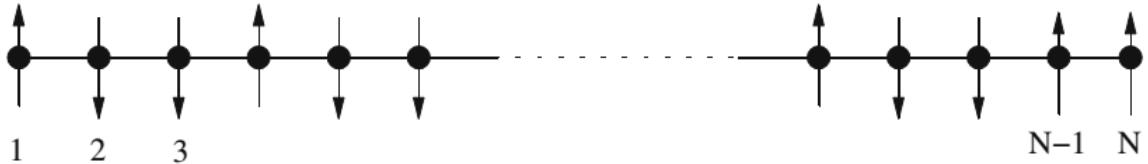
$$\chi' = \beta [\langle M^2 \rangle - \langle |M| \rangle^2] \quad (1.11)$$

Definicije (1.3)-(1.11) korišćene su i pri Monte Karlo simulaciji Izingovog feromagneta čiji su rezultati dati u okviru četvrtog odeljka.

⁴Oznaka ' samo sugerije korišćenje vrednosti apsolutne magnetizacije pri računu.

1.1 Jednodimenzioni Izingov model

U okviru uvoda je istaknuto da je Izing odredio egzaktno rešenje za sistem spinova datih hamiltonijanom (1.1) u jednoj dimenziji i na osnovu rešenja je došao do zaključka da jednodimenzioni model ne pokazuje postojanje faznog prelaza. Jednodimenzioni sistem spinova je ništa drugo do jednostavni lanac spinova koji mogu uzimati vrednost $S_i = \pm 1$ i mogu interagovati sa svojim susedima interakcijom J_{ij} . Razlikujemo dva slučaja tretiranja jednodimenzionog sistema, sistem u spoljašnjem magnetnom polju i bez magnetnog polja. Za oba prethodna slučaja postoji egzaktno rešenje, a dodatno u aproksimaciji interakcije najbližih suseda.



Sl. 1.1: Jednodimenzioni Izingov model sa lokalizovanim spinovima (prema [9])

Kada ne postoji interakcija spinova sa spoljašnjim magnetnim poljem ($B = 0$), hamiltonijan sistema je:

$$H = - \sum_{i=1}^{N-1} J_i S_i S_{i+1} \quad (1.12)$$

Particiona funkcija se dobija na osnovu definicije (1.2) (videti [9]):

$$Z_N = 2^N \prod_{i=1}^{N-1} \cosh(\beta J_i) \quad (1.13)$$

Definišimo dodatno tzv. spinsku korelacionu funkciju:

$$\Gamma_k(r) = \langle S_k S_{k+r} \rangle = \frac{1}{Z_N} \sum_{\{S\}} S_k S_{k+r} \exp\left(\sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1}\right) \quad (1.14)$$

Ova veličina se dovodi u vezu sa particionom funkcijom praćenjem prethodne definicije:

$$\Gamma_k(r) = \frac{1}{Z_N} \frac{\partial}{\partial j_k} \frac{\partial}{\partial j_{k+1}} \frac{\partial}{\partial j_{k+2}} \cdots \frac{\partial}{\partial j_{k+r-1}} Z_N = \tanh^r(\beta J) \quad (1.15)$$

Pošto korelaciona funkcija daje opis uticaja spinova jednih na druge, pokazalo se da je ona u tesnoj vezi sa magnetizacijom [9]:

$$M_S(T) = \mu_B \langle S \rangle = \mu_B \lim_{j \rightarrow \infty} \langle S_i S_{i+j} \rangle = \mu_B \begin{cases} 0, & T \neq 0 \\ 1, & T = 0 \end{cases} \quad (1.16)$$

Na osnovu prethodne relacije jasno je da nema spontane magnetizacije u Izingovom lancu na konačnim temperaturama kada ne postoji uticaj spoljašnjeg magnetnog polja.

Drugi slučaj koji se razmatra je svakako Izingov lanac spinova u spoljašnjem magnetnom polju ($B \neq 0$). Ukoliko se uvede oznaka $\mu_B B \equiv h$ za hamiltonijan sistema spinova u spoljašnjem magnetnom polju se dobija:

$$H = - \sum_{k=1}^N J_k S_k S_{k+1} - h \sum_{k=1}^N S_k \quad (1.17)$$

Particiona funkcija se dobija na osnovu njene definicije (1.2) za slučaj kada postoji interakcija sa spoljašnjim magnetnim poljem:

$$Z_N = \sum_{\{S\}} \exp\left(\sum_{k=1}^N (\beta J_k S_k S_{k+1} + \beta h S_k)\right) \quad (1.18)$$

Određivanje particione funkcije lanca spinova u spoljašnjem magentnom polju se olakšava uvođenjem tzv. transfer matrice T sa elementima:

$$\langle S | \hat{T} | S' \rangle = \exp(\beta J S S' + \frac{1}{2} \beta h (S + S')) \quad (1.19)$$

Pošto spinovi S, S' mogu uzimati vrednosti ± 1 lako se zaključuje da će transfer matrica biti matrica 2×2 . Dalje, na osnovu uvedene definicije transfer matrice za particionu funkciju se dobija [9]:

$$Z_N = \sum_{\{S\}} \langle S_1 | \hat{T} | S_2 \rangle \langle S_2 | \hat{T} | S_3 \rangle \cdots \langle S_N | \hat{T} | S_1 \rangle = \text{Tr}(\hat{T}^N) = \lambda_+^N + \lambda_-^N \quad (1.20)$$

gde je [9]:

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta J} \left(\cosh \beta h \pm \sqrt{\cosh^2 \beta J - 2e^{-2\beta J} \sinh(2\beta J)} \right) \quad (1.21)$$

Drugim rečima particiona funkcija lanca spinova predstavlja jednostavnu sumu svojstvenih vrednosti transfer matrice. Poznavanjem particione funkcije može se odrediti slobodna energija sistema korišćenjem definicije:

$$F = -k_B T \ln Z \quad (1.22)$$

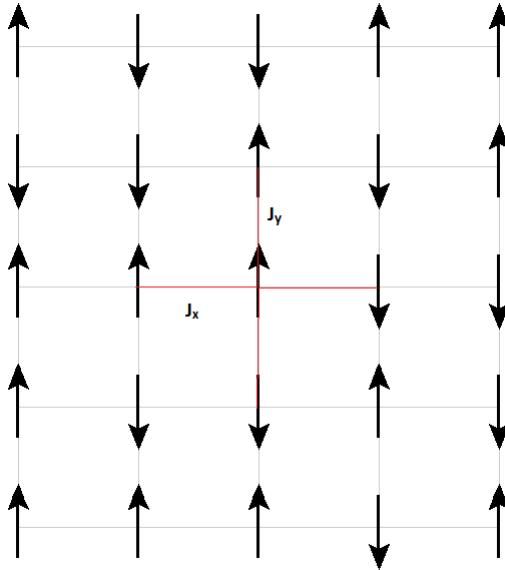
a na osnovu slobodne energije lako se mogu odrediti druge termodinamičke veličine [10, 13, 14].

1.2 Dvodimenzioni Izingov model

Dvodimenzioni Izingov model predstavlja sistem spinova koji se nalaze na čvorovima dvodimenzione rešetke sa N vrsta i M kolona. Među spinovima postoje interakcije duž pravaca u rešetki. Hamiltonijan ovakvog sistema bi se generalno mogao zapisati kao [8]:

$$H = -J_y \sum_{\langle n,m \rangle} S_{nm} S_{n+1,m} - J_x \sum_{\langle n,m \rangle} S_{nm} S_{n,m+1} - \mu_B B \sum_{n,m} S_{nm} \quad (1.23)$$

gde (n, m) predstavlja mesto čvora u rešetki, J_y i J_x su interakcije izmene duž kolona i redova, a treći član hamiltonijana predstavlja interakciju sa spoljašnjim magnetnim poljem.



Sl. 1.2: Dvodimenzioni Izingov sistem spinova sa interakcijama najbližih suseda J_x i J_y

Onzager je 1944. godine uspeo da odredi egzaktno rešenje dvodimenzionog Izingovog modela razmatrajući kvadratnu rešetku bez prisustva spoljašnjeg magnetnog polja [3]. On je odredio particionu funkciju a na osnovu nje slobodnu energiju i toplotni kapacitet dvodimenzionog Izingovog sistema spinova. Njegovo rešenje prati reputacija generalno komplikovanog pristupa pa su vremenom pronađeni pristupačniji metodi za egzaktno rešenje. Pristup koji su u svom radu dali Lib, Šulc i Matis, gde su Izingov model sveli na sistem neinteragujućih fermiona svakako predstavlja metod koji je lakši za rad [8].

Za slobodnu energiju obračunatu po čvoru rešetke Onzager je dobio [7]:

$$f = -k_B T \left[\ln 2 + \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\pi \int_0^\pi dq_1 dq_2 \ln(\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_1 \cos q_1 - \sinh 2K_2 \cos q_2) \right] \quad (1.24)$$

uz korišćene definicije:

$$K_1 = \frac{J_1}{k_B T}, \quad K_2 = \frac{J_2}{k_B T} \quad (1.25)$$

Onzagerov izraz za toplotni kapacitet:

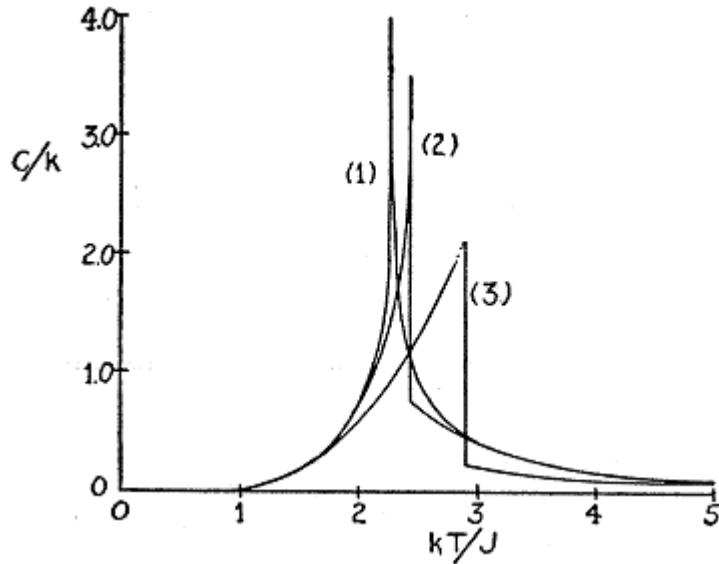
$$\frac{C_v}{k_B} = \frac{2}{\pi} [K \coth K]^2 [2\kappa(q) - 2\epsilon(q) - (1 - q'')[\frac{\pi}{2} + q''\kappa(q)]] \quad (1.26)$$

gde je uzeto da je $J_1 = J_2 = J$, i pri čemu su korišćene definicije:

$$K = \frac{J}{k_B T}, \quad q = \frac{2 \sinh(2K)}{\cosh^2(2K)}, \quad q'' = 2 \tanh^2(2K) - 1 \quad (1.27)$$

a takođe se u računu pojavljuju i dva eliptička integrala:

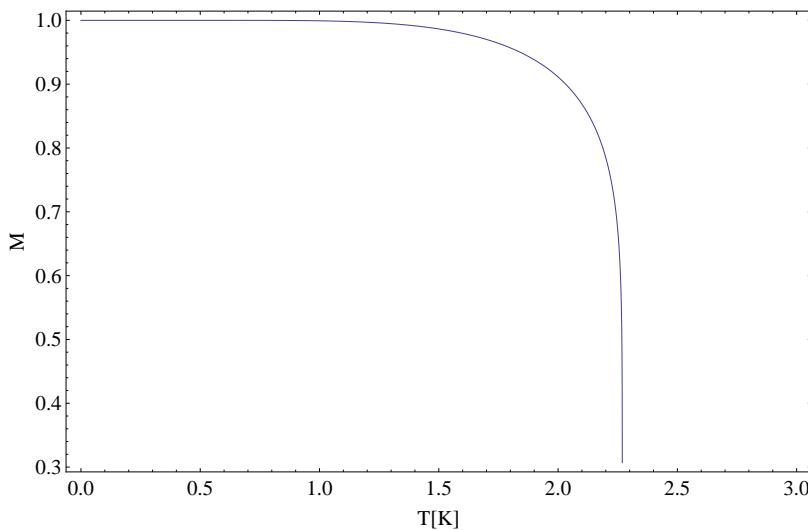
$$\kappa(q) = \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{\sqrt{1 - q^2 \sin^2 \varphi}}, \quad \epsilon(q) = \int_0^{2\pi} d\varphi \sqrt{1 - q^2 \sin^2 \varphi} \quad (1.28)$$



Sl. 1.3: Topotni kapacitet dvodimenzionog Izingovog modela: Kriva (1) predstavlja Onzagerovo rešenje, kriva (2) je aproksimativno rešenje Kramersa i Vanijea, dok je kriva (3) Beteovo aproksimativno rešenje (prema [5])

Izraz za spontanu magnetizaciju dvodimenzionog Izingovog modela dao je Jang u radu [4]. Magnetizacija obračunata po čvoru rešetke je data kao [4, 8]:

$$M = \left[1 - \frac{(1 - \tanh^2(K_1)^2(1 - \tanh^2(K_2))^2)}{16 \tanh^2(K_1) \tanh^2(K_2)} \right]^{\frac{1}{8}} \quad (1.29)$$



Sl. 1.4: Temperaturska zavisnost spontane magnetizacije na osnovu relacije (1.29)

Na osnovu Onzagerovog i Jangovog rada na dvodimenzionom Izingovom modelu dobijeno je da

postoji fazni prelaz druge vrste kome odgovara kritična temperatura:

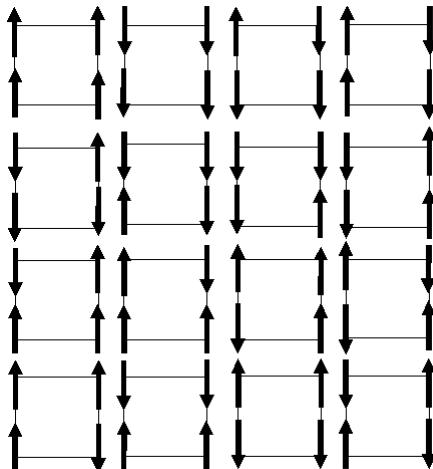
$$\frac{k_B T_C}{J} = 2.26918 \quad (1.30)$$

odnosno kada je $J = k_B = 1^5$, dobija se da je kritična temperatura dvodimenzionog Izingovog modela $T_C \approx 2.269$.

1.2.1 Rešetka 2×2

Generalno gledano za rešetku sa N čvorova postoji 2^N mogućih konfiguracija spinova, pa stoga recimo za kvadratno rešetku sa N čvorova u jednom pravcu, broj mogućih konfiguracija je 2^{N^2} . Analitičko računanje statističke sume bi obuhvatalo uračunavanje svih mogućih konfiguracija, što praktično postaje nemoguće izvesti sa porastom N .

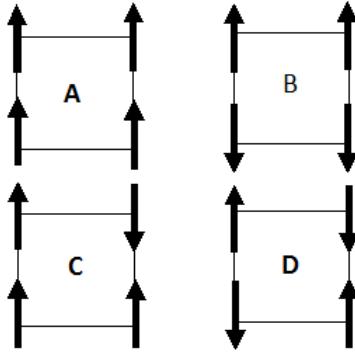
Rešetka 2×2 predstavlja sistem za koji se lako može odrediti analitičko rešenje za statističku sumu a na osnovu nje i termodynamičke veličine od značaja. Razmatranje rešetke 2×2 obuhvata račun sa $2^4 = 16$ mogućih spinskih konfiguracija. Te konfiguracije su ilustrovane na Sl. 1.5.



Sl. 1.5: Moguće konfiguracije spinova za 2×2 rešetku

Na osnovu simetrije tih 16 konfiguracija se mogu svesti na 4 konfiguracije sa nekim stepenom degeneracije, a date su na Sl. 1.6.

⁵U okviru rada sa Monte Karlo simulacijama čiji su rezultati prikazani u okviru odeljaka 3 i 4 korišćen je ovaj sistem jedinica.



Sl. 1.6: Konfiguracije za \$2 \times 2\$ rešetku

Na osnovu Sl. 1.5 i Sl. 1.6 lako se zaključuje da je konfiguracija A dvostruko degenerisana, sa mogućim vrednostima magnetizacije $M_A = \pm 4$, dok je energija stanja $E_A = -8J$. Konfiguracija B je četverostruko degenerisana, sa ukupnom magnetizacijom $M_B = 0$ i energijom $E_B = 0$. Konfiguracija C je osmostruko degenerisana sa magnetizacijom $M_C = \pm 2$ a ukupna energija konfiguracije je $E_C = 0$. Konačno, konfiguracija D je dvostruko degenerisana sa magnetizacijom $M_D = 0$ i energijom $E_D = 8J$.

Sada, kada su poznate sve moguće konfiguracije može se statistička suma zapisati na osnovu definicije (1.2):

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta E_i} = 2e^{-\beta E_A} + 4e^{-\beta E_B} + 8e^{-\beta E_C} + 2e^{-\beta E_D} = 12 + 4 \cosh(8\beta J) \quad (1.31)$$

gde suma $\{S_i\}$ ide po već navedenim konfiguracijama. Na osnovu statističke sume mogu se odrediti termodinamičke veličine koje su već ranije definisane u okviru relacija (1.3)-(1.11).

Na osnovu definicije (1.3) dobija se očekivana vrednost energije:

$$\langle E \rangle = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{32J \sinh(8\beta J)}{12 + 4 \cosh(8\beta J)} \quad (1.32)$$

Očekivana vrednost kvadrata energije se na osnovu definicije (1.4) dobija u obliku:

$$\langle E^2 \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} = \frac{256J^2 \cosh(8\beta J)}{12 + 4 \cosh(8\beta J)} \quad (1.33)$$

Razmatranjem magnetizacija pojedinačnih konfiguracija i korišćenjem definicija (1.6) i (1.8) se dobija:

$$\langle |M| \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{S_i\}} |M| e^{-\beta E_i} = \frac{8e^{8\beta J} + 16}{12 + 4 \cosh(8\beta J)} \quad (1.34)$$

Očekivana vrednost kvadrata magnetizacije se dobija analogno:

$$\langle M^2 \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{S_i\}} M^2 e^{-\beta E_i} = \frac{32e^{8\beta J} + 32}{12 + 4 \cosh(8\beta J)} \quad (1.35)$$

Izrazi (1.32)-(1.35) mogu se donekle jednostavnije predstaviti ako se uzme da je $J = 1$ i $k_B = 1^6$:

$$\begin{aligned}\langle E \rangle &= -\frac{32 \sinh(8\beta)}{12 + 4 \cosh(8\beta)} \\ \langle E^2 \rangle &= \frac{256 \cosh(8\beta)}{12 + 4 \cosh(8\beta)} \\ \langle |M| \rangle &= \frac{8e^{8\beta} + 16}{12 + 4 \cosh(8\beta)} \\ \langle M^2 \rangle &= \frac{32e^{8\beta} + 32}{12 + 4 \cosh(8\beta)}\end{aligned}\tag{1.36}$$

Na osnovu dobijenih relacija se svakako mogu odrediti i topotni kapacitet i susceptibilnost ako se iskoriste definicije:

$$\begin{aligned}C_V &= \beta^2 (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \\ \chi' &= \beta (\langle M^2 \rangle - \langle |M| \rangle^2)\end{aligned}\tag{1.37}$$

Analitička rešenja za termodinamičke veličine rešetke 2×2 porede se u okviru odeljka 3 sa rezultatima koje daje Monte Karlo simulacija. Poređenje rezulatata simulacije sa egzaktnim rešenjem pre svega služi kao potvrda valjanosti programskog koda kojim je simulacija napisana i garantuje opravdanost generalizacije simulacije na sisteme za koje trenutno ne postoji određeno egzaktno rešenje.

1.3 Kritični eksponenti

Poznato je da sistemi poput feromagnetika na nekoj temperaturi doživljavaju fazni prelaz, odnosno prelaze u paramagnetno stanje. Temperatura na kojoj se događa takav prelaz se naziva kritičnom temperaturom T_C . U tački kritične temperature termodinamičke funkcije često menjaju svoje ponašanje. Često osnovne termodinamičke funkcije divergiraju u okolini kritične temperature pa njihov opis tada nije dovoljno jasan.

