

9. STOHSIM: Korelacijska funkcija za Isingov 2D model

Korelaciju susjednih spinova (skripta, 3.37)

$$C_k(d) = \langle s_{ij} s_{kl} \rangle \quad (9.1)$$

računamo usrednjavanjem umnoška svakog spina s_{ij} rešetke $[i = 1 \dots L] \times [j = 1 \dots L]$ i njegovih horizontalnih i vertikalnih susjeda s_{kl} udaljenih za d , dakle usrednjavanjem veličina po mikrostanjima koje generira MC algoritam. Produkte spinova možemo radi bržeg izvođenja sumirati nakon petlje po blokovima pošto se u jednom koraku mijenja samo nasumično odabrani spin u rešetci.

Pseudokod:

```
// spinovi posloženi u 2D mrezi [1...L] X [1...L]
// Sij = spin u stupcu i (x), redku j (y)
// korelacijska funkcija Ck[d], d = udaljenost spinova
...
Lp = int(L/2); // Polovica mreze
...
for(ib=1; ib<=Nb; ib++){
    for (ik=1; ik<=Nk; ik++){
        ...
        // generiranje spinskih konfiguracija Metropolis algoritmom
        ...
        } // petlja po koracima
        ...
        ...
        // POJEDNOSTAVLJENO: promatramo korelacije samo sa
        // spinovima u istome redku i istome stupcu
        ZA SVAKI Sij
            ZA SVAKI NJEGOV SUSJED k = 1...L
                // korelacije sa spinovima u istome stupcu
                ZA k!=j
                    d = j - k // udaljenost Sij i Sik
                    // ako je blizi ekvivalentni spin iz gornje mreze
                    AKO d > Lp ONDA d = k+L - j
                    // ako je blizi ekvivalentni spin iz donje mreze
                    INACE AKO d < -Lp ONDA d = j - (k-L)
                    d = |d|
                    Ck[d] = Ck[d] + Sij*Sik
                // korelacije sa spinovima u istome redku
                ZA k!=i
                    d = i - k // udaljenost Sij i Skj
                    ANALOGNO PRETHODNOME
            ...
            ...
        } // petlja po blokovima
        NbEff=Nb-NbSkip;
        ...
        ...
        // Pohrana koerlacijske funkcije i normiranje
        ZA SVAKI d=1...(Lp-1)
            ISPIS: d, Ck[d]/(NbEff*L*L*4.);
        ZA d = Lp
            ISPIS: d, Ck[d]/(NbEff*L*L*2.);
        ...
```

Procjena temperature faznog prijelaza T_c :

1. korelacijsku duljinu k odredimo fitanjem funkcije

$$f(x) = A + B * e^{-\frac{x}{k}} \quad (9.2)$$

na dobivene podatke $(d, C_k(d))$

2. simulaciju ponovimo za različite temperature i za svaku odredimo k
3. temperaturu faznog prijelaza T_c procjenjujemo iz

$$k(T) = |T - T_c|^{-n} \quad (9.3)$$