

Προσομοίωση του Μοντέλου Ising με τη γλώσσα Fortran και τη γλώσσα Java με τη χρήση περιοδικών και αντιπεριοδικών συνοριακών συνθηκών

Σαράντος Ψυχάρης¹, Ηρακλής Χρηστάκης²

¹ Πανεπιστήμιο Αιγαίου, Παιδαγωγικό Τμήμα Δημοτικής Εκπαίδευσης,
psycharis@rhodes.aegean.gr

² Πανεπιστήμιο Αθηνών, Τμήμα Φυσικής

Περίληψη. Στην παρούσα εργασία, εφαρμόζουμε τη μέθοδο προσομοίωσης Monte Carlo και τον αλγόριθμο Metropolis για τη μελέτη του Διδιάστατου Ising μοντέλου. Συγκεκριμένα μελετούμε τη μακροσκοπική ενέργεια, τη μαγνήτιση, την ειδική θερμότητα και τη μαγνητική επιδεκτικότητα του υλικού ως συνάρτηση της θερμοκρασίας απουσία ή όχι μαγνητικού πεδίου. Μελετάμε επίσης τις διαφορές που εμφανίζονται όταν συμπεριλάβουμε στους υπολογισμούς μας και τους δεύτερους γείτονες. Η μελέτη πραγματοποιείται για περιοδικές αλλά και αντιπεριοδικές συνοριακές συνθήκες. Τέλος οπτικοποιούμε τη διαδικασία με τη δημιουργία μιας εφαρμογής Java για την επιλογή της θερμοκρασίας από το χρήστη και την εμφάνιση σε γραφικό περιβάλλον των σχηματισμών από τα spin που δημιουργούνται. Η μέθοδος μπορεί να εφαρμοσθεί στην τριτοβάθμια εκπαίδευση για τη διδασκαλία του φαινομένου αλλά και για τη διδασκαλία της μεθόδου Monte Carlo και του αλγόριθμου Metropolis.

Εισαγωγή

Η Μέθοδος MONTE CARLO–Αλγόριθμος METROPOLIS

Έστω ένα σύστημα ατόμων, με πεπερασμένο αριθμό καταστάσεων (σχηματισμών) και E_n η ενέργεια του n -οστού σχηματισμού. Η πιθανότητα το σύστημα να βρίσκεται στο n -οστό

σχηματισμό είναι, σύμφωνα με το τύπο του Boltzmann:
$$P_n = \frac{e^{-\frac{E_n}{kT}}}{Z}$$

Η μέθοδος Monte Carlo χρησιμοποιείται για να κάνει υπολογισμούς –κατά προσέγγιση– πάνω σε επιλεγμένα σημεία του χώρου ολοκλήρωσης. Ειδικότερα στις θεωρίες πεδίου εφαρμόζεται για τον υπολογισμό μέσων τιμών όπως π.χ. $\langle f \rangle = \int dU_b f(U_b) \exp(-\beta S(U))$ όπου ο τελεστής $f(U_b)$ είναι συνάρτηση συναρτήσεων (functional) του σχηματισμού U στο πλέγμα. Η μέθοδος ουσιαστικά είναι να δημιουργηθούν από τον υπολογιστή σχηματισμοί (configurations) ο ένας μετά τον άλλον στο χρονικό διάστημα τ (ο διακριτός «χρόνος» του υπολογιστή). Η κανονικοποιημένη πιθανότητα p_{ij} για να περάσουμε από τον ένα σχηματισμό $U_b(i)$ στον επόμενο $U_b(j)$ σε χρόνο τ (ο χρόνος του υπολογιστή) συνδέεται με την πιθανότητα p_j κάθε σχηματισμού, όταν αυτός βρίσκεται σε θερμική ισορροπία. Η $p_j = \frac{\exp(-\beta S(U))}{Z}$ και με τη

μέθοδο Monte Carlo επιχειρούμε να υπολογίσουμε μέσες τιμές $\langle f \rangle$ με αθροίσματα της μορφής
$$Y(\tau) = \frac{1}{\tau} \sum_{i=1}^{\tau} f(U_i)$$
. Η παραπάνω προσέγγιση δικαιολογείται θεωρητικά εξαιτίας της σχέσης:

$Y(\tau) \sim O\left(\frac{1}{\sqrt{\tau}}\right)$. Επομένως πρέπει να δημιουργηθούν μέσα σε χρόνο τ κατάλληλοι σχηματισμοί

και στη συνέχεια να υπολογισθούν τα $f(U(\tau))$ και $Y(\tau)$ όπου για μεγάλες τιμές του τ η $Y(\tau)$ θα συγκλίνει στην αναμενόμενη μέση τιμή $\langle f(U) \rangle$. Πρακτικά η μέθοδος δίνει αποτελέσματα όταν έχουμε τη δυνατότητα να δημιουργήσουμε σχηματισμούς με τη πιθανότητα