Ponašanje termodinamičkih funkcija u blizini tačke faznog prelaza opisuje se pomoću tzv. kritičnih indeksa ili kritičnih eksponenata⁷. Pošto je od interesa ponašanje sistema u blizini kritične temperature, obično se uvodi bezdimenzionala veličina koja karakteriše odstupanje od kritične temperature [13, 14]:

$$t = \frac{T - T_C}{T_C}\tag{1.38}$$

Na osnovu eksperimentalnih i teorijskih postavki pokazalo se da spontana magnetizacija feromagnetika iščezava u skladu sa stepenom zavisnošću [14]:

$$m \approx (-t)^\beta\tag{1.39}$$

Magnetna susceptibilnost se u blizini kritične temperature ponaša kao [14]:

$$\chi \approx \begin{cases} (-t)^{-\gamma'}, & T < T_C \\ (-t)^{-\gamma}, & T > T_C \end{cases}\tag{1.40}$$

Topotni kapacitet se ponaša prema sledećim zakonitostima [14]:

$$C_v \approx \begin{cases} (-t)^{-\alpha'}, & T < T_C \\ t^{-\alpha}, & T > T_C \end{cases}\tag{1.41}$$

⁶Na osnovu definicije sada je $\beta = 1 \cdot T$.

⁷Biće razmatrani kritični indeksi magnetnog sistema.

Veličine $\alpha, \alpha', \beta, \gamma', \gamma$ predstavljaju kritične eksponente osnovnih termodinamičkih funkcija odziva feromagnetcog sistema. Od velikog značaja je pomenuti i veličinu korelaceone dužine. Naime, korelaciona dužina je data preko spinske korelaceone funkcije [13]:

$$\langle S(x)S(y) \rangle \approx \exp\left(-\frac{|x-y|}{\xi(T)}\right) \quad (1.42)$$

gde $\xi(T)$ predstavlja korelacionu dužinu. Na osnovu onoga što je poznato kao klasična hipotezu skaliranja, divergencija korelaceone dužine je usko povezana sa divergencijom termodinamičkih veličina poput susceptibilnosti i toplotnog kapaciteta u okolini kritične temperature [15]. Za korelacionu dužinu važi takođe sledeća zakonitost [13]:

$$\xi \approx |t|^{-\nu} \quad (1.43)$$

gde je ν još jedan kritični eksponent. Među do sada spomenutim kritičnim eksponentima pokazalo se da važe neke jednakosti. Naime, od značaja dalje tokom rada će biti korisne Rašbrukova [10, 13]:

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad (1.44)$$

i Džozefsonova jednakost [10, 13]:

$$2 - \alpha = \nu D \quad (1.45)$$

gde je sa D data dimenzionalnost sistema.

U okviru prethodno izloženih zakonitosti sa T_C je označena kritična temperatura beskonačno dimenzione rešetke. U okviru Monte Karlo simulacija radi se ipak sa konačno dimenzionim rešetkama. Kod rešetke konačnih dimenzija izostaje divergencija korelaceone dužine a samim tim kod toplotnog kapaciteta i susceptibilnosti moći će se zapaziti postojanje maksimuma na nekoj temperaturi $T_C(L) \neq T_C$ gde L predstavlja linearu dimenziju rešetke. Sa povećanjem dimenzija rešetke moguće je primetiti i povećanje maksimuma kod toplotnog kapaciteta i susceptibilnosti. Maksimalna moguća vrednost korelaceone dužine na nekoj rešetki konačne dimenzije je $\xi \approx L$, pa je na osnovu toga:

$$\xi \approx |t|^{-\nu} \approx L \quad (1.46)$$

odnosno:

$$t = \frac{T_C(L) - T_C}{T_C} \approx L^{-1/\nu} \quad (1.47)$$

Na osnovu prethodne relacije jasno je da se ponašanje ostalih termodinamičkih veličina u blizini kritične tačke može dati pomoću zavisnosti od linearne dimenzije rešetke [16]:

$$\begin{aligned} \frac{\langle M \rangle}{N} &\equiv m \approx L^{-\beta/\nu} \\ \frac{C_v}{N} &\approx L^{\alpha/\nu} \\ \frac{\chi}{N} &\approx L^{\gamma/\nu} \end{aligned} \quad (1.48)$$

gde su veličine obračunate po čvoru rešetke $N = L^D$, L je linearu dimenzija rešetke, a D dimenzionalnost sistema.

Prethodne relacije su korišćene i prilikom analize rezultata Monte Karlo simulacije Izingovog feromagneta, a detalji su dati u odeljku 4. Naime, za svako L , toplotni kapacitet i susceptibilnost će imati određene maksimume, na nekoj temperaturi kada magnetizacija iščezava. Ako se naprave grafici gde se na x -osu postave logaritmi vrednosti L , a na y -osu logaritmi maksimuma posmatrane

veličine (toplotni kapacitet, susceptibilnost), mogu se dobiti linearne zavisnosti gde su koeficijenti pravca odnosi određenih kritičnih eksponenata sa ν . Na osnovu toga i korišćenjem Rašbrukove i Džozefsonove jednakosti mogu se odrediti kritični eksponenti $\alpha, \beta, \gamma, \nu$.

U okviru Tabele 1.1 su date vrednosti kritičnih eksponenata za 2D, 3D i 4D Izingov model koje su dobijene ili na osnovu egzaktnog rešenja kao u slučaju dvodimenzionog sistema ili preko nekih aproksimativnih metoda [15, 17, 18]. Vrednosti date u tabeli će u okviru odeljka 4 biti korišćene za poređenje sa onim vrednostima koje su dobijene Monte Karlo simulacijom.

Tabela 1.1: Kritični eksponenti za Izingov model

	α	β	γ	ν
2D model	0	0.125	1.75	1
3D model	0.110	0.325	1.241	0.630
4D model	0	0.5	1	0.5

Pokazalo se kao korisno za određivanje kritične temperature faznog prelaza, određivanje tzv. kumulanta četvrtog reda [12, 19]:

$$U_L = 1 - \frac{m_L^4}{3(m_L^2)^2} \quad (1.49)$$

gde je:

$$m_L^2 = \frac{\langle M^2 \rangle}{N}, \quad m_L^4 = \frac{\langle M^4 \rangle}{N} \quad (1.50)$$

Da bi se na osnovu ovih kumulanata odredila kritična temperatura, formira se pre svega odnos kumulanata za dve različite vrednosti L , recimo $U_L/U_{L'}$, i tako napravljeni odnosi skiciraju se u zavisnosti od temperature. Tačka preseka odnosa kumulanata je tačka na temperaturi koja odgovara kritičnoj temperaturi faznog prelaza razmatranog sistema.

1.4 Granični uslovi

Kod razmatranja Izingovog modela bilo traženjem egzaktnog rešenja ili sprovođenjem Monte Karlo simulacija od interesa je da se definišu granični uslovi. Naime, kod Monte Karlo simulacija se radi sa konačnim rešetkama pa se moraju definisati uslovi koji važe na granicama rešetke. Ukoliko se i pri određivanju analitičkog rešenja i simulaciji definišu konačne rešetke potrebno je opisati interakcije spinova na krajevima rešetke kako bi svi interagovali sa podjednakim brojem suseda. Određivanje egzaktnog rešenja jednodimenzionog i dvodimenzionog Izingovog modela kao osnovu je koristilo postojanje tzv. periodičnih graničnih uslova, odnosno interakciju spinova sa kraja lanca sa onim sa početka.



Sl. 1.7: Periodični granični uslovi za jednodimenzionalni Izingov model odgovaraju uvođenju topologije kruga, korišćeni su pri određivanju particione funkcije (prema [9])

Postoji niz načina na koje se definišu granični uslovi. Recimo ako se izaberu granični uslovi slodobnih krajeva, tada spinovi na krajevima nemaju isti broj najbližih suseda kao neki koji su unutar rešetke. Konkretno ako se razmatra dvodimenziona rešetka, spinovi na krajevima ne interaguju sa četiri najbliža suseda već sa manje u zavisnosti na kom se delu kraja rešetke nalaze. Periodični granični uslovi su jedni od često korišćenih. Naime, ovi granični uslovi dozvoljavaju postojanje interakcije između spina na kraju lanca sa spinom sa početka, tj. stvara se tzv. cikličnost u interakciji. U slučaju dvodimenzione rešetke to bi odgovaralo uvođenju toroidalne topologije (videti Sl. 1.8). Naime, ako se razmatra konfiguracija spinova u dvodimenzionoj rešetki, i neka je sa μ_i označena konfiguracija spinova u i -tom redu:

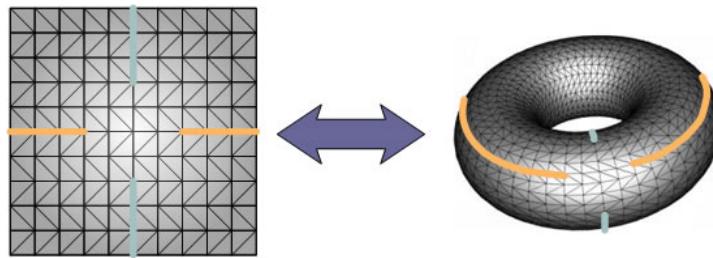
$$\mu_i = (S_1, S_2, \dots, S_n) \quad (1.51)$$

prvo se rešetka savija u cilindar, tj. važi uslov:

$$\mu_{m+1} \equiv \mu_1 \quad (1.52)$$

Dalje, da bi se dobili potpuno periodični granični uslovi cilindar se savija u toroid odnosno:

$$S_{n+1} \equiv S_1 \quad (1.53)$$



Sl. 1.8: Periodični granični uslovi za dvodimenzionalni Izingov model odgovaraju uvođenju topologije toroida

Periodični granični uslovi su se generalno pokazali kao veoma korisni, a korišćeni su i pri Monte Karlo simulaciji Izingovog feromagneta čiji su rezultati dati u odeljcima 3 i 4. Onzager je takođe

koristio periodične granične uslove pri određivanju egzaktnog rešenja za dvodimenzionalni sistem. Generalno se mogu definisati i drugi granični uslovi i sa njima raditi na analizi sistema poput Izingovog feromagneta. U okviru literature mogu se pronaći i granični uslovi zavojnice, koji su ilustrovani na Sl. 1.9.



Sl. 1.9: Granični uslovi na kvadratnoj rešetki: slobodni krajevi (slika levo), periodični (slika u sredini), zavojnica (slika desno) (prema [12])

Granični uslovi pre svega unose matematičke olakšice u radu sa nekim sistemom, a ne menjaju fizičku sliku modela sistema koji se analizira, pa stoga mogu dosta biti od koristi kod analize, na prvi pogled možda, komplikovanih sistema.

Glava 2

Monte Karlo metod

Monte Karlo metod se koristi slučajnim uzorkovanjem¹ podataka i od koristi je pri statističkom modelovanju procena matematičkih funkcija i fizičkih veličina od značaja u mnogim kompleksnim sistema [20]. Istorijski gledano, ideja korišćenja slučajnosti u determinističke svrhe ima korene još u osamnaestom veku u istraživanjima Georges Louis LeClerc-a. Ovaj francuski naučnik se koristio iglama koje je bacao po podu i na osnovu njihovog rasporeda po površini uspeo da dođe do procena broja π [21]. Stoga postoji generalna tendencija smatranja da je ovaj francuski naučnik prvi izveo ono što danas poznajemo kao Monte Karlo simulaciju.

Prvu formu simulacije su John von Neumann i Stanislaw Ulam razvili i koristili na Menhetn projektu za vreme Drugog svetskog rata kao metod za razmatranje kretanja neutrona. U svom radu sa N. Metropolis-om Ulam je definisao i sam naziv Monte Karlo metod po Monte Karlo kazinu u Monaku [22]. Vremenom je usledilo sve češće korišćenje Monte Karlo simulacija, koje se i danas koriste kao koristan metod za razmatranje sistema koji ne poseduju analitička rešenja ili put do njihovog dolaska predstavlja trenutnu praktičnu poteškoću.

2.1 Osnove Monte Karlo metoda

U okviru statističke fizike često se razmatraju sistemi sa velikim brojem stepeni slobode, i obično se u tom slučaju traže očekivane vrednosti nekih veličina od značaja. Ukoliko je poznat modelni hamiltonijan sistema mogu se odrediti očekivane (srednje) vrednosti. Ako se određuje srednja vrednost neke veličine $A(x)$ gde x predstavlja skup promenljivih koji opisuje izabrani sistem, srednja vrednost veličine kanoničkog ansambla je data definicijom [10]:

$$\langle A(x) \rangle = \frac{1}{Z} \int_{\Gamma} dx A(x) \exp(-\beta H(x)) \quad (2.1)$$

uz definiciju²:

$$Z = \int_{\Gamma} dx \exp(-\beta H(x)) \quad (2.2)$$

¹Random sampling

² \int_{Γ} za Izingov model predstavlja sumu po svim mogućim konfiguracijama spinova, za sistem opisan neprekidnim skupom koordinata poput generalisanih impulsa i koordinata važi $\int_{\Gamma} \equiv \int \frac{d^{3N} q d^{3N} p}{N! h^{3N}} [10]$.

Monte Karlo postupak se daje kao metod kojim se dolazi do vrednosti izraza (2.1) korišćenjem aproksimacije [12, 16]:

$$\langle A(x) \rangle = \frac{\sum_{l=1}^M A(x_l) e^{-\beta H(x_l)}}{\sum_{l=1}^M e^{-\beta H(x_l)}} \quad (2.3)$$

Izraz (2.1) je stoga aproksimiran na sledeći način:

$$\frac{1}{Z} \int_{\Gamma} dx A(x) \exp(-\beta H(x)) \approx \frac{\sum_{l=1}^M A(x_l) e^{-\beta H(x_l)}}{\sum_{l=1}^M e^{-\beta H(x_l)}} \quad (2.4)$$

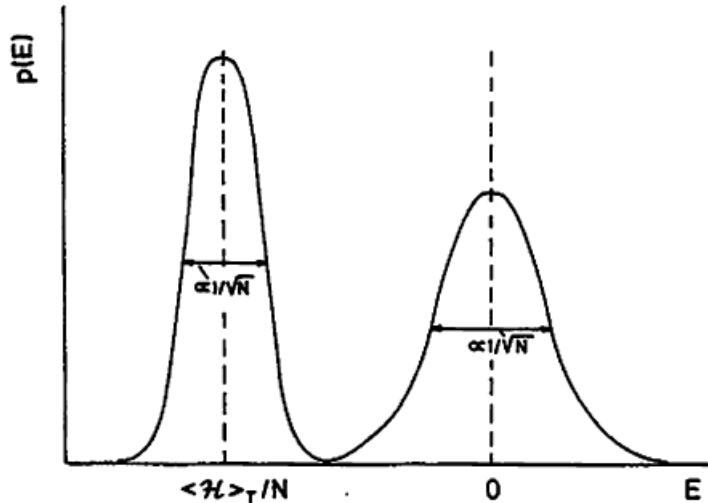
gde je napravljen prelaz sa integracije po svim mogućim stanjima x na sumaciju po izabranom podskupu stanja faznog prostora x_1, x_2, \dots, x_M , koja su izabrana kao statistički uzorak. Ako se razmatra slučaj $M \rightarrow \infty$ sume u prethodnom izrazu prelaze u integrale ili mogu imati sve dozvoljene diskretnе vrednosti. Pitanje od velikog značaja je izbor reprezentativnog skupa stanja x_l . Kod Monte Karlo metoda skup reprezentativnih stanja se bira kao skup nasumičnih (slučajnih) stanja, pa samim tim dobija se relativno ravnomerana raspodelu tačaka faznog prostora³. Ovaj metod odabira reprezentativnih stanja, ili uzorkovanje stanja, se naziva još i prosto uzorkovanje (simple sampling) [12]. Ovo uzorkovanje pak nije odgovarajuće za Izingov model. Neka je merena⁴ energija rešetke i merenje je ponavljano N puta. Ostvarene konfiguracije u toku merenja su redom x_1, x_2, \dots, x_N sa odgovarajućim hamiltonianima $H(x_1), H(x_2), \dots, H(x_N)$. Korišćenjem znanja statističke fizike za verovatnoću da se u toku merenja dobije energija E se dobija da se pokorava normalnoj (Gausovoj) raspodeli, odnosno [12]:

$$p(E) \propto \exp\left(-\frac{(E - \langle H \rangle_T / N)^2}{2Ck_B T^2}\right) N \quad (2.5)$$

Iz prethodne relacije jasno je uočiti da $p(E)$ ima maksimum u blizini $\langle H \rangle$, dok bi se prostim uzorkovanjem dobila raspodela centrirana oko $E = 0$, što je ilustrovano na Sl. 2.1.

³Ukoliko postoji kvalitetan generator slučajnih stanja

⁴Shodno daljem tekstu misli se na računarsku simulaciju.

Sl. 2.1: Raspodele verovatnoća da se izmeri energija E (prema [12])

Na osnovu prethodnih razmatranja dolazi se do zaključka da bi trebalo definisati neki suptilniji način odabira reprezentativnih stanja. Naime, umesto nasumičnog odabira stanja ona se mogu birati sa nekom verovatnoćom $P(x_l)$, odnosno srednje vrednosti bi bile definisane:

$$\langle A(x) \rangle = \frac{\sum_{l=1}^M A(x_l) e^{-\beta H(x_l)} / P(x_l)}{\sum_{l=1}^M e^{-\beta H(x_l)} / P(x_l)} \quad (2.6)$$

Najjednostavniji i najprirodniji izbor za raspodelu $P(x_l)$ je Boltzmanova raspodela [12]:

$$P(x_l) = \exp(-\beta H(x_l)) \quad (2.7)$$

Sada se izračunavanje srednje vrednosti veličine A svodi na određivanje jednostavne aritmetičke srednje vrednosti:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{M} \sum_{l=1}^M A(x_l) \quad (2.8)$$

Poslednji način uzorkovanja se naziva uzorkovanje po značajnosti (importance sampling) [12], a praktičnu primenu ovog uzorkovanja dao je Metropolis u svom radu [23]. Metropolisovim algoritmom je generalno uračunat i uticaj temperature na sistem koji se razmatra.

2.2 Markovljev proces i Metropolisov algoritam

U svom radu iz 1953. godine Metropolis i njegovi saradnici su dali postupak za dobijanje reprezentativnih stanja koja nisu nezavisna jedna od drugih [23]. Naime, oni su predložili način da se od nasumično odabranog početnog stanja određenim transformacijama mogu generisati ostala stanja i da se tako sistem doveđe do ravnotežnog stanja. Verovatnoća da se sistem nađe u stanju x_i u stanju termodinamičke ravnoteže je data Boltzmanovom raspodelom [12]:

$$P_{eq}(x_i) = \frac{1}{Z} \exp(-\beta H(x_i)) \quad (2.9)$$

Metropolis i saradnici su istakli da je moguće izabrati tranzicionu verovatnoću $W(x_i \rightarrow x_j)$, da sistem pređe iz stanja x_i u novo stanje x_{i+1} , takvu da u limitu $M \rightarrow \infty$ verovatnoća distribucije stanja vodi ka Boltzmanovoj. Uzastopna stanja grade tzv. lanac Markova, od stanja x_l dobijamo novo stanje x_{l+1} , a sam proces stvaranja novih stanja se naziva Markovljev proces [12, 24]. Mehanizam prelaska iz jednog stanja u drugo zavisi od W . Ovi koeficijenti se mogu birati da zadovoljavaju uslov tzv. detaljne ravnoteže [12]:

$$P_{eq}(x_i)W(x_i \rightarrow x_j) = P_{eq}(x_j)W(x_j \rightarrow x_i) \quad (2.10)$$

ili konciznije zapisano:

$$P_{eq}(x_i)W_{ij} = P_{eq}(x_j)W_{ji} \quad (2.11)$$

Princip detaljne ravnoteže je tu da obezbedi da sistem ne napusti ravnotežno stanje kad do njega dođe nizom već pomenutih transformacija, tj. Markovljevim procesom.

