

Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu

Wydział Fizyki

Zakład Fizyki Materiałów Funkcjonalnych



Badanie uporządkowania w obszarze faz mieszanych
oraz weryfikacja nieuniwersalnego zachowania
w trójwymiarowym modelu Ashkina-Tellera

Rozprawa doktorska oparta na oryginalnych publikacjach

Autor:

Zbigniew Wojtkowiak

Promotor:

dr hab. Grzegorz Musiał, prof. UAM

Poznań, 2023

Podziękowania

Pragnę złożyć podziękowania dla Promotora, Pana prof. UAM dr hab. Grzegorza Musiała, za nieocenioną pomoc udzieloną w trakcie całego doktoratu, za udzielanie merytorycznych rad i wskazówek przy opracowywaniu niniejszej pracy.

Jednocześnie składam serdeczne podziękowania wszystkim osobom, które wspierały mnie przez cały okres przygotowania rozprawy doktorskiej: Rodzinie oraz Przyjaciołom, którzy wspierali mnie i niejednokrotnie służyli szczerą pomocą.

Potwierdzenie

Obliczenia numeryczne będące częścią niniejszej rozprawy doktorskiej były przeprowadzone na komputerach Poznańskiego Centrum Superkomputerowo-Sieciowego oraz na klastrach obliczeniowych Wydziału Fizyki Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu.

Spis treści

Podziękowania	3
Potwierdzenie	3
Streszczenie	5
Abstract	8
Wykaz publikacji składających się na rozprawę	11
Inne publikacje	12
1. Wstęp	13
2. Cel pracy	14
3. Model Ashkina-Tellera	17
4. Eksperymenty komputerowe typu Monte Carlo	17
4.1. Algorytm Metropolisa	18
4.2. Algorytm klastrowy	19
4.3. Algorytm klastrowy typu Wolffa	19
4.3.1. Funkcja autokorelacji	21
4.3.2. Wyznaczanie wykładnika krytycznego z	23
5. Kumulanty	24
6. Histogram rozkładu energii	25
7. Opis wyników uzyskanych w poszczególnych pracach rozprawy	27
7.1 Cluster Monte Carlo method for the 3D Ashkin-Teller model [R1]	27
7.2. Wide crossover in the 3D Ashkin-Teller model [R2]	30
7.3. The Monte Carlo Computer Experiment to Study the Order and Phase Transitions in the Mixed Phase Region Based on the Example of the 3D Ashkin-Teller Model [R3]	31
7.4. The behavior of the three-dimensional Ashkin-Teller model at the mixed phase region by a new Monte Carlo approach [R4]	34
8. Podsumowanie	36
Literatura	38
Pełny tekst publikacji składających się na rozprawę	41
Oświadczenia współautora prac	87

Streszczenie

W ramach rozprawy doktorskiej pod kierunkiem mojego promotora rozwinąłem narzędzia do symulacji spinowych układów sieciowych oraz wykonałem badania słabo poznanych, a bardzo interesujących poznawczo i aplikacyjnie rejonów diagramu fazowego trójwymiarowego modelu Ashkina-Tellera (AT), gdzie współistnieją sprzężenia ferro- i antyferromagnetyczne. Jako nietrywialne uogólnienie modelu Isinga, model AT jest jednym z podstawowych w fizyce statystycznej. Hamiltonian modelu AT można wyrazić przy pomocy dwóch niezależnych isingowskich stopni swobody s i σ , znajdujących się na każdym węźle sieci. Są one sprzężone przez oddziaływanie sąsiadujących par $s\sigma$. Dlatego model AT charakteryzuje się ciekawym i złożonym diagramem fazowym, gdyż oprócz średnich temperaturowych $\langle s \rangle$ i $\langle \sigma \rangle$ także iloczyn $\langle s\sigma \rangle$ wykazuje niezależne uporządkowanie. Wszystkie one tworzą trzy niezależne parametry porządku w modelu AT.

Wyniki moich badań są bardzo istotne w kontekście wzrastającego zainteresowania i rosnącej liczby praktycznych zastosowań modelu AT w literaturze. Model ten jest stosowany do opisu wielu zjawisk, np. absorpcji związku selenu na powierzchni niklu, oddziaływań chemicznych w stopach metali, właściwości termodynamicznych miedzianów nadprzewodzących, elastycznej odpowiedzi cząsteczki DNA na siły zewnętrzne i moment obrotowy, sieci neuronowych, czy rozwoju wczesnego Wszechświata. Model AT jest również bardzo istotny z teoretycznego punktu widzenia, ponieważ istnieją pewne odwzorowania pomiędzy tym modelem a innymi modelami fizycznymi.