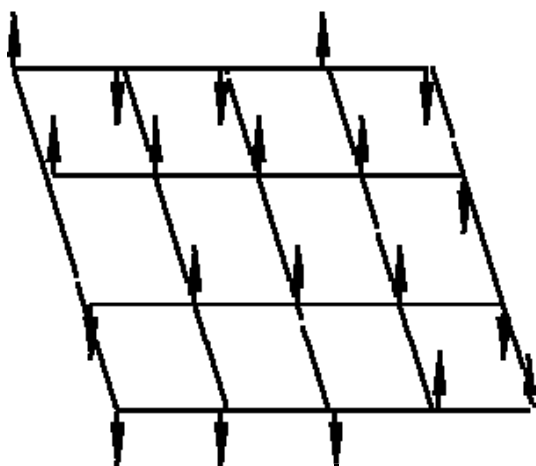
$\pi_j = \frac{\exp(-\beta S(U))}{Z}$. Η διαδικασία αυτή καλείται δειγματοληψία σημαντικότητας (importance

sampling) και πραγματοποιείται με τον αλγόριθμο Metropolis (Metropolis & Ulam 1949, McCracken 1955). Με τον αλγόριθμο αυτό δημιουργούνται καταστάσεις με μια αρχική πιθανότητα μετάβασης p^*_{ij} και μας αφήνει την ελευθερία όταν διαθέτουμε έναν αρχικό σχηματισμό $U(i)$ να δημιουργήσουμε τον επόμενο $U(j)$ σχεδόν αυθαίρετα. Στη συνέχεια ορίζουμε τη πιθανότητα

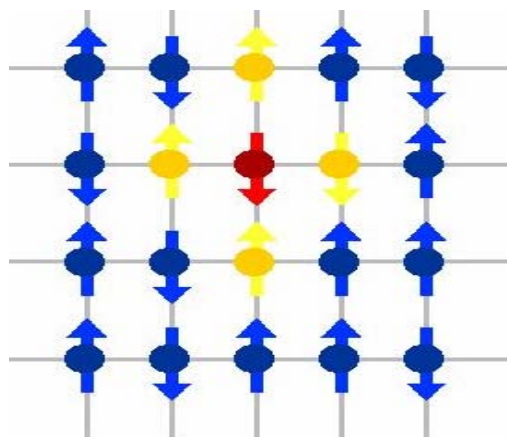
$$p_{ij} = p_{ij}^* \frac{\pi_j}{\pi_i} \text{ αν } \frac{\pi_j}{\pi_i} < 1 \text{ ή } p_{ij} = p_{ij}^* \text{ αν } \frac{\pi_j}{\pi_i} \geq 1$$

Το Μοντέλο ISING

Η Στατιστική Φυσική έχει ως σκοπό μεταξύ των άλλων να προβλέψει τις ιδιότητες πολύπλοκων συστημάτων που αποτελούνται από πολλά αλληλεπιδρώντα σωματίδια που κινούνται με τυχαίες θερμικές κινήσεις. Τα σωματίδια μπορεί να είναι τα μόρια ενός αερίου, τα άτομα ενός μαγνήτη κλπ. Ένας τρόπος με τον οποίο οι Φυσικοί εμβαθύνουν σε αυτά τα συστήματα είναι με τη δημιουργία μοντέλων τα οποία παρουσιάζουν μερικά από τα ενδιαφέροντα χαρακτηριστικά του συστήματος αλλά επιπλέον λύνονται αριθμητικά και με απλούστερο τρόπο. Ίσως το πιο φημισμένο από αυτά τα μοντέλα είναι το μοντέλο Ising το οποίο χρησιμοποιείται για να μοντελοποιήσει τη συμπεριφορά μαγνητών (<http://arxiv.org/cond-mat/9511003>). Στο μοντέλο αυτό ένα σύνολο από μαγνητικά spin τοποθετούνται σε ένα κανονικό πλέγμα. Κάθε spin υπάρχει σε δύο καταστάσεις «πάνω» και «κάτω» ενώ η ενέργεια του συστήματος προσδιορίζεται από το άθροισμα των αλληλεπιδράσεων του spin με τους γείτονές του στο πλέγμα(lattice).



Εικόνα 1: Spin σε σημεία διδιάστατου πλέγματος.