Korišćenjem principa detaljne ravnoteže može se odrediti odnos verovatnoća prelaska sistema iz konfiguracije x_i u konfiguraciju x_j i obrnutog procesa. Na osnovu prethodnih relacija dobija se:

$$\begin{aligned} \frac{W(x_i \rightarrow x_j)}{W(x_j \rightarrow x_i)} &= \frac{W_{ij}}{W_{ji}} = \frac{P_{eq}(j)}{P_{eq}(i)} \\ &= \frac{\frac{1}{Z} \exp(-\beta H(x_j))}{\frac{1}{Z} \exp(-\beta H(x_i))} \\ &= \exp(H(x_i) - H(x_j)) \\ &= \exp(-\beta \delta H) \end{aligned} \quad (2.12)$$

gde je $\delta H = H(x_j) - H(x_i)$. Očigledno, ovaj odnos zavisi samo od razlike energija dva stanja, a sistem će uvek težiti da pređe u stanje sa nižom energijom. Dalje se postavlja pitanje izbora W , a često korišćeni oblik koji zadovoljava jednačinu (2.10) je [12]:

$$W(x_i \rightarrow x_j) = \begin{cases} \frac{1}{\tau_s} \exp(-\beta \delta H), & \delta H > 0 \\ \frac{1}{\tau_s}, & \text{inače} \end{cases} \quad (2.13)$$

gde se τ_s uzima kao proizvoljan faktor, može da bude jednak jedinici. Ovaj izbor omogućava da je zadovoljen i tzv. uslov ergodičnosti, tj. da će sistem nakon dovoljno vremena proći kroz sva međustanja, tj. moguće konfiguracije. Dalje bi bilo zgodno pokazati da izbor W zaista vodi tome da se postiže ravnotežna Boltzmanovska raspodela. Neka postoje dva stanja x_r i x_s takva da je $H(x_r) < H(x_s)$, ako su to stanja sa istom energijom važiće princip simetričnosti [12]:

$$W_{\delta H=0}(x_r \rightarrow x_s) = W_{\delta H=0}(x_s \rightarrow x_r) \quad (2.14)$$

odnosno konciznije zapisano:

$$W_{rs}^0 = W_{sr}^0 \quad (2.15)$$

Na osnovu prethodnih relacija može se pisati:

$$W_{rs} = W_{rs}^0 \exp(\beta \delta H) \quad (2.16)$$

Ukupni broj prelaza $N_{r \rightarrow s}$ iz stanja x_r u stanje x_s je dat kao [12]:

$$N_{r \rightarrow s} = N_r W_{rs} = N_r W_{rs}^0 \exp(\beta \delta H) \quad (2.17)$$

dok je ukupni broj inverznih prelazaka [12]:

$$N_{s \rightarrow r} = N_s W_{sr} = N_s W_{sr}^0 \quad (2.18)$$

Ukupna razlika prelazaka između dva posmatrana stanja je:

$$\Delta N_{r \rightarrow s} = N_{r \rightarrow s} - N_{s \rightarrow r} = N_r W_{rs}^0 \left(\frac{\exp(-\beta H(x_s))}{\exp(-\beta H(x_r))} - \frac{N_s}{N_r} \right) \quad (2.19)$$

Kada se postigne ravnoteža postoji slučaj da je:

$$\frac{N_r}{N_s} = \frac{\exp(-\beta H(x_r))}{\exp(-\beta H(x_s))} \quad (2.20)$$

čime je potvrđen raniji izbor W .

2.3 Određivanje greške Monte Karlo metoda

Recimo da je Monte Karlo metodom procenjena vrednost neke veličine A . Da bi se prezentovao validan podatak potrebno je pridružiti odgovarajuću grešku merenoj veličini. Naime, ako je obavljeno n merenja A_μ , $\mu = 1, \dots, n$ i to iskorišćeno za određivanje srednje vrednosti A . Statistička greška Monte Karlo metoda bi se jednostavno mogla odrediti preko veličine:

$$\sigma_{MK}^2 = \left(\frac{1}{n} \sum_{\mu=1}^n (A_\mu - \langle A \rangle)^2 \right) \quad (2.21)$$

gde se izraz u suštini svodi na standardnu devijaciju kao statističku grešku:

$$\sigma_{MK} = \frac{\sigma^2}{n} \quad (2.22)$$

gde je n broj reprezentativnih stanja, a σ je relativno odstupanje pojedinačne vrednosti A_μ od srednje vrednosti $\langle A \rangle$, tj. varijansa. Na osnovu toga lako je doći do zaključka da greška Monte Karlo metode opada sa povećanjem broja reprezentativnih stanja kao $1/\sqrt{n}$.

U srcu Monte Karlo metoda postoji zavisnost (korelacija) stanja generisanih Markovljevim procesom. Time svakako jednostavna procena greške data u relaciji (2.22) ne važi. Tada se pribegava detaljnijem razmatranju korelacija podataka, ili se često pri simulaciji neke konfiguracije odbacuju kako bi se smanjile korelacije među podacima. Prilikom izvođenja Monte Karlo simulacije Izingovog feromagenta čiji su rezultati dati u okviru odeljka 4, određen broj konfiguracija je odbačen, a dat je preko broja tzv. prelaznih koraka. Korelacije su u izvesnoj meri smanjene ali se za analizu grešaka ipak mora okrenuti sofisticiranim metodama koje se baziraju na računanju tzv. korelacionih funkcija [12, 25].

2.4 Generator slučajnih brojeva

Ranije u okviru teksta je istaknuto da se Monte Karlo metod zasniva na korišćenju slučajno generisanih stanja. Ova stanja generišu se nekim od generatora slučajnih brojeva, tj. pseudoslučajnih brojeva. Kvalitet Monte Karlo simulacije je usko povezan sa kvalitetom generatora slučajnih brojeva. Monte Karlo simulacije se obično vrlo lako programiraju za rad na računaru pa se stoga mogu koristiti sistemski generatori slučajnih brojeva, koji se u okviru rada sa bilo kojim programskim jezikom definišu prema određenim standardima. Pošto u sistemskim generatorima postoje određene slabosti, često se pribegava kreiranju novih generatora slučajnih brojeva, koji pokazuju bolje performanse [26].

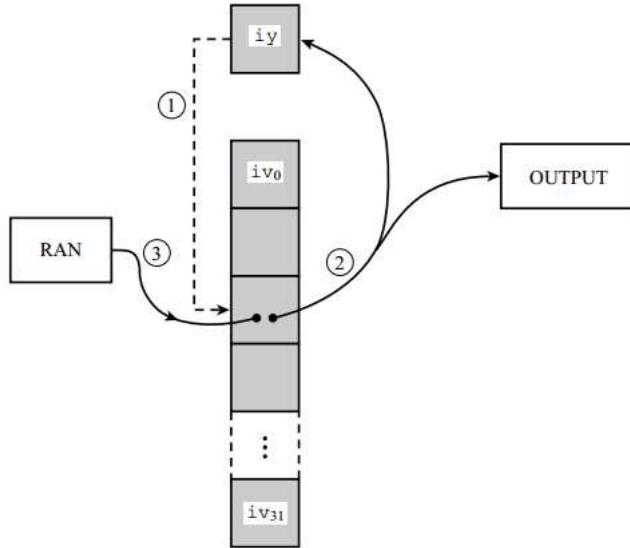
Često korišćeni su tzv. linearni kongruentni generatori slučajnih brojeva. Sistemski generatori slučajnih brojeva su u osnovi linearni kongruentni generatori. Ako su I_1, I_2, \dots slučajni brojevi, dva uzastopna slučajna broja u takvom nizu su povezana relacijom [26]:

$$I_{j+1} = aI_j + c \pmod{m} \quad (2.23)$$

gde je m moduo, a se naziva množiocem, c se naziva korak i to su pozitivni celi brojevi. Dodatno važe uslovi $0 < a < m$ i $0 \geq c < m$. Početna vrednost I_0 kojom se generiše niz dat relacijom (2.23) se naziva seme generatora. Izbor konstanti a , c i m bi trebao biti takav da se niz generisanih slučajnih brojeva ponavlja sa maksimalnim periodom jednakim modulu m [26]. U okviru ovog tipa generatora postoji nešto što se predstavlja kao minimalni standardni generator koji se daje za vrednosti [26]:

$$c = 0, \quad a = 7^5 = 16807, \quad m = 2^{31} - 1 = 2147483647 \quad (2.24)$$

gde je moduo dat kao tzv. Mersenov prost broj. Adaptacije minimalnog standardnog generatora su prošle mnoge danas poznate teorijske provere [27] i predstavljaju veoma brze generatore slučajnih brojeva. Generalno, na osnovu definicije generatora (2.23) lako je videti da ipak postoji neke korelacije među slučajnim brojevima, što se u simulaciji može pokazati kao nedostatak. Programski kod za generator slučajnih brojeva koji je korišćen pri Monte Karlo simulaciji Izingovog feromagneta čiji rezultati su predstavljeni u okviru odeljka 4, je razvijen na osnovu pravila za linearne kongruentne generatore (videti Prilog B). Da bi se izbegle korelacije među brojevima u okviru ovog generatora su izvršene dodatne zamene mesta slučajnih brojeva u nizu. Drugim rečima, ako je dobiten niz brojeva I_1, I_2, \dots , vrši se odabir nekog broja opet slučajnim odabirom i menja se sa nekim novim slučajnim brojem.



Sl. 2.2: Shema algoritma generatora slučajnih brojeva datog u Prilogu B (prema [26])

Postoje još neki tipovi generatora slučajnih brojeva poput Fibonačijevog generatora, Mersenovog tvistera i dr [28]. Svaki od generatora se podvrgava mnogim teorijskim testovima, i u zavisnosti od sistema za čiju se analizu koriste slučajni brojevi, zavisiće i izbor generatora slučajnih brojeva napravljen obično na osnovu njihove efikasnosti.

Glava 3

Poređenje egzaktnog rešenja sa rezultatima Monte Karlo simulacije

Korišćenje Monte Karlo metoda pokazalo se kao korisno kada se razmatraju sistemi gde određivanje egzaktnog rešenja iziskuje ulaganje dosta vremena ili generalno predstavlja potpunu praktičnu poteškoću. Monte Karlo simulacije su obično luke za programiranje i time se one vrlo lako mogu raditi uz pomoć današnjih računara. Kvalitet Monte Karlo simulacije se obično pre potpune implementacije u analizi nekog sistema, testira na varijantama istog sistema za koje postoje jasno definisana egzaktna rešenja. Ovaj tekst predstavlja rezultate rada sa Monte Karlo simulacijom Izingovog feromagneta. Programski kod napisan u programskom jeziku *C ++* (videti Prilog A), predstavlja programski kod Monte Karlo simulacije Izingovog feromagneta.

3.1 Metropolisov algoritam Izingovog feromagneta

U odeljku 2 je prikazano kako se na osnovu ideja koje su predložili Metropolis i njegovi saradnici do ravnotežnog stanja dolazi uzastopnim transformacijama, odnosno nekim malim transformacijama trenutnog stanja. Primena Metropolisovog algoritma na Izingov feromagnet se sastoji u tome da su te male promene pak okretanje spina na nekom čvoru u rešetki.

Metropolisov algoritam koji će biti "srce" Monte Karlo simulacije Izingovog feromagneta se sastoji u sledećim koracima (videti Prilog A) [12, 29]:

1. Prvi korak je izbor početne konfiguracije spinova. Naime, ako se kreće od niskih temperatura, za početnu konfiguraciju našeg feromagnetskog sistema može se uzeti da svi spinovi budu orijentisani "gore" (up, +1)
2. Izabere se jedan čvor rešetke nasumično i okreće spin na tom mestu (postaje -1 ako je bio +1)
3. Dalje se računa promena energije δH koja nastaje usled ranije promenjene orijentacije spina.
4. Ako je $\delta H < 0$, prihvata se nova konfiguracija spinova
5. Ako je pak $\delta H > 0$, prvo se izračuna vrednost $\exp(-\beta \delta H)$ i onda nasumično izabere broj između 0 i 1. Ako je dobijeni nasumično izabrani broj manji od vrednosti izraza $\exp(-\beta \delta H)$, tada se prihvata nova konfiguracija, u protivnom ona se odbacuje
6. Po prihvatanju nove konfiguracije spinova računaju se fizičke veličine, poput magnetizacije, energije, toplotnog kapaciteta, susceptibilnosti.
7. Posle unapred zadatog broja koraka algoritma, računaju se srednje vrednosti fizičkih veličina

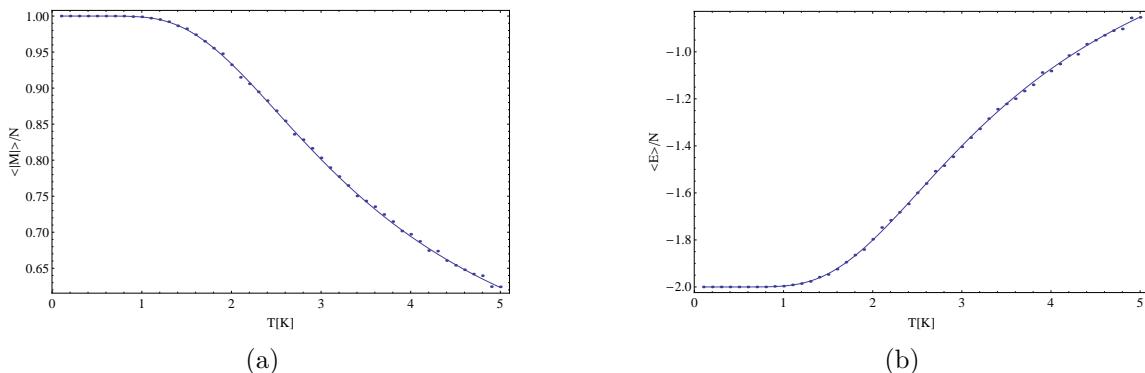
8. Postupak se ponavlja na sve višim temperaturama do neke unapred zadate maksimalne vrednosti.

Programski kod u okviru Priloga A koji je korišćen za Monte Karlo simulaciju Izingovog feromagneta, a sadrži u potpunosti prethodno objašnjen Metropolisov algoritam, prvo je testiran na rešetki 2×2 za koju je egzaktno rešenje dano u okviru odeljka 1.

3.2 Poređenje rezultata za rešetku 2×2

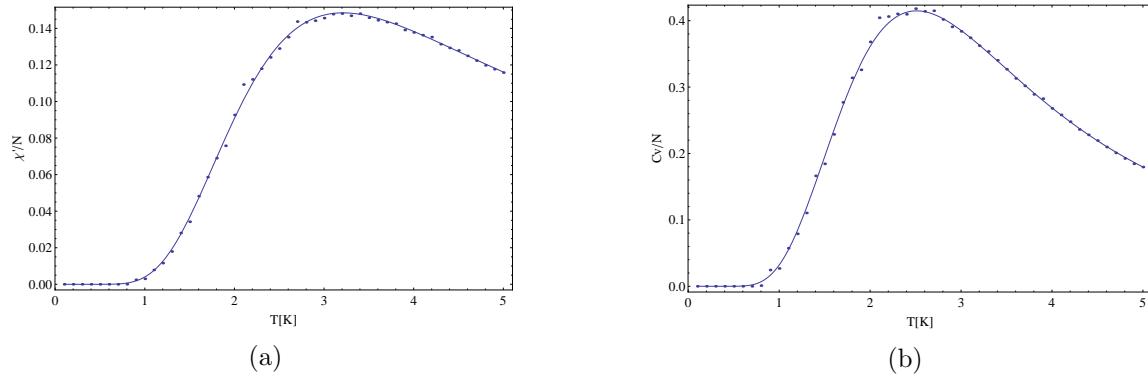
U okviru odeljka 1.2.1 dano je rešenje za rešetku 2×2 do koga se došlo analitičkim razmatranjem svih mogućih spinskih konfiguracija. Dati su izrazi za temperaturske zavisnosti magnetizacije, unutrašnje energije, magnetne susceptibilnosti i toplotnog kapaciteta. Monte Karlo simulacijom takođe su određene ove veličine, i mogu se uporediti sa egzaktnim rezultatima iz odeljka 1.2.1.

Na Sl. 3.1 je prikazana temperaturska zavisnost magnetizacije i unutrašnje energije, gde je sa punom linijom naznačen egzaktni rezultat na osnovu relacije (1.36), dok su tačkama dati rezultati Monte Karlo simulacije. Jasno je da postoji dobro slaganje rezultata simulacije sa egzaktnim rezultatima.



Sl. 3.1: Temperaturska zavisnost magnetizacije (a) i unutrašnje energije (b) za rešetku 2×2

Dalje, Sl. 3.2 predstavlja temperatursku zavisnost toplotnog kapaciteta i susceptibilnosti date rešetke, odnosno dati su egzaktni rezultati u poređenju sa rezultatima Monte Karlo simulacije. Ono što se može videti je da simulacija dobro prati egzaktno rešenje uz neka mala odstupanja kod toplotnog kapaciteta i samim tim još nam govori o postojanju faznog prelaza na temperaturi koja je u intervalu od nekih $2 - 3$ K. Ipak za bolje sagledavanje ponašanja sistema obavljene su Monte Karlo simulacije složenijih rešetki od 2×2 , čiji su rezultati izloženi u odeljku 4.



Sl. 3.2: Temperaturska zavisnost susceptibilnosti (a) i toplotnog kapaciteta (b) za rešetku 2×2

Na osnovu materijala datog u ovom odeljku može se zaključiti da se korišćeni programski kod Monte Karlo simulacije Izingovog feromagneta dosta dobro slaže sa egzaktnim rezultatima. Opravдано је веровати да ће generalizacije koda na druge dimenzije sistema dati takoђе задовољавајуће rezultate.

Glava 4

Monte Karlo simulacija na prostim (hiper)kubnim rešetkama

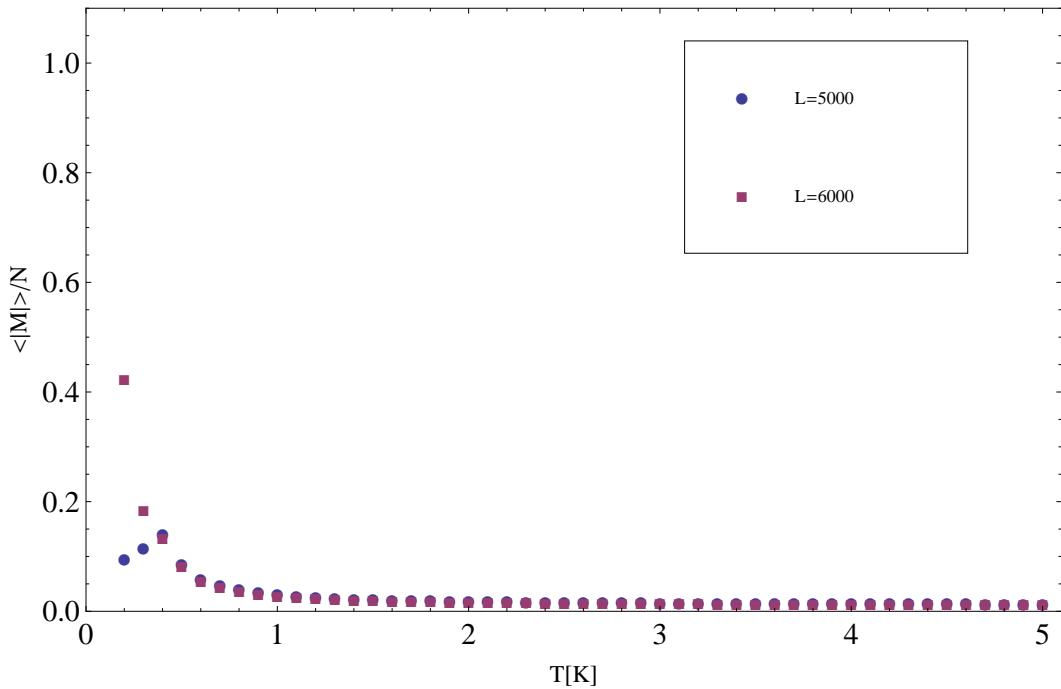
Pošto smo se uverili u generalnu valjanost Monte Karlo algoritma datog u Prilogu A na rešetki 2×2 ovaj algoritam je korišćen za simulaciju jednodimenzionog (1D), dvodimenzionog (2D), trodimenzionog (3D) i četvorodimenzionog (4D) Izingovog feromagneta. Korišćeni sistem jedinica je $J = k_B = 1$, implementiran je Metropolisov algoritam dat u odeljku 3. Prilikom pokretanja simulacija uvek je polazna konfiguracija spinova na početnoj temperaturi bila feromagnetskog tipa (svi spinovi +1(up)), što bi se i generalno moglo očekivati na niskim temperaturama. Pri određivanju magnetizacije i susceptibilnosti sistema korišćene su relacije (1.8) i (1.11). Razlog za izbor prethodno istaknutih relacija je zbog generalne tendencije Monte Karlo algoritma da u nekom trenutku izvrši promenu orientacije spinova na rešetki, tj. $M \rightarrow -M$. U okviru Monte Karlo simulacije Izingovog feromagneta predstavljeni su stoga rezultati za temperatursku zavisnost apsolutne magnetizacije.

4.1 Monte Karlo simulacija jednodimenzionog Izingovog feromagneta

Programski kod dat u Prilogu A predstavlja kod Monte Karlo simulacije 2D Izingovog feromagneta. U okviru datog koda je napravljena izmena da je ostavljen samo jedan pravac u rešetki, tj. napravljen je lanac spinova, na koji su primenjeni periodični granični uslovi. Simulacija je održena na lancima dužine $L = 5000$ i $L = 6000$ spinova, sa 150000 Monte Karlo koraka i 1500 prelaznih koraka¹.

Na Sl. 4.1 je prikazano temperatursko ponašanje magnetizacije Izingovog lanca spinova. Ono što na prvi pogled ne odgovara onome što je poznato na osnovu teorije je i to da postoji mali skok magnetizacije na malom temperaturskom intervalu oko 0K. Opravdanje bi trebalo tražiti u Monte Karlo simulaciji i Metropolisovom algoritmu na kojem se ona zasniva. Naime, pošto se radi sa slučajnim brojevima, kod Monte Karlo simulacije magnetizacije Izingovog lanca ne može se dobiti da postoji oštar skok na 0K. Vrednosti magnetizacije u intervalu oko 0K su različite od nule, ali i na većim temperaturama vrednosti nisu strikno nula već su veoma male. Moguće je pokušati sa većim lancima spinova, ili pre svega pokrenuti simulacije koje bi radile sa više Monte Karlo koraka, kako bi se smanjio skok magnetizacije oko 0K.