Jednym z głównych aspektów moich badań jest precyzyjny pomiar ciepła przemiany w rozległych eksperymentach komputerowych, jakimi są nasze autorskie symulacje Monte Carlo (MC) temperaturowych przemian fazowych ze starannym wyznaczaniem niepewności otrzymanych wyników. Do pomiarów ciepła przemiany wykorzystuję kumulanty typu Challi V_L oraz wprowadzone przeze mnie do naszego programu komputerowego kumulanty U_L zaproponowane przez Lee i Kosterlitzę. Są one zmodyfikowane dla modelu AT i zastosowane do każdego parametru porządku oddzielnie. W obszarze krytycznym temperaturowe zależności tych kumulant wykazują charakterystyczne ekstrema, których położenia i rzędne ekstrapoluję do granicy termodynamicznej przy zastosowaniu odpowiednich relacji skalowania. Przeskalowanie do granicy termodynamicznej rzędnych tych ekstremów pozwala mi na wyznaczenie ciepła przemiany fazowej. Punkty przemian fazowych są wstępnie lokalizowane z przecięć zależności kumulant Bindera Q_L od rozmiaru układu L . Wykorzystuję również bardziej efektywny sposób wyznaczania ciepła przemiany na podstawie histogramu rozkładu energii. Podobnie jak w q -stanowym modelu Potts'a z q równoważnymi uporządkowanymi stanami i jednym nieuporządkowanym, również w trójwymiarowym modelu AT przy nieciągłej przemianie fazowej występuje charakterystyczny histogram o dwóch pikach w obszarze krytycznym. Do pomiarów ciepła przemiany wykorzystuję tutaj położenia minimów zależności ujemnego logarytmu prawdopodobieństwa występowania energii E_L w funkcji E dla próbek o skończonych rozmiarach L . Położenia te przeskalowane do granicy termodynamicznej są wartościami energii wewnętrznej po obydwu stronach przemiany fazowej pierwszego rodzaju, których różnica daje wartość ciepła tej przemiany.

W celu walidacji wyników uzyskiwanych przy pomocy algorytmu Metropolisa, skonstruowałem i zastosowałem do trójwymiarowego modelu AT również algorytm bazujący na idei Jula Wolffa polegającej na budowaniu klastrów spinów, które następnie są odwracane.

Motywacją do wdrożenia nowego algorytmu było znane występowanie spowolnienia krytycznego dla algorytmu Metropolis oraz wyniki ostatnich badań literaturowych, które wykazały istnienie stanów metastabilnych w tym modelu. Mogą one istotnie wpływać na wyniki pomiarów, zwłaszcza uzyskiwanych za pomocą algorytmu Metropolis. Ten algorytm typu Wolffa został opisany w pierwszej pracy R1 składającej się na moją rozprawę doktorską, gdzie starannie zostało zbadane jego zachowanie krytyczne. Na uwagę zasługuje fakt, że metoda histogramu rozkładu energii została przeze mnie po raz pierwszy wykorzystana dla algorytmu typu Wolffa zastosowanego do trójwymiarowego modelu AT. W celu weryfikacji poprzednio uzyskanych wyników, a także dla walidacji naszego algorytmu wykazałem, że wyniki obliczeń wzdłuż linii między punktami Isinga i Potts, są zgodne z tymi uzyskanymi za pomocą algorytmu Metropolis. Obydwa te algorytmy dla dostatecznie dużych układów prowadzą do tych samych rezultatów w granicach niepewności. Wykazałem również, że algorytm klastrowy typu Wolffa znacznie zmniejsza problem krytycznego spowolnienia dla trójwymiarowego modelu AT, a dynamiczny wykładnik krytyczny osiąga wartości bliskie zero. Dowiodłem, że najefektywniejszą strategią jest używanie algorytmu klastrowego w regionie krytycznym i Metropolis poza nim. Opracowana przeze mnie klastrowa metoda MC może być stosowana zarówno do badań nieciągłych przemian fazowych, jak i ciągłych w trójwymiarowym modelu AT.