Εικόνα 2: Το spin με κόκκινο χρώμα αλληλεπιδρά με τα κίτρινα spin (στην προσέγγιση του πλησιέστερου γείτονα)

Η τιμή του spin, σε κάθε σημείο $r=(x,y)$, θα είναι $S(r)=\pm 1$, spin "πάνω" ή spin "κάτω" αντίστοιχα, ενώ τα x,y , παίρνουν τιμές από 1 έως L (L το μέγεθος του πλέγματος). Το σύνολο

των τιμών του spin στα σημεία του τετραγωνικού πλέγματος αποτελεί ένα σχηματισμό spin, ο οποίος συμβολίζεται με C . Η ενέργεια κάθε σχηματισμού spin δίνεται από τη σχέση:

$$E(C) = -H \sum_r S(r) - J \sum_{NN} S(r)S(r') - J' \sum_{SN} S(r)S(r'')$$

Ο πρώτος όρος μας δίνει την ενέργεια αλληλεπίδρασης της μαγνητικής ροπής μ του κάθε ατόμου με το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο ενώ ο δεύτερος όρος μας δίνει την ενέργεια αλληλεπίδρασης μεταξύ των spin (στη προσέγγιση του πλησιέστερου γείτονα, όπου κάθε spin αλληλεπιδρά μόνο με τα γειτονικά του spin που απέχουν από αυτό απόσταση ίση με τη σταθερά του πλέγματος) και J η σταθερά αλληλεπίδρασης πρώτων γειτόνων. Έστω ότι η J είναι θετική (δηλαδή πρόκειται για σιδηρομαγνητικό υλικό). Αν τα spin είναι ομόρροπα (όλα πάνω ή όλα κάτω) τότε η ενέργεια αλληλεπίδρασης είναι αρνητική, ενώ όταν είναι αντιπαράλληλα τότε είναι θετική. Ο τρίτος όρος μας δίνει την ενέργεια αλληλεπίδρασης spin-spin των δεύτερων γειτόνων. (η άθροιση γίνεται πάνω στα ζευγάρια των δευτέρων γειτόνων και J' η αντίστοιχη σταθερά αλληλεπίδρασης). Χρησιμοποιώντας την έκφραση $E(C)$, για την ενέργεια ενός σχηματισμού αναζητάμε μία λύση που να ικανοποιεί τη σχέση: $e^{-\beta E(C)} \cdot P(C \rightarrow C') = e^{-\beta E(C')} \cdot P(C' \rightarrow C)$. Η δημιουργία μιας τυχαίας διαδικασίας, πραγματοποιείται με τον εξής αλγόριθμο:

- i) Επιλέγουμε ως αρχική κατάσταση τον σχηματισμό C_0 .
- ii) Θεωρούμε δύο τυχαίους ακεραίους τους x, y , με τιμές από 1 έως L . Η επιλογή αυτή μπορεί να γίνει με τη βοήθεια ενός γεννήτορα τυχαίων αριθμών. Έστω ότι ο σχηματισμός C προκύπτει από το σχηματισμό C_n , αλλάζοντας την τιμή του spin στο σημείο (x, y) . Στη συνέχεια υπολογίζουμε την $\Delta E = E(C) - E(C_n)$.
- iii) Αυξάνουμε το n κατά 1 και διακρίνουμε περιπτώσεις :
 - a) Αν $\Delta E \leq 0$, τότε θέτουμε $C_n = C$ και επιστρέφουμε στο βήμα ii).
 - b) Αν $\Delta E > 0$, τότε θέτουμε $C_n = C$, με πιθανότητα $e^{-\beta \Delta E}$, και επιστρέφουμε στο βήμα ii), αλλιώς θέτουμε $C_n = C_{n-1}$ και επιστρέφουμε πάλι στο βήμα ii).

Το Αυθόρμητο σπάσιμο της συμμετρίας

Ο Coleman (1975), εισάγοντας την έννοια του αυθόρμητου σπασίματος της συμμετρίας (ΑΣΤΣ) γράφει χαρακτηριστικά : «δεν υπάρχει κανένας λόγος γιατί το αναλλοίωτο της Χαμιλτονιανής ενός Κβαντομηχανικού συστήματος θα πρέπει να είναι και αναλλοίωτο της θεμελιώδους κατάστασης». Το αυθόρμητο σπάσιμο της συμμετρίας εμφανίζεται όταν η συμμετρία της Χαμιλτονιανής του συστήματος δεν είναι και συμμετρία των θεμελιωδών καταστάσεων του συστήματος (Johnson 1997, Greenberger 1978). Όταν η συμμετρία που σπάει αυθόρμητα είναι συνεχής (π.χ. αλλαγή φάσης στο πεδίο Schrodinger) τότε υπάρχουν άπειρες θεμελιώδεις καταστάσεις. Αντίθετα όταν η συμμετρία είναι διακριτή (όπως η αντιστροφή των spin στο μοντέλο Ising) ο αριθμός των (εκφυλισμένων θεμελιωδών καταστάσεων είναι πεπερασμένος ενώ όλες συνδέονται με μετασχηματισμούς Συμμετρίας (προκύπτουν η μία από την άλλη). Το αυθόρμητο σπάσιμο της συμμετρίας εμφανίζεται σε πολλά φαινόμενα (υπαγωγιμότητα, συμπύκνωση Bose-Einstein, Σιδηρομαγνητισμό κ.λ.π) αλλά ακόμα και σε ολόκληρο το Σύμπαν σύμφωνα με το καθιερωμένο μοντέλο (standard model). Κατά τη θεμελίωση μιας θεωρίας σε πλέγμα, αν π.χ. για κάθε σημείο του πλέγματος υπάρχει ένα μη ζευγαρωμένο ηλεκτρόνιο, εξαιτίας της άπωσης Coulomb θα έχει ως αποτέλεσμα το χωρικό κομμάτι της κυματοσυνάρτησης να είναι Αντισυμμετρικό. Αυτό θα έχει ως αποτέλεσμα το spin κομμάτι της κυματοσυνάρτησης να είναι συμμετρικό και επομένως τα μη «ζευγαρωμένα» spin των ηλεκτρονίων θα έχουν τη