¹Termodinamičke veličine određivane Monte Karlo metodom su obračunavane po čvoru rešetke, kod svih dimenzionalnosti sistema obrađenih u ovom radu.



Sl. 4.1: Temperaturska zavisnost magnetizacije lanca spinova

Sl. 4.2 predstavlja temperatursku zavisnost unutrašnje energije sistema datih lanaca spinova. Zavisnost energije od temperature kod rada sa Monte Karlo simulacijama može dati dodatni uvid u ispravnost programskog koda. Naime, ako se smatra da su svi spinovi međusobno paralelni, recimo na niskim temperaturama, tada se može pokazati da za očekivanu vrednost energije sistema važi:

$$\langle E \rangle = -\frac{1}{2}J \left\langle \sum_i \sum_j S_i S_j \right\rangle \quad (4.1)$$

gde je uveden faktor $\frac{1}{2}$ jer se svaki spin uračunava dva puta, s tim da se razmatra interakcija samo najbližih suseda. Kod jednodimenzionog modela svaki spin ima 2 najbliža suseda, pa se stoga dobija:

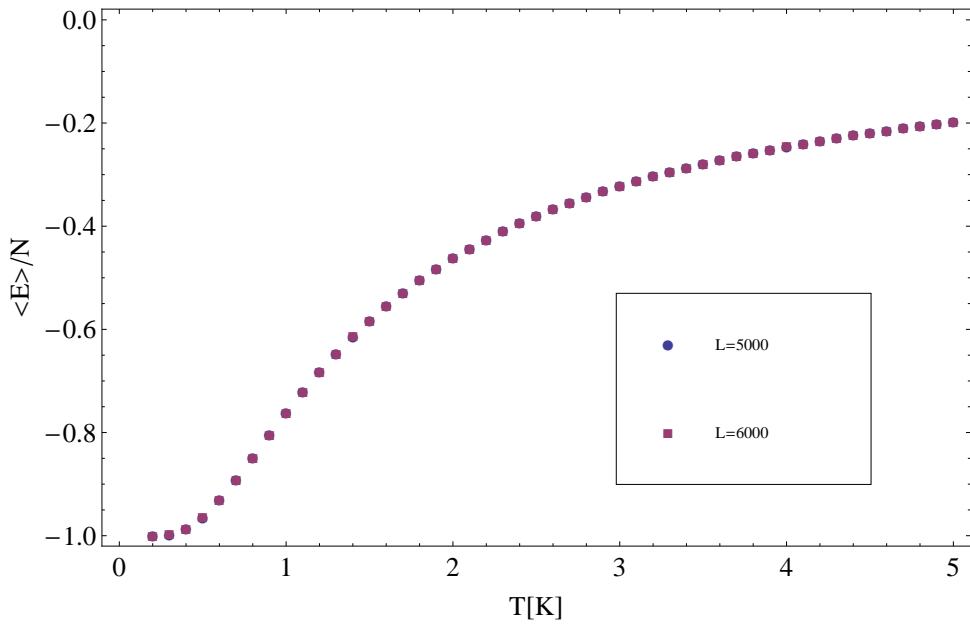
$$\langle E \rangle = -\frac{1}{2}J2N \quad (4.2)$$

odnosno obračunato po čvoru lanca, za vrednost $J = 1$, se dobija:

$$\frac{\langle E \rangle}{N} = -1 \quad (4.3)$$

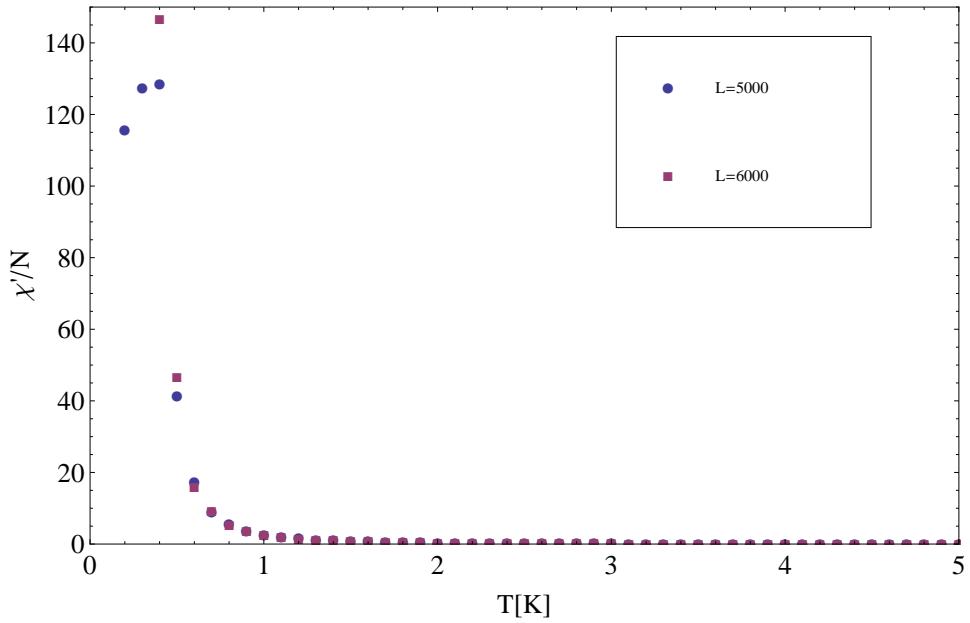
Ovaj način razmišljanja važi i za više dimenzionalnosti sistema. Naime, za dvodimenzioni model svaki spin ima 4 najbliža suseda, kod trodimenzionog sistema broj najbližih suseda je 6 itd. Na osnovu toga generalno se može izvesti zaključak da će energija obačunata po čvoru rešetke da teži negativnoj vrednosti dimenzije sistema za slučaj prostih kubnih rešetki, uz uslov da je $J = 1^2$. Ovo saznanje dodatno može veoma koristiti jer se na osnovu njega može proveriti valjanost programskog koda koji je korišćen pri simulaciji. Na Sl. 4.2 je svakako jasan trend koji se pokorava onome što je istaknuto u okviru relacije (4.3).

²Simulacije rađene u ovom radu su upravo obavljene za vrednost $J = 1$.



Sl. 4.2: Temperaturska zavisnost energije lanca spinova

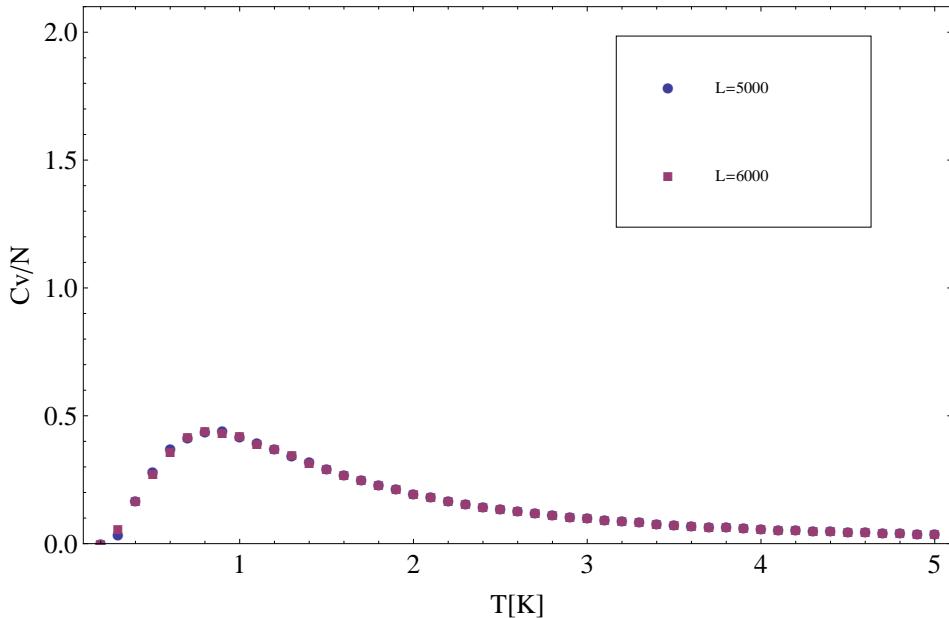
Sl. 4.3 predstavlja temperatursku zavisnost susceptibilnosti datih lanaca spinova. Pošto se susceptibilnost daje pomoću vrednosti magnetizacije i kvadrata magnetizacije za očekivati je da se pojave skokovi magnetne susceptibilnosti iako ne bi trebalo da se tako nešto pojavi jer se kod jednodimenzionog sistema ne očekuje pojava faznog prelaza na nekoj konačnoj temperaturi.



Sl. 4.3: Temperaturska zavisnost magnetne susceptibilnosti lanca spinova

Temperaturska zavisnost toplotnog kapaciteta datih lanaca spinova prikazana je na Sl. 4.4.

Očigledno je da postoji blagi maksimum kod toplotnog kapaciteta. Trebalo bi opet obaviti simulacije sa povećanim brojem Monte Karlo koraka, ali pošto radimo sa slučajno generisanim brojevima, korelisanim vrednostima moguće je da će ipak biti odstupanja od striktno egzaktnih rezultata.



Sl. 4.4: Temperaturska zavisnost toplotnog kapaciteta lanca spinova

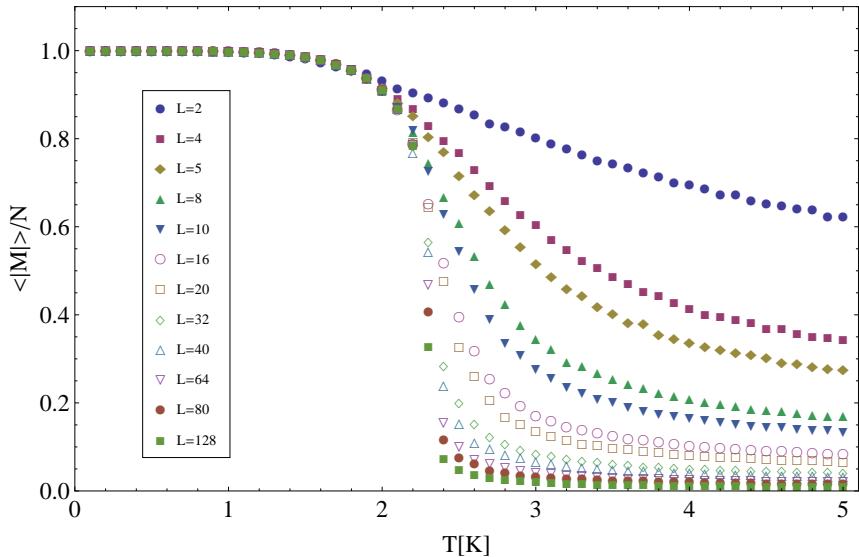
Iako se rezultati Monte Karlo simulacije 1D Izingovog modela ne slažu savršeno sa egzaktnim rezultatima datim u odeljku 1, opravdanja se mogu jedino tražiti u generalnoj prirodi rada sa slučajnim brojevima, i prirodi Monte Karlo metoda da tretira specifičnu situaciju poput 1D Izingovog modela za kojeg ne postoji fazni prelaz na nekoj konačnoj temperaturi. Generalno se govori da 1D sistem ima fazni prelaz na 0 K, što simulacija teže prikazuje tako striktno. Kod rada sa Metropolisovim algoritmom u okviru Monte Karlo simulacije uvek postoji problem sa limitom kada temperatura teži nuli. Ovaj problem je naročito izražen kod 1D Izingovog sistema gde se na 0K očekuje pojava faznog prelaza. Za postizanje boljeg rezultata treba generalno težiti povećanju broja Monte Karlo koraka i sa njima vezanih prelaznih koraka simulacije.

4.2 Monte Karlo simulacija dvodimenzionog Izingovog feromagneta

Korišćenjem programskog koda datog u Prilogu A, urađena je Monte Karlo simulacija dvodimenzionog Izingovog feromagneta. Korišćeno je $2.5 \cdot 10^4$ Monte Karlo koraka i $2.5 \cdot 10^3$ prelaznih koraka i posmatran je temperaturski interval od 0.1 do 5 K.

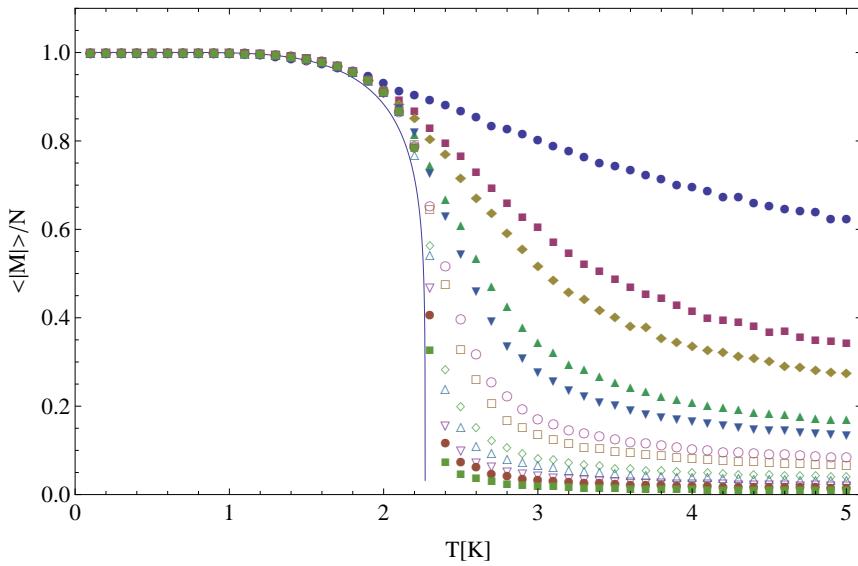
4.2.1 Termodynamičke veličine 2D sistema

U okviru Monte Karlo simulacije dvodimenzionog Izingovog feromagneta određivane su temperaturske zavisnosti magnetizacije, unutrašnje energije, susceptibilnosti i toplotnog kapaciteta sistema za rešetke $L \times L$, gde su obavljene simulacije za $L = 2, 4, 5, 8, 10, 16, 20, 32, 40, 64, 80, 128$. Za početak na Sl. 4.5 su prikazane temperaturske zavisnosti magnetizacije koje su dobijene Monte Karlo simulacijom za date linearne dimenzije rešetke L .



Sl. 4.5: Temperaturska zavisnost magnetizacije Izingovog modela na kvadratnoj rešetki za razne linearne dimenzije rešetke

Rezultati prethodnog grafika su dalje upoređeni sa Jangovim egzaktnim rešenjem za magnetizaciju (1.29), a rezultati poređenja su dati na Sl. 4.6.

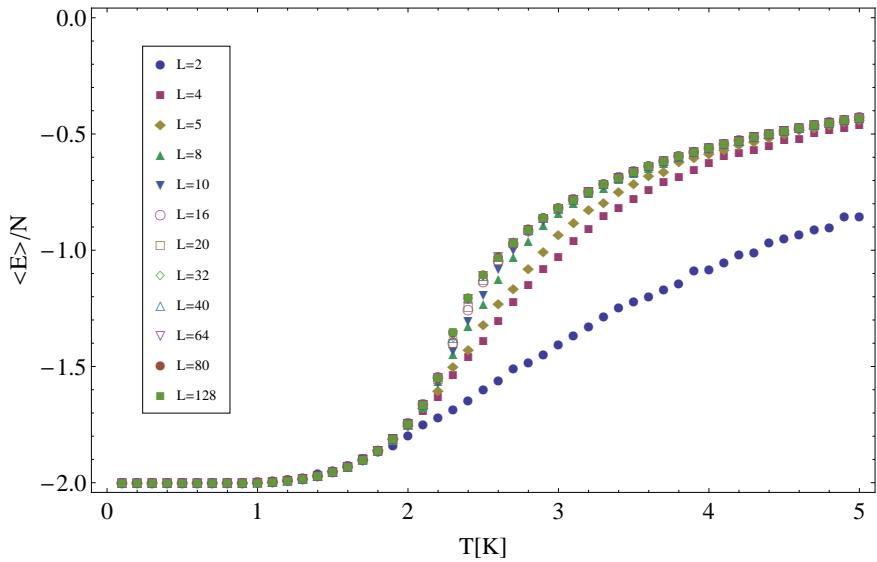


Sl. 4.6: Poređenje rezultata datih na Sl. 4.5 sa egzaktnim rešenjem za magnetizaciju (puna linija)

Sa prethodnog grafika uočava se kako dobro slaganje rezultata simulacije za velike vrednosti L , dok kod malih vrednosti L postoji odsustvo oštrog pada magnetizacije na nulu kako bi se očekivalo za $T > T_C$. Slaganje rezultata simulacije sa egzaktnim rešenjem je bolje kako se povećava vrednost L , odnosno sa povećanjem broja čvorova rešetke, a generalno je dobro slaganje egzaktnih rezultata sa rezultatima Monte Karlo simulacije pri niskim temperaturama za sve linearne dimenzije rešetke.

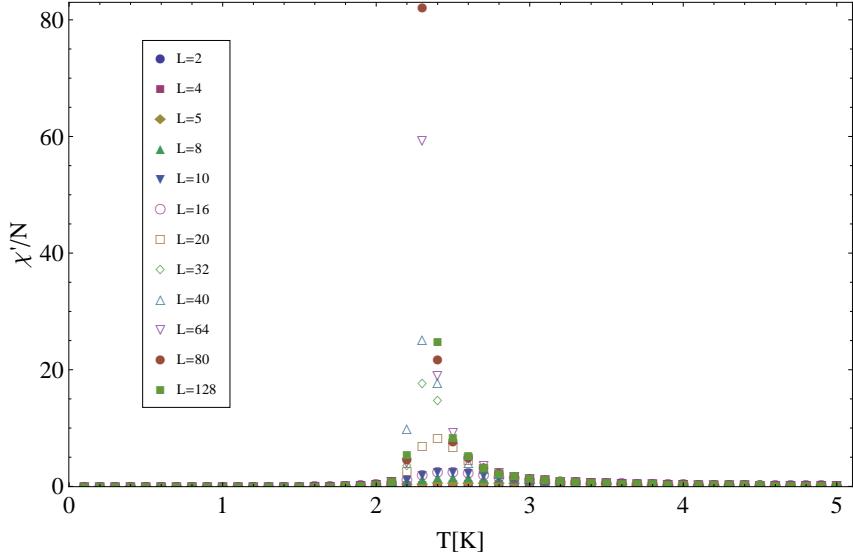
Na Sl. 4.7 je data temperaturska zavisnost unutrašnje energije 2D sistema Izingovih spinova.

Očigledno je da rezultati simulacije prate očekivanja data relacijom (4.2), kada se uvrsti broj najbližih suseda za dvodimenzioni sistem.



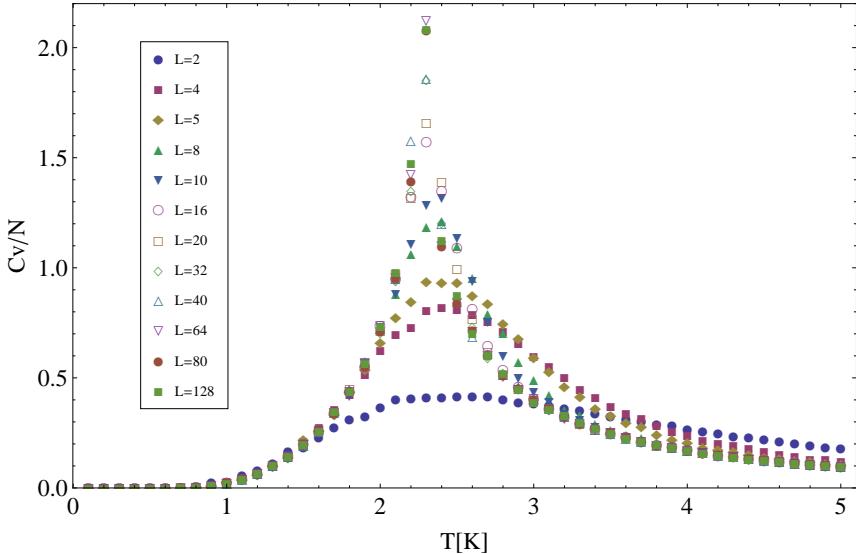
Sl. 4.7: Temperaturska zavisnost energije Izingovog modela na kvadratnoj rešetki

Sl. 4.8 predstavlja temperatursku zavisnost susceptibilnosti dok je na Sl. 4.9 data temperaturska zavisnost toplotnog kapaciteta 2D Izingovog feromagneta za date linearne dimenzije rešetke L .