Obydwa te algorytmy zostały przeze mnie wykorzystane w pracach R2, R3 i R4 do dokładnego zbadania najmniej dotąd poznanego obszaru faz mieszanych, w którym tylko jeden rodzaj stopni swobody s lub σ jest uporządkowany, a drugi nie, tak samo jak pary tych stopni swobody $s\sigma$ są nieuporządkowane. Jest to jeden z najtrudniejszych fragmentów diagramu fazowego do analizy, często pomijany przez badaczy ze względu na trudność w interpretacji wyników wykazujących duże oscylacje, które pojawiają się ze względu na współistnienie sprzężeń ferro- i antyferromagnetycznych. Zatem zachowania poszczególnych stopni swobody wykazują w tym obszarze cechy frustracji magnetycznej, zaobserwowanej przez nas po raz pierwszy w naszym eksperymencie komputerowym. Przejścia pomiędzy poszczególnymi stanami układu odbiegają tutaj od uniwersalnego charakteru przedstawianego dotychczas w literaturze. Wyniki naszych eksperymentów MC dla przemian pomiędzy fazami paramagnetyczną a obszarem faz mieszanych i fazą Baxtera (gdzie wszystkie trzy parametry porządku wykazują uporządkowanie ferromagnetyczne) dla ujemnego sprzężenia pomiędzy sąsiednimi parami stopni swobody pozwoliły mi zweryfikować przewidywania teorii pola średniego dla tego najbardziej złożonego i najmniej rozpoznanego regionu oraz przedstawić jego diagram fazowy. Wyniki moich badań w pracy R2 wykazały istnienie szerokiego efektu typu crossover, który obejmuje całą linię pomiędzy punktami trójkrytycznymi A i H, gdzie wcześniejsze prace literaturowe wskazywały na ciągłe przemiany fazowe z możliwością nieuniwersalnego zachowania także trójwymiarowego modelu AT przy wartościach wykładników krytycznych zmieniających się w sposób ciągły. Wykazałem rzadko spotykaną koegzystencję ciągłych i nieciągłych przemian fazowych wzdłuż tej samej granicy faz dla różnych parametrów porządku.

W kolejnych pracach R3 i R4 mojej rozprawy zaproponowałem nowe podejście do wykonywania symulacji MC, które eliminuje wspomniane wcześniej duże oscylacje wartości wielkości termodynamicznych obliczanych tradycyjną metodą MC dla obszaru faz mieszanych, gdzie wyniki teorii pola średniego przewidują, że z równymi prawdopodobieństwami występują dwa różne sposoby uporządkowania dwóch rodzajów stopni

swobody. Wynik ten potwierdzały nasze eksperymenty komputerowe, w których obserwowaliśmy duże oscylacje wartości obliczanych wielkości termodynamicznych. Obecność tych oscylacji sprawiała, że ich interpretacja była bardzo problematyczna. Ideę mojego nowego podejścia przedstawiliśmy na przykładzie przemian z fazy paramagnetycznej do obszaru faz mieszanych w trójwymiarowym modelu AT w pracy R3. Zaproponowane przeze mnie nowe podejście do eksperymentu komputerowego MC pozwoliło mi na zlokalizowanie przemian fazowych na tyle dokładnie, aby móc wykorzystać metodę histogramu rozkładu energii. Nowe podejście zostało zademonstrowane poprzez wyznaczenie w pracach R3 i R4 gładkich krzywych namagnesowania i energii wewnętrznej, a w konsekwencji poprzez określenie miejsc i charakteru przemian fazowych wzdłuż linii pomiędzy obszarem faz mieszanych a fazą paramagnetyczną, obszarem faz mieszanych a fazą antyferromagnetyczną, a także pomiędzy fazą paramagnetyczną i antyferromagnetyczną.

To nowe podejście pozwoliło mi na zbadanie w pracy R4 tego słabo dotąd poznanego obszaru na diagramie fazowym trójwymiarowego modelu AT. Jednoznacznie wykazałem istnienie dwóch punktów trójkrytycznych K i K' oraz punktu bifurkacji K_b , a także ustaliłem ich lokalizację. Interesującym wynikiem było udowodnienie, że chociaż system jako całość nie wykazuje obecności ciepła ukrytego na granicy obszaru fazy mieszanej i fazy antyferromagnetycznej, to ciepło to występuje dla różnych parametrów porządku. W szczególności wzrostowi energii wewnętrznej dla stopni swobody jednego rodzaju towarzyszy równy co do wartości spadek energii wewnętrznej stopni swobody innego rodzaju.