τάση να έχουν τον ίδιο προσανατολισμό και η Χαμιλτονιανή του συστήματος είναι συμμετρική. Αν περιστρέψουμε όλα τα spin με την ίδια γωνία τότε η Χαμιλτονιανή δεν αλλάζει. Εφαρμόζοντας το θεώρημα της Noether η συμμετρία αυτή έχει ως αποτέλεσμα μια διατηρήσιμη ποσότητα που στη περίπτωση μας είναι το ολικό spin. Για παράδειγμα η Χαμιλτονιανή $H = -j \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j$ και το ολικό spin $\vec{S} = \sum_i \vec{s}_i$ μετατίθενται ενώ καταστάσεις

με όλα π.χ τα spin πάνω $|\dots \uparrow \uparrow \dots\rangle$ είναι ιδιοκαταστάσεις της H.

Επειδή $e^{i\vec{\sigma} \cdot \vec{\theta} / \hbar} = e^{i\vec{\sigma} \cdot \vec{\theta} / 2} = \cos \frac{|\vec{\theta}|}{2} + i\vec{\sigma} \cdot \frac{\vec{\theta}}{|\vec{\theta}|} \sin \frac{|\vec{\theta}|}{2}$ και

$e^{i\vec{\sigma} \cdot \vec{\theta} / 2} |\uparrow\rangle = \cos \frac{|\vec{\theta}|}{2} |\uparrow\rangle + i \sin \frac{|\vec{\theta}|}{2} \left(\frac{\theta_z}{|\vec{\theta}|} |\uparrow\rangle + \frac{\theta_x + i\theta_y}{|\vec{\theta}|} |\downarrow\rangle \right)$ προκύπτει ότι

$\langle \dots \uparrow \uparrow \dots | U(\vec{\theta}) | \dots \uparrow \uparrow \dots \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\cos \frac{|\vec{\theta}|}{2} + i \frac{\theta_z}{|\vec{\theta}|} \sin \frac{|\vec{\theta}|}{2} \right)^N$. Ο όρος στην παρένθεση έχει μέτρο

μικρότερο του 1 και όριο είναι μηδέν, επομένως οι στροφές του τύπου $U(\vec{\theta}) = e^{i\vec{S} \cdot \vec{\theta} / \hbar}$ όταν δρουν στις θεμελιώδεις καταστάσεις δίνουν άλλες καταστάσεις ορθογώνιες με τις προηγούμενες.

Αντιπεριοδικές Συνθήκες

Για τη θεμελίωση θεωριών σε πλέγμα εφαρμόζουμε συνήθως περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Παρά το γεγονός ότι οι περιοδικές συνθήκες ταυτίζονται συνήθως με το να μεταφέρουμε τη τελική πλευρά του πλέγματος στην αρχική (π.χ. τα σημεία με συντεταγμένες (L, j) μεταφέρονται στα $(1, j)$), η γενικότερη μορφή των περιοδικών συνθηκών (Barbour & Psycharis 1990, G. 't-Hooft 1981) είναι η εξής:

$$A_\mu(L, x_2) = \Omega_1(x_2) A_\mu(0, x_2) \Omega_1^{-1}(x_2) - i \partial_\mu(\Omega_1(x_2)) \Omega_1^{-1}(x_2) \quad (1)$$