Sl. 4.8: Temperaturska zavisnost susceptibilite na Izingovoj kvadratnoj rešetki

Pošto su simulacije rađene sa rešetkama konačnih dimenzija za očekivati je odsustvo divergencije kod toplotnog kapaciteta i susceptibilnosti na kritičnoj temperaturi. Ono što se pak primećuje je postojanje izraženih maksimuma datih veličina. Ovi maksimumi rastu sa povećanjem L i pomeraju se, što se može videti sa grafika za temperatursko ponašanje susceptibilnosti i toplotnog kapaciteta.

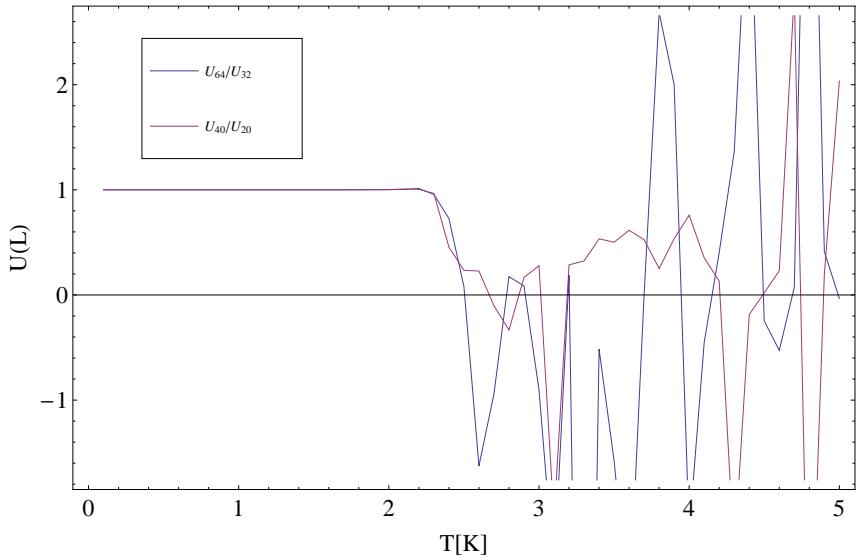


Sl. 4.9: Temperaturska zavisnost topotnog kapaciteta na Izingovoj kvadranoj rešetki

Odsustvo divergencije veličina poput topotnog kapaciteta i susceptibilnosti, posledica je korišćenja konačnih dimenzija izabranih rešetki. Dalje bi se moglo zaključiti da nema faznog prelaza, ali korišćenjem kumulanata može se proceniti kritična temperatura.

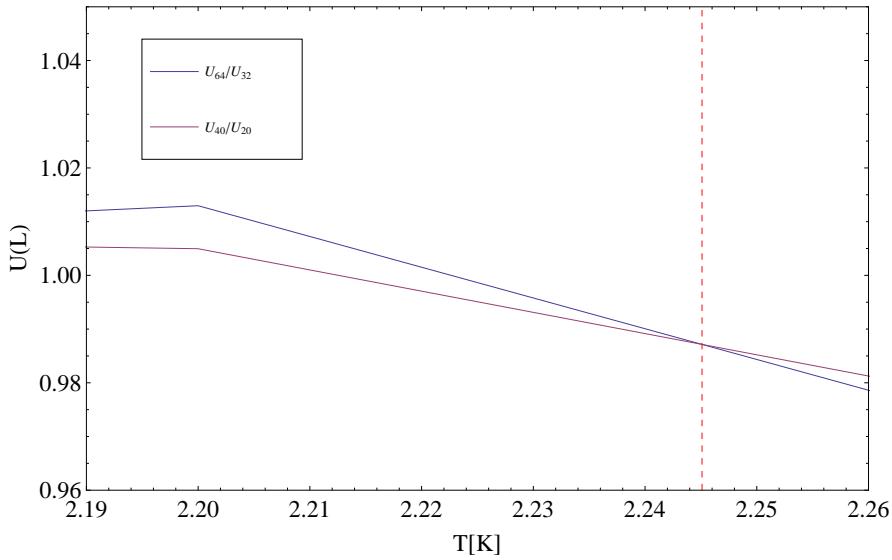
4.2.2 Kritična temperatura 2D sistema

Na osnovu izloženog materijala u prvom odeljku, istaknuto je da se korišćenje tzv. kumulanata četvrtog reda može iskoristi za određivanje kritične temperature. Naime, u okviru Monte Karlo simulacije određene su i temperaturske zavisnosti kumulanata datih relacijom (1.49) za svaku od vrednosti L . Istaknuto je da se u preseku odnosa kumulanata dobija vrednost kritične temperature. Za dvodimenzioni sistem određen je presek odnosa kumulanata U_{64}/U_{32} i U_{40}/U_{20} . Rezultati su dati na Sl. 4.10.



Sl. 4.10: Presek odnosa kumulanata dvodimenzionog sistema

Da bi odredili tačno gde se nalazi presek ove dve krive, istaknut je deo grafika gde se nalazi očekivana vrednost kritične temperature, što je dato na Sl. 4.11.

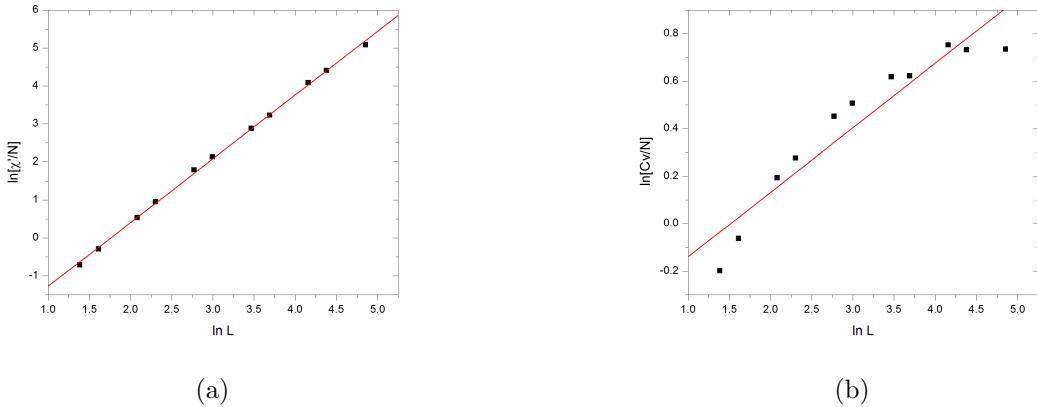


Sl. 4.11: Detalj preseka odnosa kumulanata za dvodimenzioni sistem

Sa prethodnog grafika je određeno da je vrednost kritične temperature $T_C = 2.2451$ K, što se veoma dobro slaže sa egzaktnom vrednošću $T_C^{teo} = 2.269$ K [7, 30]. Relativno odstupanje vrednosti kritične temperature dobijene Monte Karlo simulacijom od egzaktne vrednosti je samo $\delta_{T_c} \approx 1.05\%$, što predstavlja jako dobar rezultat i određenu potvrdu da je Monte Karlo simulacija 2D Izingovog feromagneta sprovedena korektno.

4.2.3 Kritični eksponenti 2D modela

U okviru odeljka 1 istaknuto je da se pomoću tzv. teoreme skaliranja, mogu odrediti vrednosti kritičnih eksponenata. Naime, kao što je već pomenuto, crtanjem logaritamskih zavisnosti maksimuma susceptibilnosti i toplotnog kapaciteta od logaritma L mogu se kao koeficijenti pravca linearno fitovanih pravih dobiti odnosi $\frac{\gamma}{\nu}$ i $\frac{\alpha}{\nu}$ respektivno³.



Sl. 4.12: Linearni fit podataka logaritamskih zavisnosti susceptibilnosti (a) i toplotnog kapaciteta (b) od logaritma linearne dimenzije rešetke za dvodimenzioni sistem

Vrednosti pomenutih koeficijenata pravca koji su dobijeni fitovanjem su:

$$\frac{\gamma}{\nu} = 1.67919 \pm 0.01763 \quad \frac{\alpha}{\nu} = 0.27162 \pm 0.02964 \quad (4.4)$$

Da bi odredili vrednosti kritičnih eksponenata korisitiće se Rašbrukova jednakost:

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad (4.5)$$

i Džozefsonova relacija:

$$2 - \alpha = D\nu \quad (4.6)$$

gde je sada $D = 2$, pošto se radi o dvodimenzionom sistemu. Na osnovu vrednosti datih u (4.4) i pomenutih relacija među kritičnim eksponentima dobija se da su vrednosti eksponenata dobijenih na osnovu Monte Karlo simulacije:

$$\alpha = 0.239, \beta = 0.142, \gamma = 1.478, \nu = 0.880 \quad (4.7)$$

Na osnovu toga, jasno je da dobijene vrednosti odstupaju od egzaktnih datih u Tabeli 1.1, najviše u slučaju eksponenta α . Bolji rezultati vrednosti eksponenata se mogu dobiti ako se uzme egzaktni rezultat $\alpha = 0$. Na osnovu toga dobija se:

$$\alpha = 0, \beta = 0.160, \gamma = 1.679, \nu = 1 \quad (4.8)$$

što se u pogledu eksponenata dobro slaže sa egzaktnim rezultatima uz relativno odstupanje eksponenta $\delta_\beta = 28\%$ i odstupanje eksponenta $\delta_\gamma \approx 4\%$.

³Linearni fit i pravljenje grafika korišćenih za određivanje kritičnih eksponenata su obavljeni u programskom paketu Origin 6.0.

Na osnovu materijala izloženog u ovom poglavlju jasno je da su rezultati Monte Karlo simulacije 2D Izingovog feromagneta u dosta dobroj saglasnosti sa egzaktnim rezultatima. U cilju eventualno bolje saglasnosti moguće je obaviti simulacije na složenijim rešetkama, tj. za veće vrednosti linearne dimenzije L od onih obrađenih u ovom delu, ili uz svakako uvek korisno povećanje broja koraka same simulacije.

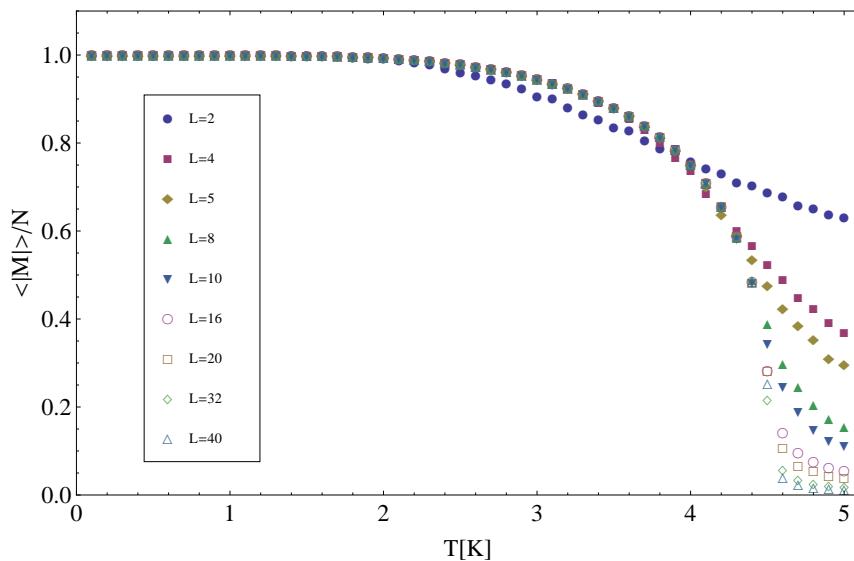
4.3 Monte Karlo simulacija trodimenzionog Izingovog feromagneta

Programski kod koji je korišćen pri Monte Karlo simulaciji dvodimenzionog sistema sada je izmenjen kako bi poslužio i za simulaciju trodimenzionog sistema spinova. Naime, u originalnom kodu samo je dodat još jedan pravac u okviru već definisane dvodimenzione rešetke, uz dodavanje odgovarajućih periodičnih graničnih uslova duž datog pravca. Simulacija je obavljena sa $2.5 \cdot 10^4$ Monte Karlo koraka i $2.5 \cdot 10^3$ prelaznih koraka. U okviru simulacije su određivane temperaturske zavisnosti magnetizacije, toplotnog kapaciteta, unutrašnje energije, susceptibiliteta za rešetku dimenzije $L \times L \times L$ gde su simulacije sprovedene za vrednosti $L = 2, 4, 5, 8, 10, 16, 20, 32, 40$. Posmatran je temperaturski interval od 0.1 do 5 K.

Za trodimenzionalni Izingov feromagnet još uvek ne postoji egzaktno rešenje, pa neće postojati način da se rezultati simulacije dodatno provere, ali moći će se uporediti vrednosti kritičnih eksponenata koji su određeni nekim aproksimativnim metodama.

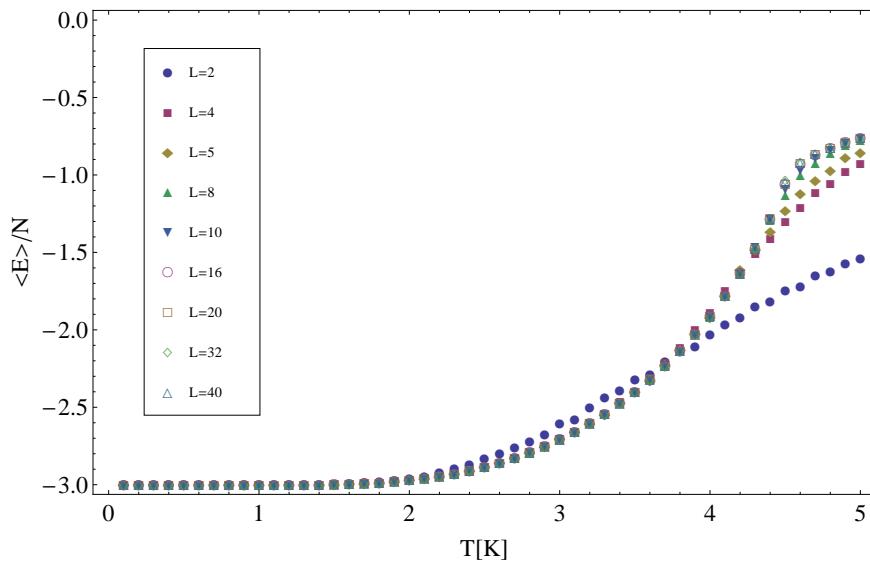
4.3.1 Termodinamičke veličine 3D sistema

Za početak na Sl. 4.13 je data temperaturska zavisnost magnetizacije trodimenzionog sistema za date vrednosti L .



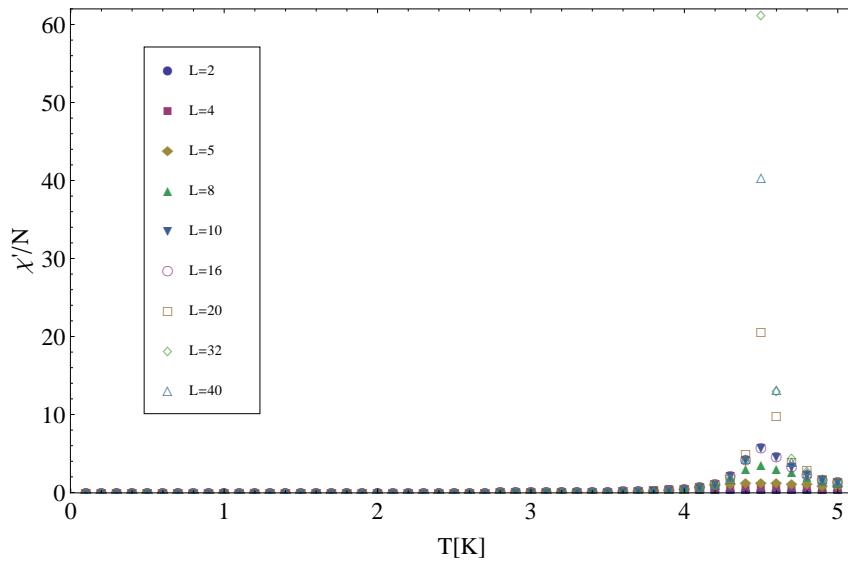
Sl. 4.13: Temperaturska zavisnost magnetizacije Izingovog modela na kubnoj rešetki za razne linearne dimenzije rešetke

Sl. 4.14 predstavlja temperatursku zavisnost unutrašnje energije, i na osnovu nje jasno je da rezultati simulacije prate predviđanja relacije (4.2) sada primenjena na trodimenzioni model.



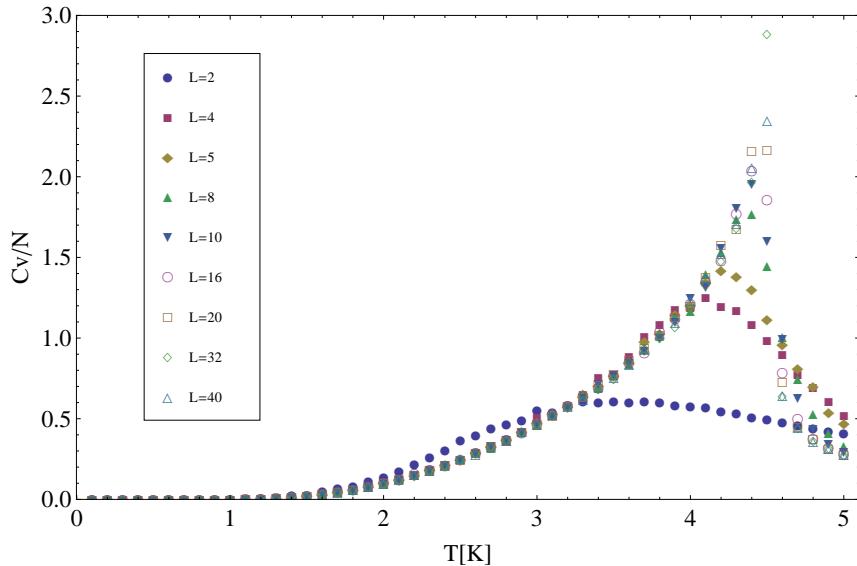
Sl. 4.14: Temperaturska zavisnost energije trodimenzionog Izingovog sistema

Na Sl. 4.15 je data temperaturska zavisnost susceptibilnosti dok je na Sl. 4.16 data temperaturska zavisnost toplotnog kapaciteta za date vrednosti L trodimenzionog sistema Izingovih spinova.



Sl. 4.15: Temperaturska zavisnost susceptibiliteata trodimenzionog Izingovog sistema

Posmatranjem grafika temperaturskog ponašanja susceptibilnosti i toplotnog kapaciteta lako se da shvatiti da i ovde postoji neka kritična temperatura kojoj odgovaraju maksimumi ove dve veličine.

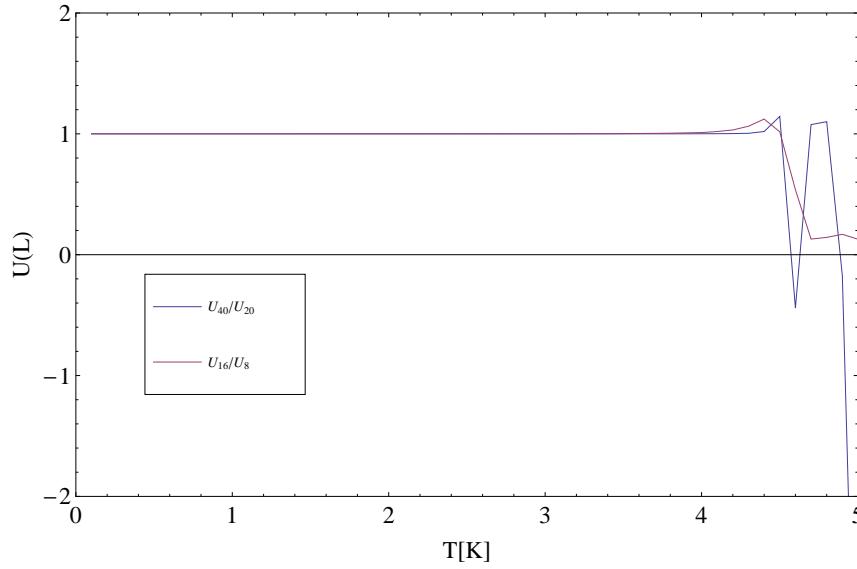


Sl. 4.16: Temperaturska zavisnost toplotnog kapaciteta trodimenzionog Izingovog sistema

Procena bi bila da je ta temperatura negde oko 4.5 K, ali ona će biti detaljnije potražena korišćenjem kumulanata.