Abstract

In my thesis, under the supervision of prof. Grzegorz Musiał, I developed tools for the simulation of spin lattice systems and performed research on poorly understood, but cognitively and applicationally very interesting regions of the phase diagram of the three-dimensional Ashkin-Teller (3D AT) model, where ferro- and antiferromagnetic couplings coexist. As a non-trivial generalization of the Ising model, the AT model is one of the fundamental ones in statistical physics. The Hamiltonian of the AT model can be expressed in terms of two independent Ising degrees of freedom s and σ , located at each site of the lattice. They are coupled by the interaction of adjacent $s\sigma$ pairs. Therefore, the AT model is characterized by an interesting and complex phase diagram, because in addition to the thermal averages $\langle s \rangle$ and $\langle \sigma \rangle$, the product $\langle s\sigma \rangle$ also shows an independent order. They all form three independent order parameters in the AT model.

The results of my research are very important in the context of the increasing interest and the growing number of practical applications of the AT model in the bibliography. This model is used to describe many phenomena, such as the absorption of a selenium compound on the surface of nickel, chemical interactions in metal alloys, thermodynamic properties of superconducting cuprates, elastic response of the DNA molecule to external forces and torque, neural networks, or the development of the early Universe. The AT model is also very important from a theoretical point of view as there are some mappings between this model and other physical models.

One of the main aspects of my research is precise computing of the latent heat in extensive computer experiments, which are our proprietary Monte Carlo (MC) simulations of temperature-driven phase transitions with careful determination of the error bars of the obtained results. For computing of the latent heat, I use the Challa-like V_L cumulants and the U_L cumulants proposed by Lee and Kosterlitz introduced by me to our computer program. They are modified for the AT model and applied to each order parameter separately. In the critical region, the temperature dependencies of these cumulants show characteristic extremes whose positions and ordinates are extrapolated to the thermodynamic limit using appropriate scaling relations. Scaling the ordinates of these extremes to the thermodynamic limit allows me to determine the latent heat. Phase transition points are initially located from intersections of Binder Q_L cumulant dependences on the system size L . I also use a more efficient way of determining the latent heat based on the energy distribution histogram. As in the q -state Potts model with q equivalent ordered states and one disordered one, also in the 3D AT model with a discontinuous phase transition there is a characteristic histogram with two peaks in the critical region. To compute the latent heat, I use here positions of the minima of the negative logarithm of the probability of the occurrence of the energy E_L as a function of E for samples of finite size L . These positions, scaled to the thermodynamic limit, are the values of the internal energy on both sides of the first-order phase transition, the difference of which gives the value of the latent heat.

In order to validate the results obtained using the Metropolis algorithm, I also constructed and applied to the 3D AT model an algorithm based on Jul Wolff's idea of building clusters of spins, which are then reversed. The motivation to implement the new algorithm was

the known occurrence of a critical slowing down for the Metropolis algorithm and the results of recent bibliography studies that showed the existence of metastable states in this model. They can significantly affect the computed results, especially those obtained using the Metropolis algorithm. This Wolff-type algorithm was described in the first paper R1 of my thesis, where its critical behavior was carefully studied. It is noteworthy that the energy distribution histogram method was used by me for the first time for a Wolff-type algorithm applied to a 3D AT model. In order to verify the previously obtained results, as well as to validate our algorithm, I showed that the results of calculations along the line between the Ising and Potts points are consistent with those obtained using the Metropolis algorithm. Both of these algorithms for sufficiently large systems lead to the same results within the error bars. I also showed that the Wolff-type cluster algorithm significantly reduces the problem of critical slowing down for the 3D AT model, and the dynamic critical exponent reaches values close to zero. I proved that the most effective strategy is to use the cluster algorithm in the critical region and Metropolis one beyond it. The cluster MC method developed by me can be used both for discontinuous and continuous phase transitions in a 3D AT model.