όπου A_μ η ποσότητα που θεωρούμε ορισμένη στο πλέγμα. Η ύπαρξη μονότιμων συναρτήσεων οδηγεί στην παρακάτω σχέση που πρέπει να ικανοποιείται από τις συναρτήσεις Ω που εκφράζουν τον τρόπο συσχέτισης της ποσότητας A_μ στα σύνορα του πλέγματος $\Omega_1(L) \Omega_2(0) = \Omega_2(L) \Omega_1(0) Z_{12}$ (2), όπου Z_{12} (οι δείκτες 12 αντιστοιχούν στην επιλογή του διδιάστατου πλέγματος) στοιχείο της κυκλικής ομάδας $Z(2)$. Η σχέση 2 περιορίζει την επιλογή να είναι ταυτόχρονα οι Ω_1, Ω_2 ίσες με 1. Για την παρούσα εργασία θεωρήσαμε τις συναρτήσεις Ω σταθερές και ίσες με εκθετικές συναρτήσεις των γνωστών πινάκων του Pauli. Η συνάρτηση $\Omega_1(x_2)$ αντιστοιχεί σε μεταφορά των σημείων όπου $x=L$ ενώ το y μεταβάλλεται και αντίστοιχα η $\Omega_2(x_1)$ σε μεταφορά των σημείων όπου $y=L$ και το x μεταβάλλεται. Ο σκοπός της εισαγωγής αυτών των συνοριακών συνθηκών ήταν να διαπιστώσουμε αν στο πλέγμα οι αντιπεριοδικές συνθήκες δίνουν αναλλοίωτα μεγέθη και τροποποιούν τα αποτελέσματα με περιοδικές συνθήκες εξαιτίας ακριβώς της ύπαρξης διαφορετικής τοπολογίας.

Η οπτικοποίηση με Java

Δημιουργήσαμε μια εφαρμογή με χρήση της γλώσσας Java ώστε να οπτικοποιηθεί η μεταβολή της θερμοκρασίας και οι μετασχηματισμοί των spin. Στο περιβάλλον της διεπαφής υπήρχε η δυνατότητα να λαμβάνονται τα δεδομένα της προσομοίωσης σε Fortran και να μπορεί ο χρήστης να «βλέπει» τους σχηματισμούς. Οι σχηματισμοί αυτοί μπορεί να δημιουργηθούν ακόμα και με χρήση βασικών εργαλείων όπως το Excel.

Υπολογισμοί

Με τον κώδικα σε γλώσσα προγραμματισμού Fortran υπολογίζουμε την ενέργεια, την ειδική θερμότητα C , τη μαγνήτιση M και τη μαγνητική επιδεκτικότητα χ ενός σιδηρομαγνητικού

υλικού. Η ειδική θερμότητα υπολογίζεται από τη σχέση $C = \beta^2 \left(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right) \cdot L^{-2}$,

όπου τις $\langle E^2 \rangle$ και τα $\langle E \rangle^2$ μπορούμε εύκολα να τις υπολογίσουμε με τη βοήθεια του αλγορίθμου Metropolis. Η μαγνήτιση M υπολογίζεται από τη σχέση:

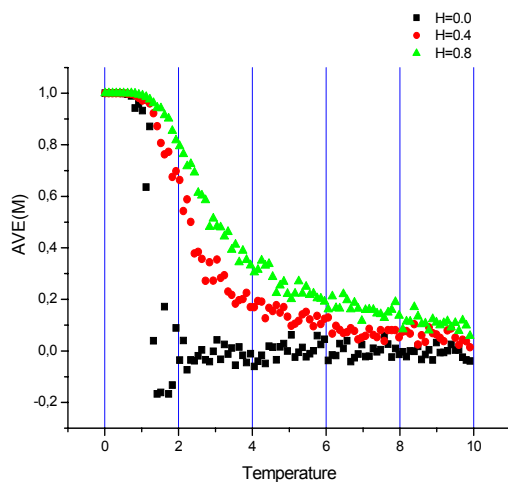
$M = \sum_{i=1}^{L^2} S(r)$, και η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά πλεγματικό σημείο, υπολογίζεται από

τη σχέση: $\chi = \beta^2 \left(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \right) \cdot L^{-2}$.

Οι υπολογισμοί γίνονται με περιοδικές και αντιπεριοδικές συνθήκες. Για κάθε περίπτωση επίσης εφαρμόζουμε είτε «cold start», (αρχικά όλα τα spin, είτε όλα «πάνω» είτε όλα «κάτω») είτε «hot start» δηλαδή αρχικά τα spin έχουν τυχαίο προσανατολισμό.