4.3.2 Kritična temperatura 3D sistema

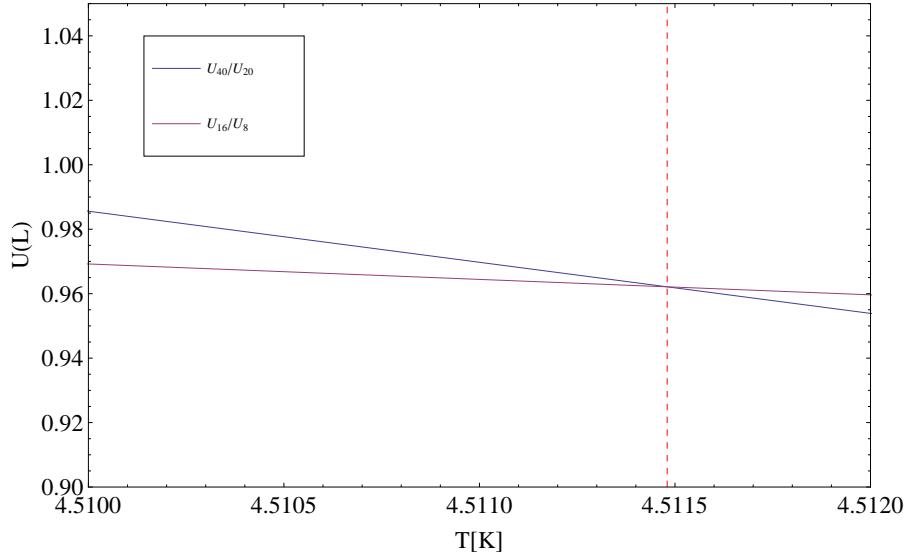
Na osnovu temperaturskog ponašanja kumulanata može se odrediti kritična temperatura i za 3D sistem. Potraženi su preseci odnosa kumulanata U_{40}/U_{20} i U_{16}/U_8 . Na Sl. 4.17 je data temperaturska zavisnost datih odnosa kumulanata i očigledno je da je tačka preseka krivih negde oko 4.5 K.



Sl. 4.17: Presek odnosa kumulanata trodimenzionog sistema

Na Sl. 4.18 je izdvojen deo temperaturskog opsega oko 4.5 K ne bi li se bolje uočila vrednost

kritične temperature. Sa grafika se dobija da na osnovu Monte Karlo simulacije kritična temperatura trodimenzionog Izingovog feromagneta iznosi $T_C = 4.51148$ K.

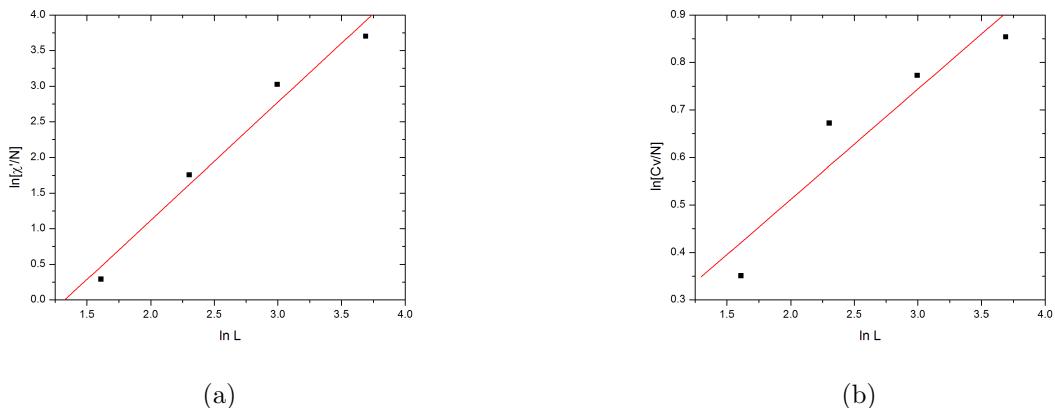


Sl. 4.18: Detalj preseka oodnosa kumulanata trodimenzionog sistema

Na osnovu nekih objavljenih rezultata stoji da je procena ove temperature $T_C = 4.51152$ [17, 30], pa samim tim vrednost koja je dobijena na osnovu Monte Karlo simulacije ne odstupa mnogo, samo $\delta_{T_C} = 0.001\%$, što predstavlja čak odličan rezultat i potvrdu da je programski kod dobro generalisan na 3D sistem.

4.3.3 Kritični eksponenti 3D sistema

Kritični eksponenti trodimenzionog sistema određuju se kao što je rađeno kod dvodimenzionog sistema. Naime, fitovani su podaci za vrednosti $L = 5, 10, 20, 40$, jer se pokazalo da se dobijaju bolji rezultati koji se mogu porebiti sa vrednostima za kritične eksponente dobijene aproksimativno metodama poput renorm grupe [25].



Sl. 4.19: Linearni fit podataka logaritamskih zavisnosti susceptibilnosti (a) i topotognog kapaciteta (b) od logaritma linearne dimenzije rešetke za trodimenzioni sistem

Linearnim fitovanjem logaritamskih zavisnosti maksimuma susceptibilnosti i topotnog kapaciteta od logaritma L dobijaju se kao koeficijenti pravca i odnosi kritičnih eksponenata sledeće vrednosti:

$$\frac{\gamma}{\nu} = 1.65788 \pm 0.18406 \quad \frac{\alpha}{\nu} = 0.23216 \pm 0.05851 \quad (4.9)$$

Dalje korišćenjem Rašbrukove jednakosti:

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad (4.10)$$

i Džozefsonove jednakosti za trodimenzioni sistem:

$$2 - \alpha = 3\nu \quad (4.11)$$

dobijaju se za vrednosti kritičnih eksponenata:

$$\alpha = 0.144, \quad \beta = 0.415, \quad \gamma = 1.026, \quad \nu = 0.619 \quad (4.12)$$

Ovi rezultati odstupaju u odnosu na date rezultate iz Tabele 1.1:

$$\delta_\alpha \approx 31\%, \quad \delta_\beta \approx 28\%, \quad \delta_\gamma \approx 17\%, \quad \delta_\nu \approx 2\% \quad (4.13)$$

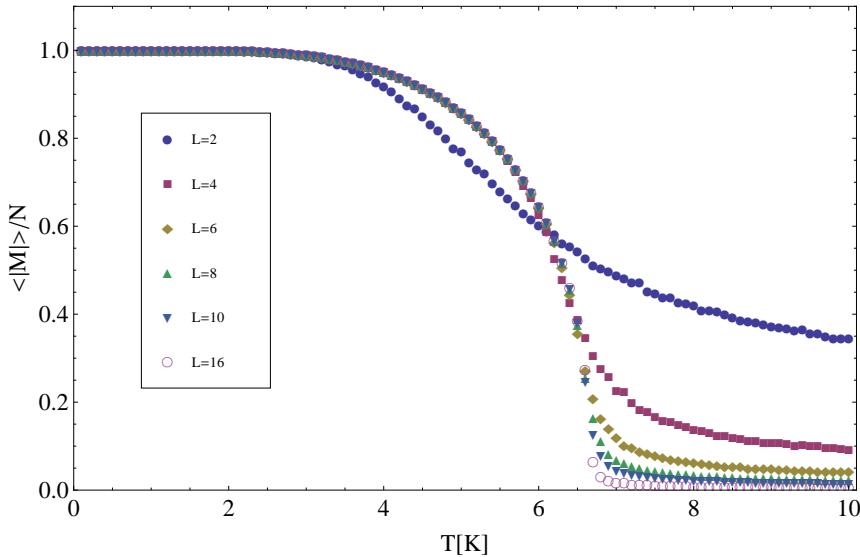
što predstavlja donekle prihvatljiv rezultat. Za bolje rezultate ovih eksponenata bi svakako trebalo obaviti Monte Karlo simulacije na složenijim trodimenzionim rešetkama od onih obrađenih u ovom odeljku.

4.4 Monte Karlo simulacija četvorodimenzionog Izingovog feromagneta

U okviru ovog rada biće prikazani još rezultati analize Monte Karlo simulacije četvorodimenzionog Izingovog feromagneta. Izmene u okviru programskog koda koji već postoji za trodimenzioni sistem se ogledaju u tome da se dodaje još jedan pravac u rešetki spinova, uz dodatno definisanje periodičnih graničnih uslova duž tog pravca. Pošto rezultate možemo porebiti samo sa nekim drugim aproksimativnim rezultatima, uz prikazan generalni uspeh simulacije na dvodimenzionom i trodimenzionom sistemu, nastavlja se sa diskusijom analognih rezultata i kod četvorodimenzionog sistema. Naime, obavljena je Monte Karlo simulacija na rešetki $L \times L \times L \times L$, gde su obavljene simulacije za vrednosti $L = 2, 4, 6, 8, 10, 16$. Simulacija je obavljena sa $2.5 \cdot 10^4$ Monte Karlo koraka i $2.5 \cdot 10^3$ prelaznih koraka, u temperaturskom opsegu od 0.1 do 10 K.

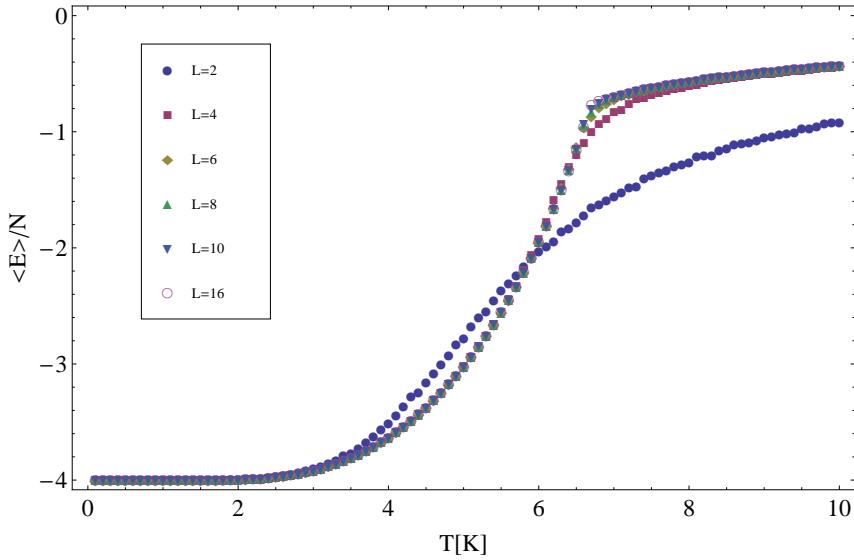
4.4.1 Termodynamičke veličine 4D sistema

Za početak na Sl. 4.20 je data temperaturska zavisnost magnetizacije četvorodimenzionog sistema za date vrednosti L . Sa pomenute slike lako je primetiti odstupanje sistema $L = 2$ od trenda koji prate ostale vrednosti L .



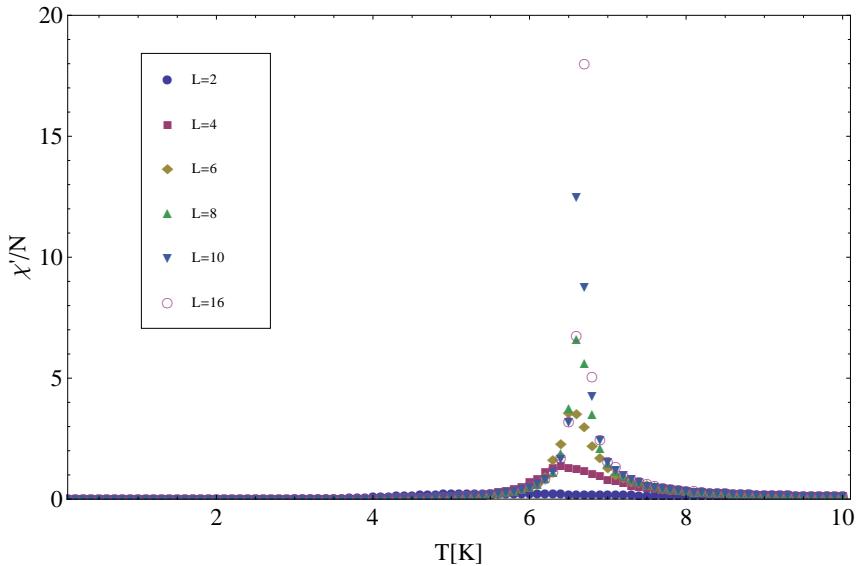
Sl. 4.20: Temperaturska zavisnost magnetizacije četvorodimenzionog Izingovog feromagneta

Sl. 4.21 predstavlja temperatursku zavisnost unutrašnje energije, i svakako je očigledno da energija na niskim temperaturama teži vrednosti -4 , što bi očekivali na osnovu razmatranja u okviru relacije (4.2).



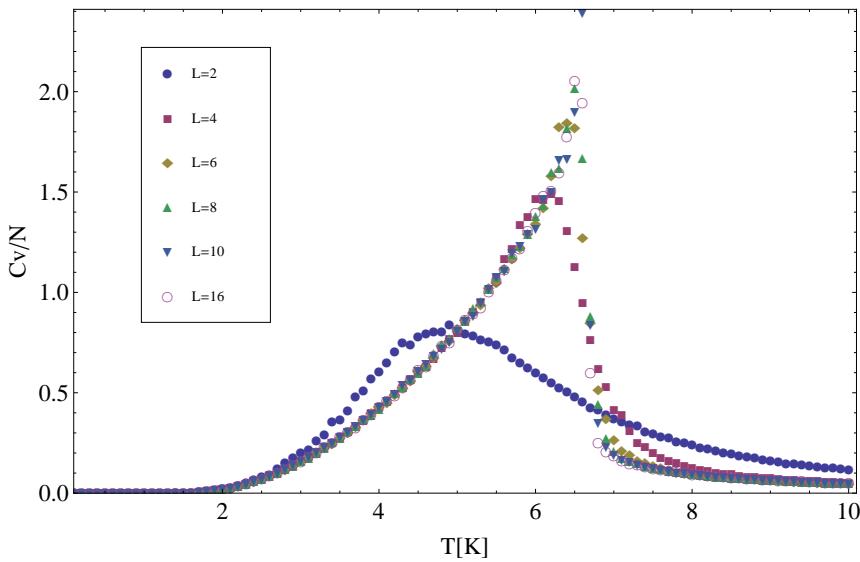
Sl. 4.21: Temperaturska zavisnost energije četvorodimenzionog Izingovog feromagneta

Na Sl. 4.22 je data temperaturska zavisnost susceptibilnosti dok je na Sl. 4.23 data temperaturska zavisnost toplotnog kapaciteta za date vrednosti L sistema spinova na 4D rešetki.



Sl. 4.22: Temperaturska zavisnost susceptibilnosti četvorodimenzionog Izingovog feromagneta

Kod temperaturske zavisnosti toplotnog kapaciteta opet su primetna odstupanja vrednosti sistema sa $L = 2$, od opšteg trenda ostalih vrednosti L .



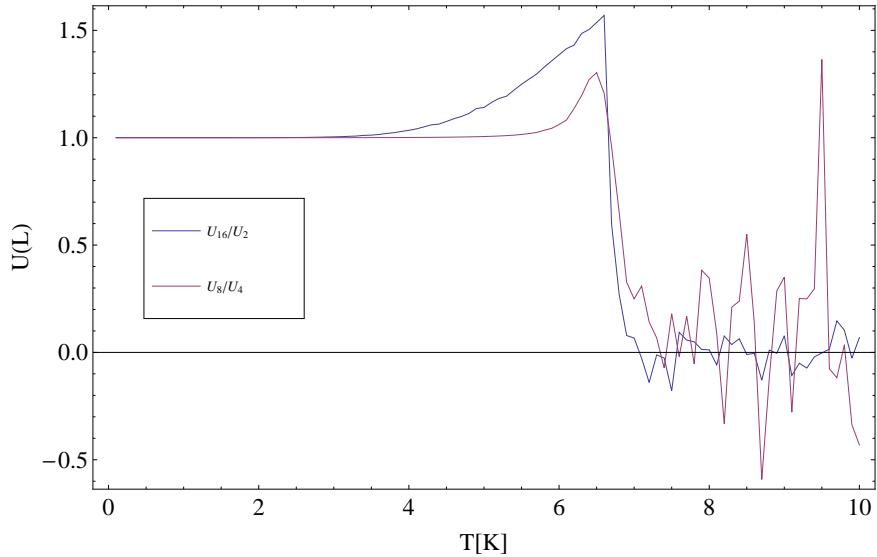
Sl. 4.23: Temperaturska zavisnost toplotnog kapaciteta četvorodimenzionog Izingovog feromagneta

Na osnovu uočenih maksimuma susceptibilnosti i toplotnog kapaciteta može se reći da bi kritična temperatura trebala biti u intervalu od 6 – 7 K, ali to se dalje proverava korišćenjem kumulanata.

4.4.2 Kritična temperatura 4D sistema

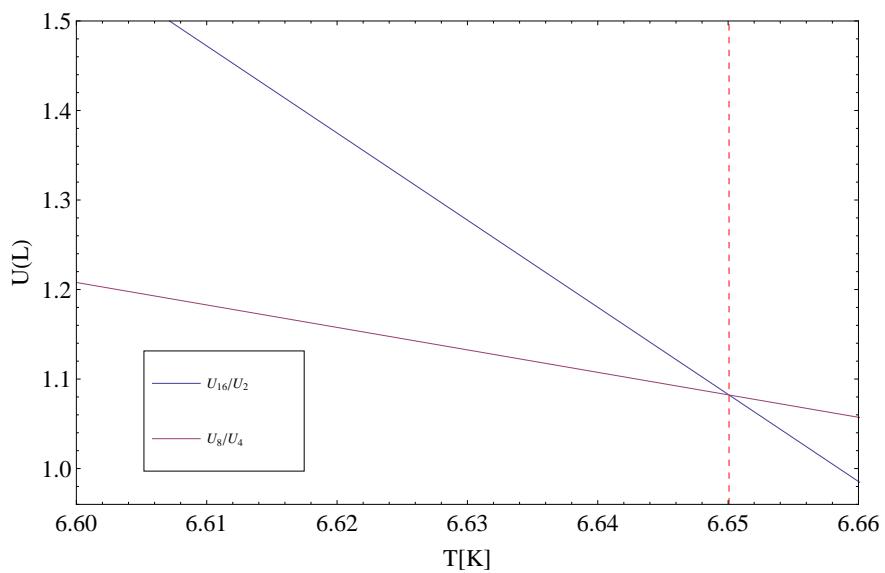
Za određivanje kritične temperature četvorodimenzionog sistema spinova određene su simulacijom temperaturske zavisnosti kumulanata za date vrednosti L . Kritična temperatura je određena u pre-

sekutu odnosa kumulanata U_{16}/U_2 sa U_8/U_4 . Na Sl. 4.24 je dat grafik na kome se može uočiti presek datih odnosa kumulanata.



Sl. 4.24: Presek odnosa kumulanata za četvorodimenzioni sistem

Da bi se bolje odredila kritična temperatura, izdvojen je detalj preseka krivih na Sl. 4.25.

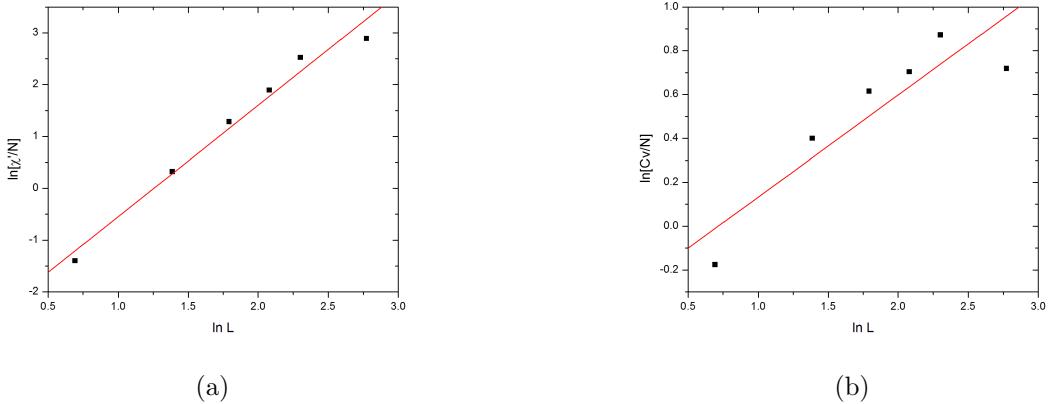


Sl. 4.25: Detalj preseka odnosa kumulanata za četvorodimenzioni sistem

Na osnovu prethodnog grafika je određeno da je kritična temperatura koja je dobijena Monte Karlo simulacijom četvorodimenzionog sistema $T_C = 6.65007$ K. Ova vrednost se dosta dobro slaže sa nekim postojećim rezultatima koji predviđaju da je $T_C = 6.68$ K [18, 30], uz odstupanje od samo $\delta T_C = 0.45\%$.

4.4.3 Kritični eksponenti 4D sistema

Kritični eksponenti se određuju analogno kao i kod dvodimenzionog i trodimenzionog sistema. Posle linearnog fitovanja logaritamskih zavisnosti maksimuma susceptibilnosti i toplotnog kapaciteta od logaritma L dobijeni rezultati su dati na Sl. 4.26.