Both of these algorithms were used by me in the papers R2, R3 and R4 of my thesis to thoroughly investigate the least known mixed phase region, in which only one type of degrees of freedom s or σ is ordered and the other is not, as well as pairs of these degrees of freedom $s\sigma$ are disordered. This is one of the most difficult parts of the phase diagram to analyze, often overlooked by researchers due to the difficulty in interpretation of results showing large oscillations that occur due to the coexistence of ferro- and antiferromagnetic couplings. Thus, the behavior of individual degrees of freedom in this region shows features of magnetic frustration, observed by us for the first time in our computer experiment. The transitions between the individual states of the system differ here from the universal character presented so far in the bibliography. The results of our MC experiments for transitions between the paramagnetic phase and the mixed phase region as well as the Baxter phase (where all three order parameters show ferromagnetic order) for the negative coupling between adjacent pairs of degrees of freedom allowed me to positively verify the predictions of the mean field theory for this most complex and least explored region and to show its phase diagram. The results of my research in the paper R2 showed the existence of a wide crossover effect, which covers the entire line between the tricritical points A and H, where previous papers indicated continuous phase transitions with the possibility of non-universal behavior of the 3D AT model with continuously varying critical exponents. I demonstrated a rare coexistence of continuous and discontinuous phase transitions along the same phase boundary for different order parameters.

In subsequent papers R3 and R4 of my thesis, I proposed a new approach to perform MC simulations, which eliminates the previously mentioned large oscillations of the values of thermodynamic quantities computed using the traditional MC method for the mixed phase region, where the results of the mean field theory predict that there are two different ways of ordering with equal probabilities of two types of degrees of freedom. This result was confirmed by our computer experiments, in which we observed large oscillations of the values of the calculated thermodynamic quantities. The presence of these oscillations made their interpretation very problematic. The idea of my new approach was presented on the example of transitions from the paramagnetic phase to the mixed phase region in the 3D AT model in the paper R3. The new approach to the MC experiment I proposed allowed me to locate the

phase transitions precisely enough to be able to use the energy distribution histogram method. The new approach was demonstrated by determining smooth curves of magnetization and internal energy in papers R3 and R4, and consequently by determining the locations and character of phase transitions along the lines between the mixed phase region and the paramagnetic phase, the mixed phase region and the antiferromagnetic phase, and also between the paramagnetic phase and the antiferromagnetic one.

This new approach allowed me to investigate in the paper R4 this poorly understood region in the phase diagram of the 3D AT model. I clearly demonstrated the existence of two tricritical points K and K' and the bifurcation point K_b , and determined their locations. An interesting result was proving that although the system as a whole does not show the presence of the latent heat on the boundary between the mixed phase region and the antiferromagnetic phase, this heat occurs for various order parameters. In particular, an increase in the internal energy of degrees of freedom of one kind is accompanied by an equal decrease in the internal energy of degrees of freedom of another kind.

Wykaz publikacji składających się na rozprawę

R1. **Zbigniew Wojtkowiak**, Grzegorz Musiał

Cluster Monte Carlo method for the 3D Ashkin–Teller model

Journal of Magnetism and Magnetic Materials **500**, 166365 (2020);

DOI: doi.org/10.1016/j.jmmm.2019.166365

Punkty ministerialne: 100; IF5-year(2020): 2,989; IF2020: 2,993

R2. **Zbigniew Wojtkowiak**, Grzegorz Musiał

Wide crossover in the 3D Ashkin–Teller model

Physica A: Statistical Mechanics and its Applications **513**, 104 (2019);

DOI: doi.org/10.1016/j.physa.2018.08.166

Punkty ministerialne: 70; IF5-year(2020): 3,544; IF2020: 3,263

R3. **Zbigniew Wojtkowiak**, Grzegorz Musiał

The Monte Carlo Computer Experiment to Study the Order and Phase Transitions in the Mixed Phase Region Based on the Example of the 3D Ashkin-Teller Model

Computational Methods in Science and Technology **7(3)**, 129 (2021);

DOI:doi.org/10.12921/cmst.2021.0000019

Punkty ministerialne: 20; IF5-year(2020): -; IF2020: -

R4. **Zbigniew Wojtkowiak**, Grzegorz Musiał

Experiment The Behavior of the Three-Dimensional Askin–Teller Model at the Mixed Phase Region by a New Monte Carlo Approach

Journal of Statistical Physics **189**, 3 (2022);