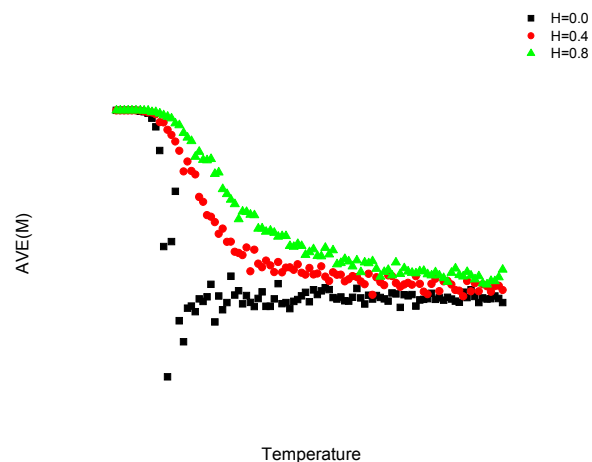
Αποτελέσματα

Παρουσιάζουμε μερικά από τα αποτελέσματα που προέρχονται από την προσομοίωση για cold ή hot start και με παρουσία ή όχι μαγνητικού πεδίου καθώς και για προσέγγιση πρώτων ή δευτέρων γειτόνων.

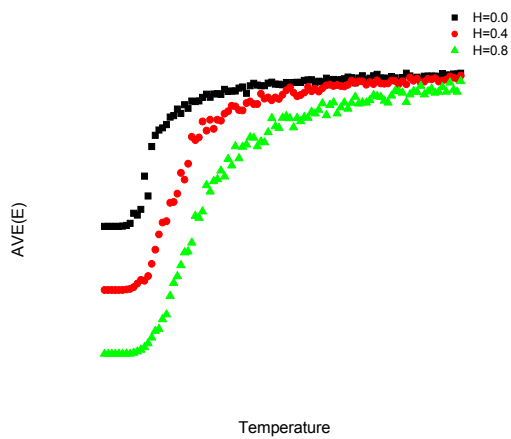


Εικόνα 3: Περιοδικές συνθήκες μέση μαγνήτιση-θερμοκρασία-πρώτοι γείτονες-Cold-Start για τιμές του

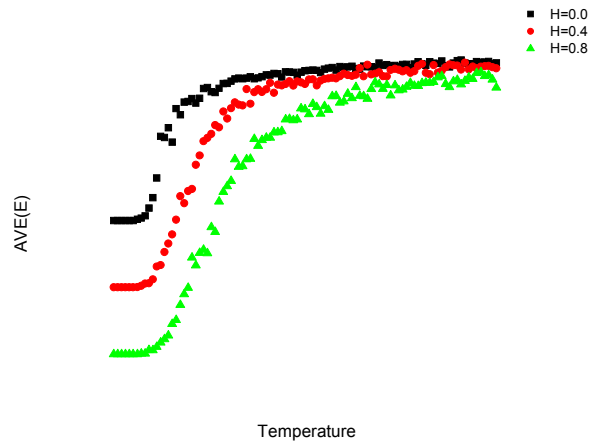
μαγνητικού πεδίου (0, 0.4, 0.8). ΔΙΔΑΚΤΙΚΗ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ ΚΑΙ ΝΕΕΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΕΣ ΣΤΗΝ ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ, 5 (Γ) 2007



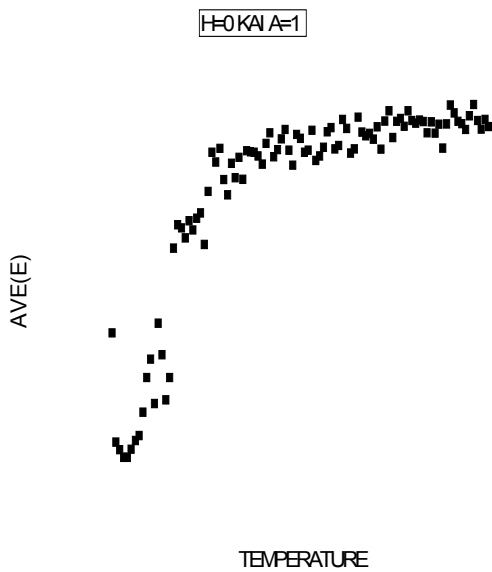
Εικόνα 4: Αντιπεριοδικές συνθήκες μέση μαγνήτιση-θερμοκρασία-πρώτοι γείτονες-Cold-Start για τιμές του μαγνητικού πεδίου (0, 0.4, 0.8).



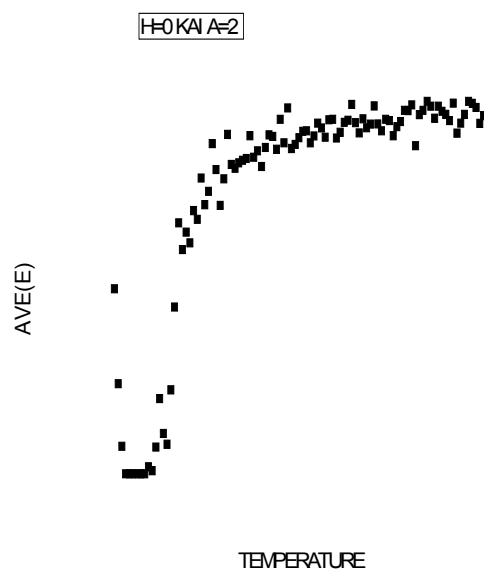
Εικόνα 5: Περιοδικές συνθήκες μέση ενέργεια–θερμοκρασία–πρώτοι γείτονες-Cold-Start για τιμές του μαγνητικού πεδίο (0, 0.4, 0.8).