Sl. 4.26: Linearni fit podataka logaritamskih zavisnosti susceptibilnosti (a) i toplotnog kapaciteta (b) od logaritma linearne dimenzije rešetke za četvorodimenzioni sistem

Kao koeficijenti pravca i odnosi kritičnih eksponenata dobijene su sledeće vrednosti:

$$\frac{\gamma}{\nu} = 2.15078 \pm 0.16237 \quad \frac{\alpha}{\nu} = 0.46553 \pm 0.10932 \quad (4.14)$$

Dalje korišćenjem Rašbrukove jednakosti:

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad (4.15)$$

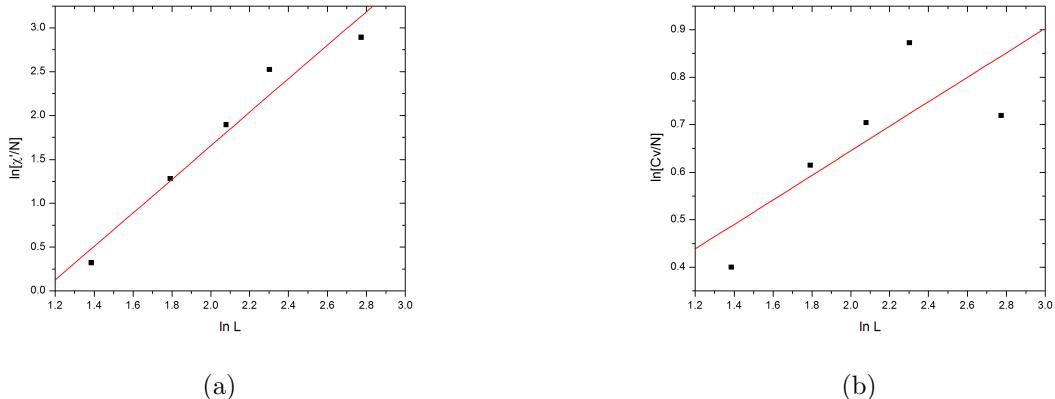
i Džozefsonove jednakosti za četvorodimenzioni sistem:

$$2 - \alpha = 4\nu \quad (4.16)$$

dobijaju se za vrednosti kritičnih eksponenata:

$$\alpha = 0.230, \quad \beta = 0.354, \quad \gamma = 1.062, \quad \nu = 0.494 \quad (4.17)$$

Pošto se pokazalo da se sistem sa $L = 2$ ponaša donekle različito od sistema sa ostalim vrednostima L , sprovedeno je fitovanje podataka za susceptibilitet i toplotni kapacitet bez vrednosti za $L = 2$. Rezultati ponovnog linearног fita su dati na Sl. 4.27.



Sl. 4.27: Linearni fit podataka logaritamskih zavisnosti susceptibilnosti (a) i topotognog kapaciteta (b) od logaritma linearne dimenzije rešetke za četvorodimenzioni sistem bez sistema sa $L = 2$

Na osnovu rezultata novog linearnog fita dobijeni su koeficijenti pravca:

$$\frac{\gamma}{\nu} = 1.91293 \pm 0.23185 \quad \frac{\alpha}{\nu} = 0.25792 \pm 0.12041 \quad (4.18)$$

dok se za kritične eksponente dobijaju vrednosti:

$$\alpha = 0.121, \quad \beta = 0.489, \quad \gamma = 0.9, \quad \nu = 0.470 \quad (4.19)$$

Odstupanja ovih vrednosti u odnosu na vrednosti dobijene aproksimativno i date u Tabeli 1.1 su sada svakako manja, konkretno $\delta_\beta = 2.2\%$, $\delta_\gamma = 10\%$, $\delta_\nu = 6\%$, dok je vrednost α ipak različita od $\alpha = 0$. Dodatno, bolji rezultati se svakako mogu dobiti ako se uzme poznata vrednost eksponenta $\alpha = 0$. Tada se dobija da su ostali kritični eksponenti:

$$\alpha = 0, \quad \beta = 0.462, \quad \gamma = 1.075, \quad \nu = 0.5 \quad (4.20)$$

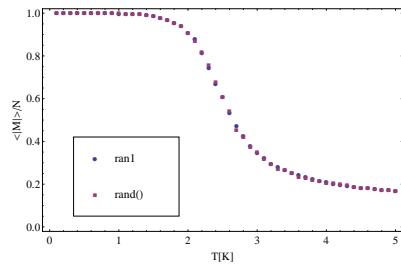
uz relativna odstupanja eksponenata $\delta_\beta = 7.6\%$, $\delta_\gamma = 7.5\%$.

Dati rezultati su svakako dobri u poređenju sa predstavljenim referentnim rezultatima, te stoga postoji određena sigurnost u uspešnost analize i četvorodimenzionog Izingovog feromagneta.

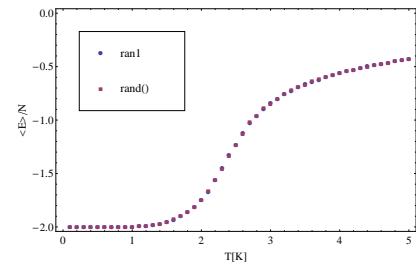
4.5 Uticaj generatora slučajnih brojeva na Monte Karlo simulaciju

Pri Monte Karlo simulaciji čiji su rezultati predstavljeni u okviru ovog rada korišćen je generator slučajnih brojeva **ran1** preuzet iz [26] (videti Prilog B). Naime moguće je i korišćenje sistemskog generatora slučajnih brojeva **rand()** koji je takođe linearni kongruentni generator, ali se na osnovu generalnog trenda slabije koristi pri ovakvim simulacijama. Na kraju ovog rada biće predstavljeno još poređenje rezultata Monte Karlo simulacije za rešetku $L = 8$, za dvodimenzionalni, trodimenzionalni i četvorodimenzionalni sistem, pri korišćenju sistemskog generatora slučajnih brojeva.

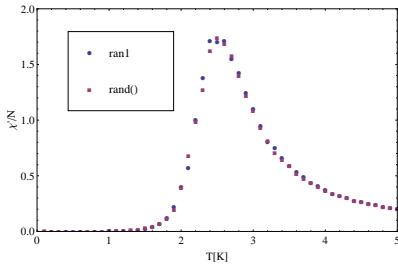
Za početak na Sl. 4.28 je dato poređenje dva generatora slučajnih brojeva na dvodimenzionom Izingovom feromagnetu date linearne dimenzije rešetke.



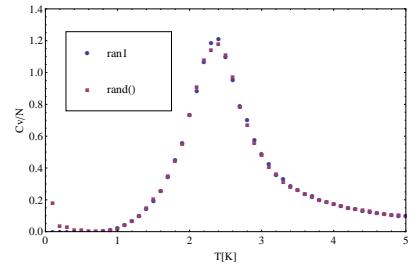
(a) Temperaturska zavisnost magnetizacije



(b) Temperaturska zavisnost unutrašnje energije



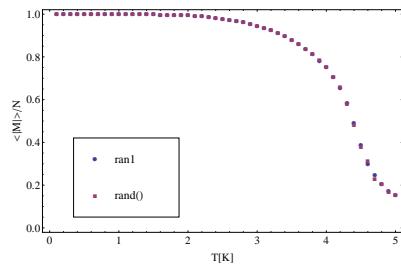
(c) Temperaturska zavisnost susceptibiliteta



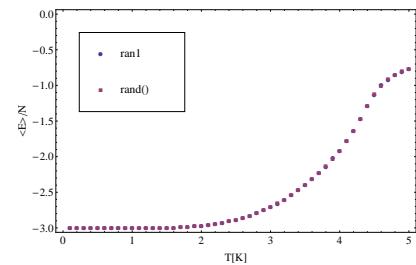
(d) Temperaturska zavisnost toplotnog kapaciteta

Sl. 4.28: Poređenje temperaturskih zavisnosti termodinamičkih veličina rešetke 8×8 pri korišćenju dva različita generatora slučajnih brojeva **ran1** i **rand()**

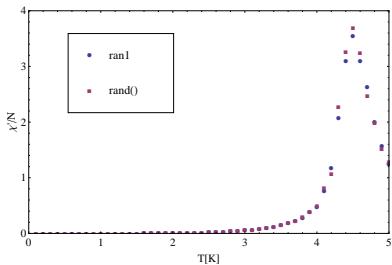
Na Sl. 4.29 je dato poređenje dva generatora slučajnih brojeva na trodimenzionom Izingovom feromagnetu date linearne dimenzije rešetke.



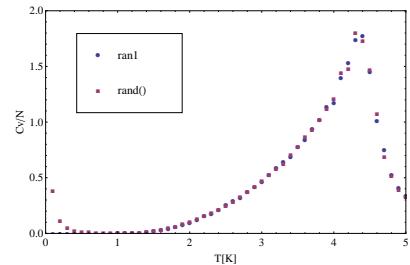
(a) Temperaturska zavisnost magnetizacije



(b) Temperaturska zavisnost unutrašnje energije



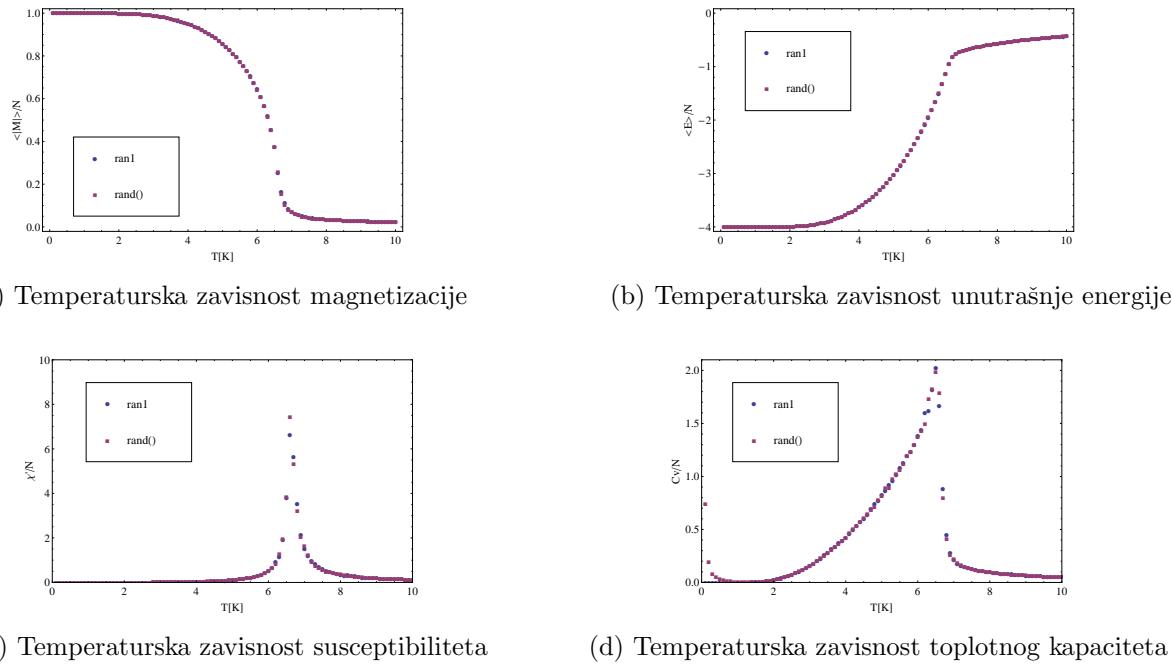
(c) Temperaturska zavisnost susceptibiliteta



(d) Temperaturska zavisnost toplotnog kapaciteta

Sl. 4.29: Poređenje temperaturskih zavisnosti termodinamičkih veličina rešetke $8 \times 8 \times 8$ pri korišćenju dva različita generatora slučajnih brojeva **ran1** i **rand()**

Dodatno, na Sl. 4.30 je dato poređenje dva generatora slučajnih brojeva na četvorodimenzionom Izingovom feromagnetu date linearne dimenzije rešetke.



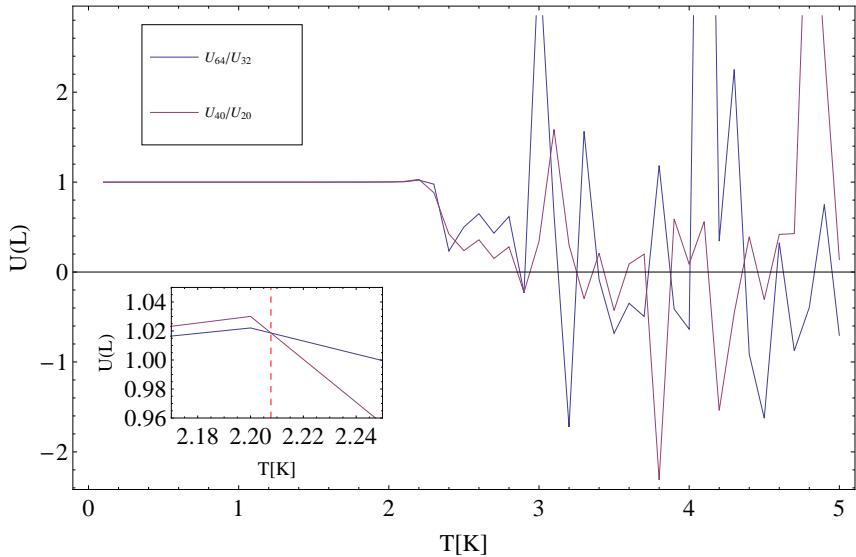
Sl. 4.30: Poređenje temperaturskih zavisnosti termodinamičkih veličina rešetke $8 \times 8 \times 8 \times 8$ pri korišćenju dva različita generatora slučajnih brojeva **ran1** i **rand()**

Na osnovu prethodnih slika u okviru ovog poglavlja jasno je da se ova dva generatora ipak razlikuju. Primenom sistemskog generatora **rand()** pri Monte Karlo simulaciji Izingovog feromagneta očigledne su i pojave nepredviđenih skokova veličina poput toplotnog kapaciteta. Generalno gledano, korišćenje sistemskog generatora bi vodilo drugim vrednostima za parametre poput kritične temperature i kritičnih eksponenata. Rezultati ovog poglavlja su tu da ipak istaknu da izbor generatora slučajnih brojeva pri Monte Karlo simulaciji može imati uticaja na rezultate same simulacije. Da bi se stekao dodatni utisak o razlici generatora slučajnih brojeva, u nastavku je dat pregled kritičnih temperatura dobijenih Monte Karlo simulacijom sa generatorom **rand()**.

4.5.1 Pregled kritičnih temperatura

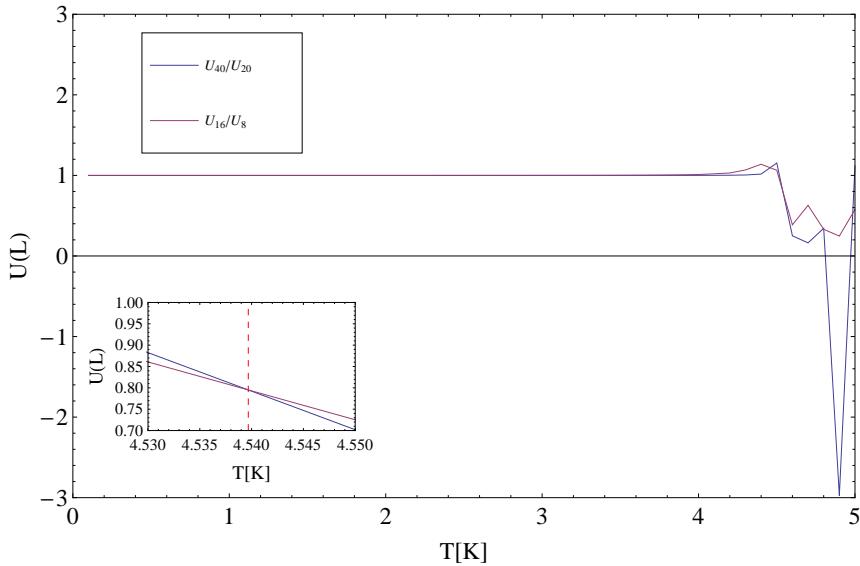
Kao dodatno poređenje rezultata dobijenih korišćenjem sistemskog generatora **rand()** u odnosu na generator **ran1** Monte Karlo simulacija je obavljena korišćenjem sistemskog generatora za 2D, 3D i 4D Izingov feromagnet za linearne dimenzije rešetke L koje su korišćene za simulaciju kod navedenih sistema kada je korišćen generator **ran1**. Određene su kritične temperature na osnovu preseka odnosa kumulanata na isti način kako je to ranije predstavljeno.

Kritična temperatura koja je dobijena korišćenjem sistemskog generatora **rand()** 2D Izingovog feromagneta iznosi $T_C = 2.20772$ K što se razlikuje od rezultata koji je dobijen korišćenjem generatora **ran1** i iznosila je. Odstupanje ove temperature od egzaktne vrednosti je $\delta_{T_C} = 2.7\%$.



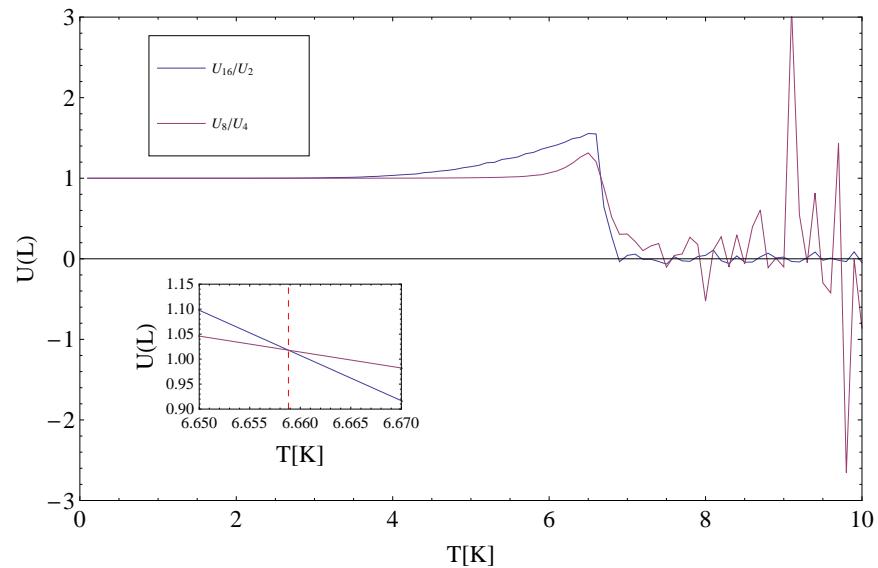
Sl. 4.31: Presek odnosa kumulanata za dvodimenzioni sistem dobijen korišćenjem **rand()** generatora slučajnih brojeva

Analogno, simulacija za 3D sistem je pokazala postojanje kritične temperature od $T_C = 4.53968$ K, sa odstupanjem od tablične vrednosti od $\delta_{T_C} = 0.6\%$, što je svakako opet dobar rezultat.



Sl. 4.32: Presek odnosa kumulanata za trodimenzioni sistem dobijen korišćenjem **rand()** generatora slučajnih brojeva

Konačno kritična temperatura 4D sistema dobijena Monte Karlo simulacijom sa sistemskim generatorom **rand()** iznosi $T_C = 6.65883$ K uz odstupanje od $\delta_{T_C} = 0.32\%$ od aproksimativno dobijene vrednosti. Dobijeno je da je rezultat malo bolji u odnosu na rezultat dobijen korišćenjem generatora slučajnih brojeva **ran1**.



Sl. 4.33: Presek odnosa kumulanata za četvorodimenzioni sistem dobijen korišćenjem **rand()** generatora slučajnih brojeva

Zaključak

Izingov model je svakako jedan od veoma korisnih modela u statističkoj fizici, kako zbog svoje jednostavnosti tako i zbog lakog uvođenja mnogih generalizacija. Dvodimenzioni Izingov model je veoma koristan jer za njega postoji egzaktno rešenje koje se često koristi kao odličan test za mnoge aproksimativne metode, poput Monte Karlo simulacija i sl. Ukoliko se aproksimativni postupci u razmatranju dvodimenzionog Izingovog modela pokažu u saglasnosti sa egzaktnim rešenjem, oni se mogu generalisati za razmatranje nekih složenijih modela.