DOI:doi.org/10.1007/s10955-022-02964-w

Punkty ministerialne: 100; IF5-year(2020): 2,431; IF2020: 1,548

Inne publikacje

1. Dorota Jeziorek-Knioła, Grzegorz Musiał, **Zbigniew Wojtkowiak**
Arbitrarily Weak First Order Phase Transitions in the 3D Standard Ashkin-Teller Model by MC Computer Experiments
Acta Physica Polonica A **127**, 327 (2015); DOI: 10.12693/APhysPolA.127.327
Punkty ministerialne: 70; IF5-year(2021): 0,696; IF2021: 0,577
2. Dorota Jeziorek-Knioła, **Zbigniew Wojtkowiak**, Grzegorz Musiał
Computation of Latent Heat based on the Energy Distribution Histogram in the 3D Ashkin-Teller Model
Acta Physica Polonica A **133 (3)**, 435 (2018); DOI: 10.12693/APhysPolA.133.435
Punkty ministerialne: 70; IF5-year(2021): 0,696; IF2021: 0,577
3. Dorota Jeziorek-Knioła, **Zbigniew Wojtkowiak**, Grzegorz Musiał
Computation of latent heat in the system of multi-component order parameter: 3D Ashkin-Teller model
Computational Methods in Science and Technology **5(1)**, 31 (2019);
DOI:10.12921/cmst.2018.0000053
Punkty ministerialne: 20; IF5-year(2020): -; IF2020: -
4. Grzegorz Musiał, Dorota Jeziorek-Knioła, **Zbigniew Wojtkowiak**
Monte Carlo examination of first-order phase transitions in a system with many independent order parameters: Three-dimensional Ashkin-Teller model
Physical Review E **103**, 062124 (2021); DOI:
<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.103.062124>
Punkty ministerialne: 140; IF5-year(2020): 2,414; IF2020: 2,529

1. Wstęp

Badania przedstawiane w ramach mojej rozprawy doktorskiej są bardzo istotne w kontekście wzrastającego zainteresowania i liczby praktycznych zastosowań modelu Ashkina-Tellera (AT) w literaturze [1-10]. Model ten jest stosowany do opisu wielu zjawisk szerzej cytowanych w pracach składających się na tę rozprawę [R1-R4], m. in. absorpcji związków selenu na powierzchni niklu, oddziaływań chemicznych w stopach metali, właściwości termodynamicznych miedzianów nadprzewodzących, elastycznej odpowiedzi cząsteczki DNA na siły zewnętrzne i moment obrotowy, sieci neuronowych, rozwoju wczesnego Wszechświata, właściwości magnetycznych nanorurek. Model ten jest również bardzo istotny z punktu teoretycznego ponieważ istnieją pewne odwzorowania pomiędzy modelem AT a innymi modelami fizycznymi.

W mojej rozprawie wykorzystałem analizy skalowania skończenie rozmiarowego wartości trzech różnych kumulant oraz prawdopodobieństwa występowania energii wewnętrznej do dokładniejszego zbadania trójwymiarowej wersji standardowego, symetrycznego modelu AT, który jest jednym z podstawowych modeli fizyki statystycznej, będącym nietrywialnym uogólnieniem modelu Isinga [11]. Dokładniejszy opis modelu znajduje się w kolejnych rozdziałach.

Rozwinąłem zostały nowe narzędzia do symulacji spinowych układów sieciowych oraz wykonałem badania słabo poznanych, a bardzo interesujących rejonów diagramu fazowego trójwymiarowego modelu AT. Zaproponowałem oraz dokładnie zweryfikowałem nowe podejście do badania obszaru faz mieszanych w trójwymiarowym modelu AT, które eliminuje oscylacje wielkości termodynamicznych obliczonych tradycyjną metodą.