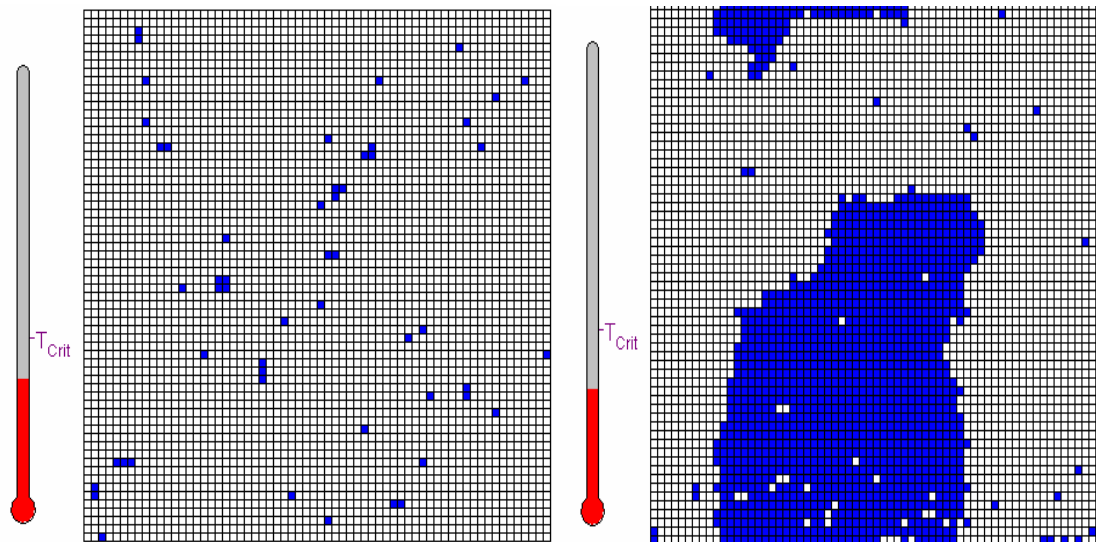
Εικόνα 6: Αντιπεριοδικές συνθήκες μέση ενέργεια–θερμοκρασία–πρώτοι γείτονες-Cold-Start για τιμές του μαγνητικού πεδίο (0, 0.4, 0.8).



Εικόνα 7: Περιοδικές συνθήκες μέση ενέργεια–πρώτοι γείτονες-Hot-Start απουσία μαγνητικού πεδίου.



Εικόνα 8: Περιοδικές συνθήκες μέση ενέργεια–δεύτεροι γείτονες-Hot-Start.



Εικόνα 9: Σχηματισμοί σε θερμοκρασία μικρότερη της κρίσιμης με cold start και hot start.

Στην προσομοίωση με τη χρήση της java κάθε μικρό κουτάκι αντιπροσωπεύει τις δυο καταστάσεις του spin $S_i = -1, 1$ που αντιστοιχούν στα χρώματα λευκό και μπλέ αντίστοιχα. Από την προσομοίωση παρατηρήθηκαν σε γραφικό περιβάλλον τα εξής:

Όταν η θερμοκρασία είναι μεγαλύτερη από τη κρίσιμη θερμοκρασία (η $T_{\text{κρίσιμη}}$ για το δισδιάστατο μοντέλο Ising ισούται με $2/\ln(1 + \sqrt{2}) = 2.269$) τότε οι σχηματισμοί συγκλίνουν σε μια τυχαία μορφή ανεξάρτητα από την συνθήκη έναρξης της προσομοίωσης (cold start ή hot start) και ανεξάρτητα από τη μορφή των συνοριακών συνθηκών. Αυτό είναι συνέπεια του γεγονότος ότι πάνω από τη κρίσιμη θερμοκρασία υπάρχει μόνο μια θερμοδυναμική κατάσταση (με μηδενική μαγνήτιση) και δεν έχει συμβεί αυτόματο σπάσιμο της συμμετρίας. Αν η θερμοκρασία είναι μικρότερη της κρίσιμης τότε διακρίναμε δυο περιπτώσεις:

1. Αν η προσομοίωση ξεκινά από cold start με π.χ. $S_i = 1$, τότε η μεγάλη πλειοψηφία των κουτιών θα είναι μπλέ και μόνο μερικά θα είναι λευκά ενώ το σύστημα θα εμφανίζει μη μηδενική μαγνήτιση. Το γεγονός αυτό επιβεβαιώνει και οπτικά το αυτόματο σπάσιμο της συμμετρίας κάτω από τη κρίσιμη θερμοκρασία και την ύπαρξη δυο «εκφυλισμένων» θεμελιωδών καταστάσεων όπου το σύστημα διαλέγει μια από τις δύο.
2. Αν η προσομοίωση ξεκινήσει με hot start σε θερμοκρασία μικρότερη της κρίσιμης, τότε το σύστημα επιλέγει δύσκολα τη κατάσταση που θα καταλήξει και σχηματίζονται μεγάλα «μπαλώματα» από spins ενώ το που θα καταλήξει το σύστημα είναι τυχαίο γεγονός. Είναι προφανές ότι η οπτικοποίηση του φαινομένου μπορεί να έχει θετική επίδραση στη διδασκαλία του ενώ μπορούν εύκολα οι φοιτητές –και χωρίς τη χρήση της Java- να δημιουργήσουν από τα αποτελέσματα της Fortran κουτάκια με τα χρώματα με απλές ενέργειες στο Excel. Ο χρήστης μπορεί να αλλάζει τη μορφή της αλληλεπίδρασης, τη θερμοκρασία και ακόμα να δημιουργήσει μόνος του τα clusters των spin, γεγονός που μπορεί να βοηθήσει την εκπαιδευτική διαδικασία καθώς ο έλεγχος των παραμέτρων περνά στο επίπεδο του χρήστη. Έτσι η δυνατότητα του υπολογιστικού μοντέλου μπορεί να βοηθήσει το χρήστη να εκφράσει το δικό του νοητικό μοντέλο για το φαινόμενο και να αναγνωρίσει τις αντιλήψεις που έχει για αυτό.

Συμπεράσματα

Δημιουργήσαμε σε κώδικα Fortran την προσομοίωση Monte Carlo για το μοντέλο Ising σε δυο διαστάσεις. Ο σκοπός του άρθρου ήταν να παράγουμε γνωστά αποτελέσματα για το μοντέλο

όταν χρησιμοποιούνται οι συνήθεις περιοδικές συνθήκες που δεν περιέχουν τη κυκλική ομάδα Z και να μελετήσουμε για τη περίπτωση αυτή αν τα αποτελέσματα εξακολουθούν να είναι τα ίδια ή υπάρχουν αποκλίσεις. Με την εισαγωγή των συνοριακών συνθηκών με χρήση των συναρτήσεων Ω τα αποτελέσματα δεν διαφέρουν από αυτά χωρίς τη χρήση των Ω για όλα τα μεγέθη (μαγνήτιση, ενέργεια, μαγνητική επιδεκτικότητα, ειδική θερμότητα). Από το αποτέλεσμα αυτό φαίνεται ότι η διαφορετική τοπολογία δεν επηρεάζει τις τιμές των μεγεθών και δεν προκύπτουν τοπολογικά νέα μεγέθη πέραν αυτών που προέρχονται από συμμετρίες τύπου Noether. Μια σημαντική διαφοροποίηση που αφορά τον υπολογισμό είναι ότι στη περίπτωση των αντιπεριοδικών συνθηκών ο αριθμός των επαναλήψεων πρέπει να είναι μεγάλος όταν χρησιμοποιούμε hot start. Παρατηρήσαμε επίσης ότι καλύτερα αποτελέσματα παράγονται στη προσέγγιση των δεύτερων γειτόνων ενώ τα αποτελέσματά μας είναι πάρα πολύ κοντά στη συμπεριφορά στη κρίσιμη περιοχή. Τέλος η δημιουργία της διεπαφής με Java μπορεί να βοηθήσει τη διδασκαλία εξαιτίας της οπτικοποίησης των σχηματισμών spin.

Παραπομπές

- Coleman, S. (1975). An introduction to spontaneous symmetry breakdown and gauge fields. Laws of Hadronic Matter Ed. A. Zichini. New York, Academic. 138-215.
- Barbour, I. & Psycharis, S. (1990): SU(2) and SU(3) Gauge Theories on a Lattice with Twisted Boundary Conditions. Nuclear Physics B334 (1990). 302-308,
- G. 't-Hooft, Comm. Math. Phys. 81 (1981) 267)
- Greenberger, D. M. (1978). "Esoteric elementary particle phenomena in undergraduate physics -- spontaneous symmetry breaking and scale invariance." American Journal of Physics 46: 394-398.
- Johnson, R. C. (1997). "Floating shells: The breaking and restoration of symmetry." American Journal of Physics 65: 296-300.
- Metropolis, N. & Ulam, S. (1949). The Monte Carlo method, J. Amer. Statistical Assoc, 44, 335
- McCracken, D. D. (1955). The Monte Carlo method. Scientific American, 192, 90-95.