Ovaj tekst predstavlja prikaz Monte Karlo simulacija 1D, 2D, 3D i 4D Izingovog feromagneta. Simulacija je prvo testirana na poznatom egzaktnom rešenju za rešetku 2×2 , kako bi se uverili u ispravnost programskog koda koji je korišćen za Monte Karlo simulaciju Izingovog feromagneta. Poređenje egzaktnih rezultata sa rezultatima simulacije se pokazalo kao veoma uspešno pa su zatim napravljenje generalizacije za ostale dimenzionalnosti sistema. Kao pitanje od značaja pokazao se svakako odabir generatora slučajnih brojeva, koje je rasvetljeno poređenjem dva generatora `ran1` i sistemskog `rand()`. Davanje prednosti generatoru `ran1` u odnosu na sistemski generator `rand()` je opravdano generalno boljim slaganjem sa egzaktnim rešenjima kao i boljim rezultatima u pogledu kritičnih temperatura. U okviru teksta je prikazano da se rezultati simulacije dobijeni sistemskim generatorom odlikuju i specifičnim ponašanjem termodinamičkih veličina poput toplotnog kapaciteta na niskim temperaturama.

Vrednosti kritičnih temperatura i eksponenata dobijenih u okviru rada se dosta dobro slažu sa nekim postojećim referentnim rezultatima, osim u par slučaja kritičnih eksponenata gde se zadovoljavajuća preciznost trenutnim rezultatima nije mogla postići. Generalno, veća preciznost i bolje sagledavanje osobina Izingovog sistema korišćenjem Monte Karlo simulacije može se postići radom sa rešetkama većih linearnih dimenzija L kao i povećanjem broja Monte Karlo koraka koji su sastavni deo simulacije. Povećanje broja Monte Karlo koraka u simulaciji mora biti propraćeno povećanjem broja prelaznih koraka kako bi se nastale korelacije među podacima što više smanjile. Određivanje grešaka veličina dobijenih Monte Karlo simulacijom nije rađeno u okviru ovog teksta. Postojanje korelacija među podacima iziskuje sofisticiranije metode za određivanje greški merenih veličina koje se svakako mogu dodatno istražiti.

Na kraju treba istaći da se ostvarivanjem zadovoljavajuće preciznosti u analizi parametara Izingovog feromagnetcog sistema stiče povoljna slika o korisnosti Monte Karlo simulacija pri analizi kompleksnih sistema.

Prilog A

Osnovni kod

Programski kod koji je korišćen za Monte Karlo simulaciju Izingovog feromagneta je preuzet iz [29] i na njemu su napravljene određene izmene, čiji je izgled dat u daljem delu ovog Priloga. Prikazani kod korišćen je za simulaciju 2D Izingovog feromagneta, i on je generalisan za korišćenje na ostalim prikazanim dimenzijama sistema jednostavnim dodavanjima pravaca rešetke i definisanjem periodičnih uslova duž uvedenih pravaca.

```
#include <iostream>
#include <math.h>
#include <stdlib.h>
#include <stdio.h>
#include <fstream>
//#include <cmath>
//Generator slučajnih brojeva preuzet iz "Numerical Recipes in C" (Ran1.c)
#include "ran1.h"

using namespace std;

//skladistjenje dobijenih podataka
ofstream DATA("D2.L2.dat",ios::out);
//2D rešetka sa koordinatama x i y
struct lat_type
{
int x;
int y;
};
const int size=2; //broj cvorova u jednom pravcu
const int n=size*size; //ukupan broj cvorova rešetke
double T=0.1; //pocetna temperatura
double maxT=5.0; //maksimalna temperatura
double change=0.1; //temperatrski korak
double lat[size+1][size+1]; //matrica rešetke
long unsigned int mcs=10000; //broj Monte Karlo koraka
int transient=1000; //broj prelaznih koraka
double norm=(1.0/float(mcs*n)); //norma
long int seed=436675; //seme generatora

//pocetna konfiguracija rešetke
void initialize(double lat [size+1][size+1])
{
    for (int y=size ;y>=1;y--)
    {
        for (int x=1;x<=size ;x++)
    }
```

```

        lat [ x ] [ y ] = 1;
    }
}

//funkcija za nasumicno biranje cvora resetke
void choose_random_pos_lat(lat_type &pos)
{
    pos . x = ( int ) ceil ( ran1 ( &seed ) * ( size ) );
    pos . y = ( int ) ceil ( ran1 ( &seed ) * ( size ) );
//    if ( pos . x > size || pos . y > size )
//    {
//        cout << "error in array size allocation for random position on lattice !";
//        exit ( 0 );
//    }
}

//racunanje energije na jednom cvoru
double energy_pos ( lat_type &pos )
{
//periodicni granicni uslovi
int up , down , left , right ;
double e ;
if ( pos . y == size )
up = 1 ;
else
up = pos . y + 1 ;
if ( pos . y == 1 )
down = size ;
else
down = pos . y - 1 ;
if ( pos . x == 1 )
left = size ;
else
left = pos . x - 1 ;
if ( pos . x == size )
right = 1 ;
else
right = pos . x + 1 ;

//energija jednog cvora
e = - 1 * lat [ pos . x ] [ pos . y ] * ( lat [ left ] [ pos . y ] + lat [ right ] [ pos . y ] + lat [ pos . x ] [ up ] + lat [ pos . y ] [ down ] ) ;
return e ;
}

//funkcija koja odredjuje da li ce se spin okretati na nekom cvoru
bool test_flip ( lat_type pos , double &de )
{
de = - 2 * energy_pos ( pos ); //change in energy for specific spin
if ( de < 0 )
return true; //flip due to lower energy
else if ( ran1 ( &seed ) < exp ( - de / T ) )
return true; //flip due to heat bath
else
return false; //no flip
}

```

```

//okretanje spina na nekom cvoru
void flip(lat_type pos)
{
    lat [ pos .x ] [ pos .y]=-lat [ pos .x ] [ pos .y ];
}

//funkcija za propustanje prelaznih rezultata
void transient_results()
{
lat_type pos;
double de=0;
for (int a=1;a<=transient ;a++)
{
for (int b=1;b<=n ;b++)
{
choose_random_pos_lat ( pos );
if ( test_flip ( pos ,de ))
{
flip ( pos );
}
}
}
}

//funkcija za racunanje magnetizacije resetke
double total_magnetization()
{
    double m=0;
    for (int y=size ;y>=1;y--)
    {
        for (int x=1;x<=size ;x++)
        {
            m +=lat [ x ] [ y ];
        }
    }
    return m;
}

//funkcija za racunanje energije resetke
double total_energy()
{
lat_type pos;
double e=0;
for (int y=size ;y>=1;y--)
{
pos.y=y;
for (int x=1;x<=size ;x++)
{
pos.x=x;
e+=energy_pos ( pos );
}
}
return e;
}

//glavni program
int main()
{
    //deklarisanje promenljivih koje se koriste u racunu velicina
}

```

```

double E=0,Esq=0,Esq_avg=0,E_avg=0,etot=0,etotsq=0;
double M=0,Msq=0,Msq_avg=0,M_avg=0,mtot=0,mtotsq=0;
double Mabs=0,Mabs_avg=0,Mq_avg=0,mabstot=0,mqtot=0;
double de=0;
lat_type pos;

//pocetna konfiguracija
initialize(lat);
//petlja za datu temperaturu
for (;T<=maxT;T=T+change)
{
    //funkcija prelaznih koraka
    transient_results();
    //srednje vrednosti
    M=total_magnetization();
    Mabs=abs(total_magnetization());
    E=total_energy();

    //pocetne vrednosti velicina za datu temperaturu
    etot=0;
    etotsq=0;
    mtot=0;
    mtotsq=0;
    mabstot=0;
    mqtot=0;

    //Monte Karlo petlja
    for (int unsigned a=1;a<=mcs;a++)
    {
        //Metropolisova petlja
        for (int b=1;b<=n;b++)
        {
            choose_random_pos_lat(pos);
            if(test_flip(pos,de))
            {
                flip(pos);

                E+=2*de;
                M+=2*lat[pos.x][pos.y];
                Mabs+=abs(lat[pos.x][pos.y]);
            }
        }

        //sumacija velicina
        etot+=E/2.0;
        etotsq+=E/2.0*E/2.0;
        mtot+=M;
        mtotsq+=M*M;
        mqtot+=M*M*M*M;
        mabstot+=(sqrt(M*M));
    }

    //srednje velicine
    E_avg=etot*norm;
    Esq_avg=etotsq*norm;
    M_avg=mtot*norm;
    Msq_avg=mtotsq*norm;
    Mabs_avg=mabstot*norm;
    Mq_avg=mqtot*norm;
}

```

```
//ispis podataka u fajl definisan na pocetku
DATA<<T<< //temperatura
"\t"<<M_avg<<
"\t"<<Mabs_avg<<
"\t"<<Msq_avg<< //<M>;<|M|>;<M^2> po spinu
"\t"<<(Msq_avg-(M_avg*M_avg*n))/(T)<< //susceptibilnost po spinu (X)
"\t"<<(Msq_avg-(Mabs_avg*Mabs_avg*n))/(T)<< //susceptibilnost po spinu (X')
"\t"<<E_avg<<"\t"<<Esq_avg<< //<E>;<E^2> po spinu
"\t"<<(Esq_avg-(E_avg*E_avg*n))/(T*T)<< //toplotni kapacitet (C) po spinu
"\t"<<1-((Mq_avg)/(3*Msq_avg*Msq_avg*n))<<endl;//kumulant (U-L)

}
```


Prilog B

Programski kod generatora slučajnih brojeva

Generator slučajnih brojeva **ran1** koji se u okviru programskog koda Monte Karlo simulacije koristi za generisanje slučajnih brojeva preuzet je iz [26].

```
#define IA 16807
#define IM 2147483647
#define AM (1.0/IM)
#define IQ 127773
#define IR 2836
#define NTAB 32
#define NDIV (1+(IM-1)/NTAB)
#define EPS 1.2e-7
#define RNMX (1.0-EPS)
double ran1(long *idum)
{
    int j;
    long k;
    static long iy=0;
    static long iv[NTAB];
    double temp;
    if (*idum <= 0 || !iy)
    {
        if (-(*idum) < 1) *idum=1;
        else *idum = -(*idum);
        for (j=NTAB+7;j>=0;j--)
        {
            k=(*idum)/IQ;
            *idum=IA*(*idum-k*IQ)-IR*k;
            if (*idum < 0) *idum += IM;
            if (j < NTAB) iv[j] = *idum;
        }
        iy=iv[0];
    }
    k=(*idum)/IQ;
    *idum=IA*(*idum-k*IQ)-IR*k;
```

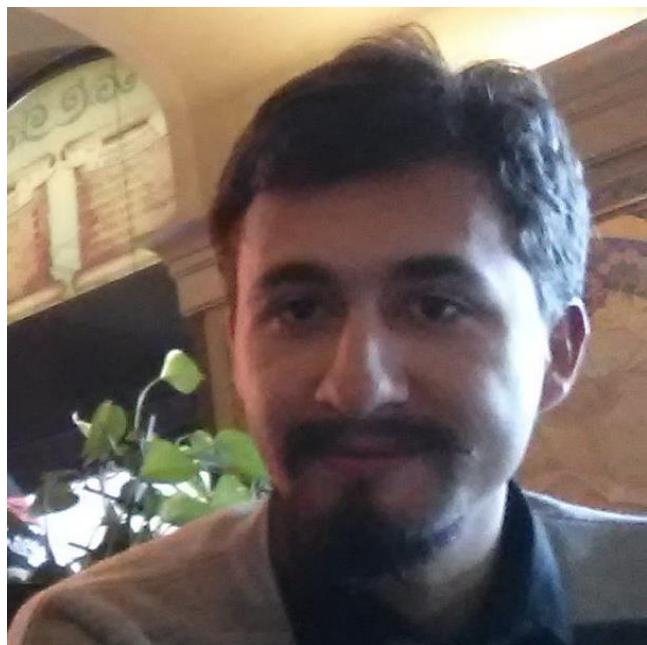
```
if (*idum < 0) *idum += IM;
j=iy/NDIV;
iy=iv[j];
iv[j] = *idum;
if ((temp=AM*iy) > RNMX) return RNMX;
else return temp;
}
```

Literatura

- [1] Ernst Ising. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, 31(1):253–258, 1925. ISSN 0044-3328. URL <http://dx.doi.org/10.1007/BF02980577>.
- [2] Stephen G. Brush. History of the lenz-ising model. *Rev. Mod. Phys.*, 39:883–893, Oct 1967. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.39.883>.
- [3] Lars Onsager. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, 65:117–149, Feb 1944. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.65.117>.
- [4] C. N. Yang. The spontaneous magnetization of a two-dimensional ising model. *Phys. Rev.*, 85: 808–816, Mar 1952. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.85.808>.
- [5] Gordon F. Newell and Elliott W. Montroll. On the theory of the ising model of ferromagnetism. *Rev. Mod. Phys.*, 25:353–389, Apr 1953. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.25.353>.
- [6] Bruria Kaufman. Crystal statistics. ii. partition function evaluated by spinor analysis. *Phys. Rev.*, 76:1232–1243, Oct 1949. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.76.1232>.
- [7] Daniel C. Mattis. *The Theory of Magnetism Made Simple*. World Scientific Publishing, 2006.
- [8] T. D. Schultz, D. C. Mattis, and E. H. Lieb. Two-dimensional ising model as a soluble problem of many fermions. *Rev. Mod. Phys.*, 36:856–871, Jul 1964. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.36.856>.
- [9] W. Nolting, A. Ramakanth. *Quantum Theory of Magnetism*. Springer-Verlag, 2009.
- [10] K. Huang. *Statistical Mechanics*. John Wiley & Sons, Inc., 1963.
- [11] R. J. Baxter. *Exactly Solvable Models*. Academic Press, 1982.
- [12] K. Binder, D. W. Hermann. *Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. Springer-Verlag, 1988.
- [13] H. Eugene Stanley. *Introduction to Phase Transition and Critical Phenomena*. Clarendon Press, 1971.
- [14] Sava Milošević. *Osnovi fenomenološke termodinamike*. Univerzitet u Beogradu, 1979.
- [15] Kenneth G. Wilson and J. Kogut. The renormalization group and the expansion. *Physics Reports*, 12(2):75 – 199, 1974. ISSN 0370-1573. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0370157374900234>.
- [16] David P. Landau, Kurt Binder. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge University Press, 2005.

- [17] Riccardo Guida, Jean Zinn Justin. *3D Ising Model: The Scaling Equation of State*. 1996. URL <https://arxiv.org/abs/hep-th/9610223>.
- [18] P. H. Lundow, K. Markström. *Critical behaviour of the Ising model on the 4-dimensional lattice*. 2012. URL <https://arxiv.org/abs/1202.3031>.
- [19] Tobias Preis, Peter Virnau, Wolfgang Paul, and Johannes J Schneider. Gpu accelerated monte carlo simulation of the 2d and 3d ising model. *Journal of Computational Physics*, 228(12):4468–4477, 2009.
- [20] Malvin H. Kalos, Paula A. Whitlock. *Monte Carlo Methods*. Wiley, 2008.
- [21] Werner Krauth. *Statistical Mechanics: Algorithms and Computations*. Oxford University Press, 2006.
- [22] Nicholas Metropolis and S. Ulam. The monte carlo method. *Journal of the American Statistical Association*, 44(247):335–341, 1949. URL <http://amstat.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/01621459.1949.10483310>.
- [23] Nicholas Metropolis, Arianna W. Rosenbluth, Marshall N. Rosenbluth, Augusta H. Teller, and Edward Teller. Equation of state calculations by fast computing machines. *The Journal of Chemical Physics*, 21(6):1087–1092, 1953. URL <http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jcp/21/6/10.1063/1.1699114>.
- [24] Steve Brooks, Andrew Gelman, Galin L. Jones, Xiao-Li Meng. *Handbook of Markov Chain Monte Carlo*. CRC Press, 2011.
- [25] Kurt Binder and Erik Luijten. Monte carlo tests of renormalization-group predictions for critical phenomena in ising models. *Physics Reports*, 344(4–6):179 – 253, 2001. ISSN 0370-1573. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370157300001277>.
- [26] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, Brian P. Flannery. *Numerical recepies in C: the Art of Scientifing Computing*. Cambridge University Press, 1992.
- [27] Veljković Kristina. *Monte Karlo metode*. Matematički fakultet, Univerzitet u Beogradu. URL <http://poincare.matf.bg.ac.rs/~ssegan/MonteKarlo.pdf>.
- [28] David DiCarlo. *Random Number Generation: Types and Techniques*. Liberty University, Virginia, 2012.
- [29] Jaques Kotze. *Introduction to Monte Carlo methods for an Ising Model of a Ferromagnet*. 2008. URL <https://arxiv.org/abs/0803.0217>.
- [30] Peter Meyer. *Computational Studies of Pure and Dilute Spin Models*. 2000. URL <http://www.hermetic.ch/compsci/thesis/index.html>.

Biografija



Miloš Adamović je rođen 17.08.1992. godine u Šapcu. Osnovnu školu "Dositej Obradović" završio je u Krivaji. Posle završene Mitrovačke Gimnazije u Sremskoj Mitrovici 2011. godine upisuje studije fizike na Prirodno-matematičkom fakultetu u Novom Sadu. Osnovne akademske studije završava 2015. godine kada upisuje master studije fizike smer Teorijska fizika kondenzovane materije. U septembru 2016. godine je položio sve ispite i stekao pravo odbrane master rada.

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET

KLJUČNA DOKUMENTACIJSKA INFORMACIJA

Redni broj:

RBR

Identifikacioni broj:

IBR

Tip dokumentacije:

Monografska dokumentacija

TD

Tip zapisa:

Tekstualni štampani materijal

TZ

Vrsta rada:

Master rad

VR

Autor:

Miloš Adamović, br. dos. 171M/15

AU

Mentor:

dr Slobodan Radošević

MN

Naslov rada:

Termodinamičke karakteristike Izingovog modela na prostim
(hiper)kubnim rešetkama

NR

Jezik publikacije:

srpski (latinica)

JP

Jezik izvoda:

srpski/engleski

JI

Zemlja publikovanja:

Srbija

ZP

Uže geografsko područje:

Vojvodina

UGP

Godina:

2016

GO

Izdavač:

Autorski reprint

IZ

Mesto i adresa:

Prirodno-matematički fakultet, Trg Dositeja Obradovića 4, Novi Sad

MA

Fizički opis rada:

Fizika

FO

Naučna oblast:

Teorijska fizika kondenzovane materije

NO

Naučna disciplina:

Izingov model, Monte Karlo metod, Kritična temperatura, Kritični

ND

Predmetna odrednica/ ključne reči:

eksponenti

PO

UDK

Čuva se:

Biblioteka departmana za fiziku, PMF-a u Novom Sadu

ČU

Važna napomena:

Rad je realizovan u okviru istraživanja vezanih
za projekte Ministarstva prosvete, nauke i tehnološkog razvoja i
Pokrajinskog sekretarijata za visoko obrazovanje
i naučnoistraživačku delatnost pod nazivima
"Uticaj elementarnih ekscitacija
i konformacija na fizička svojstva novih materijala baziranih
na jako korelisanim niskodimenzionalnim sistemima"
(OI 171009) i "Neperturbativni i perturbativni aspekti složenih
mnogočestičnih sistema" (APV 114-451-2201/2016-02).

Izvod:

IZ

Datum prihvatanja teme od NN veća:

Jun 2016.

DP

Datum odbrane:

04.10.2016.

DO

Članovi komisije:

KO

Predsednik: dr Milan Pantić

član: dr Slobodan Radošević

član: dr Maja Stojanović

UNIVERSITY OF NOVI SAD
FACULTY OF SCIENCE AND MATHEMATICS

KEY WORDS DOCUMENTATION

Accession number:

ANO

Identification number:

INO

Document type:

DT

Type of record:

TR

Content code:

CC

Author:

AU

Mentor/comentor:

MN

Title:

TI

Language of text:

LT

Language of abstract:

LA

Country of publication:

CP

Locality of publication:

LP

Publication year:

PY

Publisher:

PU

Publication place:

PP

Physical description:

PD

Scientific field:

SF

Scientific discipline:

SD

Subject/ Key words:

SKW

UC

Holding data:

HD

Note:

N

Monograph publication

Textual printed material

Final paper

Miloš Adamović, br. dos. 171M/15

dr Slobodan Radošević

Thermodynamic properties of the Ising model on simple (hyper)cubic lattices

Serbian (Latin)

English

Serbia

Vojvodina

2016

Author's reprint

Faculty of Science and Mathematics, Trg Dositeja Obradovića 4, Novi Sad

Solid state theory

Ising model, Monte Carlo method, Critical temperature, Critical exponents

Library of Department of Physics, Trg Dositeja Obradovića 4

This work was supported by the Serbian Ministry of Education and Science under project "Influence of elementary excitations and conformations on the physical properties of new materials based on highly correlated low-dimensional systems"(OI 171009) and also by the Provincial Secretariat for High Education and Scientific Research of Vojvodina under project "Nonperturbative and perturbative aspects of complex many-body systems"(APV 114-451-2201/2016-02).

Abstract:

AB

Accepted by the Scientific Board: June 2016.

ASB

Defended on:

DE

04.10.2016

Thesis defend board:

DB

President: dr Milan Pantić

Member: dr Slobodan Radošević

Member: dr Maja Stojanović