Jednym z głównych aspektów badań był pomiar ciepła przemiany w rozległych eksperymentach komputerowych, jakimi są autorskie symulacje Monte Carlo (MC) temperaturowych przemian fazowych z wyznaczeniem niepewności otrzymanych wyników. W celu walidacji wyników uzyskiwanych do tej pory przy pomocy algorytmu Metropolisa [12-21], w ramach doktoratu opracowany został przeze mnie nowy algorytm klastrowy [R1] bazujący na idei Ulli Wolffa [22] polegający na budowaniu klastrow spinów, które są obracane. Oba sposoby dla dostatecznie dużych układów doprowadziły nas do tych samych rezultatów. Powodem dla którego został również użyty algorytm klastrowy było występowanie obszarów metastabilnych na granicy obszaru faz mieszanych. Oba algorytmy zostały wykorzystane do dokładnego zbadania obszaru faz mieszanych trójwymiarowego modelu AT, w którym tylko jeden rodzaj spinów jest uporządkowany [R2-R4]. Zachowania poszczególnych spinów wykazują w tym obszarze cechy frustracji magnetycznej, zaobserwowane przez nas po raz pierwszy w eksperymencie komputerowym tego modelu. Przejścia pomiędzy poszczególnymi stanami układu odbiegają od uniwersalnego charakteru przedstawionego dotychczas w literaturze. Do pomiarów ciepła przemiany wykorzystałem kumulanty Bindera Q_L , typu Challi V_L oraz typu zaproponowanej przez Lee i Kosterlitzę U_L , zmodyfikowane i zastosowane do modelu AT dla każdego parametru porządku oddzielnie [21]. Podobnie jak w q -stanowym modelu Potts'a z q równoważnymi uporządkowanymi stanami i jednym nieuporządkowanym, również w trójwymiarowym modelu AT występuje charakterystyczny histogram o dwóch

pikach w obszarze krytycznym [20]. Do pomiarów ciepła przemiany wykorzystałem położenia minimów zależności ujemnego logarytmu prawdopodobieństwa występowania energii E w funkcji rozmiaru układu L dla próbek o skończonych rozmiarach.

W pracach R1 i R2 używamy określenia "trzy składowe parametry porządku" natomiast w późniejszych pracach R3 i R4 "trzy parametry porządku". Gdy weźmiemy pod uwagę układ jako całość, to albo wykazuje on uporządkowanie, albo nie, i wychodząc z tego punktu widzenia, wcześniej definiowaliśmy różne elementy porządku w układzie jako niezależne składowe. Zmiana nazewnictwa wynikała z pogłębionej dyskusji nad stosowanym dotychczas pierwszym sformułowaniem przeprowadzonej na etapie recenzji pracy [22]. Określenie "trzy parametry porządku" stosowane w pracach R3 i R4 uważam za adekwatne, gdyż formalnie w modelu AT istnieją trzy zachowujące się niezależnie parametry porządku $\langle s \rangle$, $\langle \sigma \rangle$ oraz $\langle s\sigma \rangle$, a nie jeden parametr o wielu składowych. Hamiltonian modelu AT ma dwie symetrie globalne Z_2 odpowiadające niezmienniczości w ramach dwóch przekształceń $\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$ i $s_i \sigma_i \rightarrow -s_i \sigma_i$ oraz oczywiście w rozważanym tutaj symetrycznym modelu AT symetrię $s_i \rightarrow \sigma_i$. Dlatego można zdefiniować trzy (skalarne) niezależne parametry porządku $\langle s \rangle$, $\langle \sigma \rangle$ i $\langle s\sigma \rangle$. Wzdłuż linii AP występują te trzy symetrie i są jednocześnie spontanicznie łamane. Jednak na granicy obszaru faz mieszanych wszystkie trzy symetrie są łamane przy różnych wartościach oddziaływania dwu-spinowego K_2 , gdy ustalimy wartość oddziaływania cztero-spinowego K_4 , co obserwujemy w lewym górnym rogu rysunku 1 poniżej. Natomiast w prawym dolnym rogu tego rysunku widzimy jednoczesne łamanie symetrii dwóch parametrów porządku oraz w innym miejscu łamanie symetrii trzeciego parametru porządku. Dlatego stwierdzamy, że są one rzeczywiście niezależne i nie są różnymi składowymi tego samego parametru porządku, na co wskazali już Ruth Ditzian i in. [23]. Podsumowując, $\langle s \rangle$, $\langle \sigma \rangle$ i $\langle s\sigma \rangle$ należy uznać za trzy niezależne parametry porządku.

Na opis rozprawy doktorskiej składa się 8 rozdziałów. Zawierają one opis problematyki badawczej, opis prowadzonych eksperymentów oraz stosowaną metodologię. Opis zawiera również główne wnioski płynące z wyników poszczególnych czterech prac składających się na niniejszą rozprawę.

2. Cel pracy

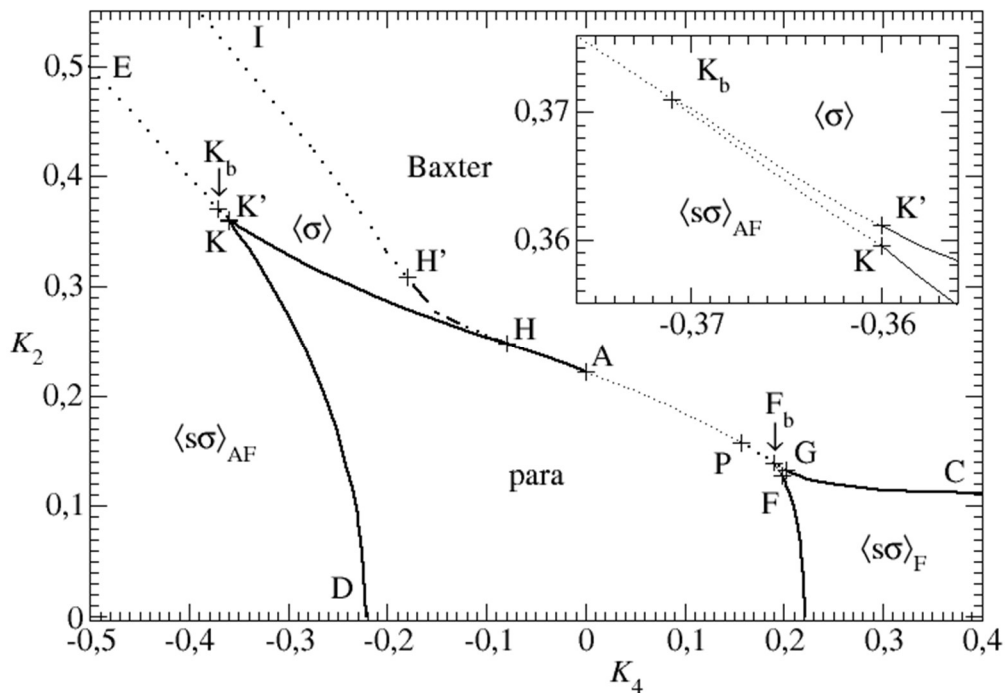
Głównym celem badań naukowych prowadzonych w ramach niniejszej rozprawy doktorskiej było dokładne zbadanie obszaru faz mieszanych występującego w standardowym trójwymiarowym modelu AT (obszar $\langle \sigma \rangle$ na rys. 1 poniżej) [11,24].

Obszar faz mieszanych występuje tylko w symetrycznym modelu AT w trzech wymiarach. Obszar ten ze względu na trudność interpretacji wyników jest często pomijany w literaturze przedmiotu. Jest to najbardziej złożony i najmniej rozpoznany region na diagramu fazowego [15,16,24]. W celu jego dokładnego zbadania w naszym zespole wypracowane zostały precyzyjne narzędzia, dzięki którym możliwa jest szczegółowa analiza tego obszaru [12-21]. Problem ten jest ważny naukowo, gdyż jest to jeden z podstawowych modeli fizyki statystycznej [25], będący nietrywialnym uogólnieniem modelu Isinga. Zainteresowanie tym modelem znacznie wzrosło zwłaszcza od 1972 roku, gdy Fan wykazał [25], że hamiltonian

modelu AT można wyrazić przy pomocy dwóch niezależnych isingowskich stopni swobody s i σ , rezydujących na każdym węźle sieci.

$$-\frac{H}{k_B T} = \sum_{[i,j]} \{K_2(s_i s_j + \sigma_i \sigma_j) + K_4(s_i s_j \sigma_i \sigma_j)\} \quad (1)$$

Ten model jest bardzo atrakcyjny z uwagi na bogaty diagram fazowy [11-21,23,24], z trzema niezależnymi parametrami porządku $\langle s \rangle$, $\langle \sigma \rangle$ oraz $\langle s\sigma \rangle$ (gdzie symbol $\langle \dots \rangle$ oznacza średnią temperaturową). Unikalna w tym modelu jest też linia dowolnie słabych przemian fazowych, jak też słabo dotąd zbadana linia ciągłych przemian fazowych AH na poniższym rysunku 1 wykazujących cechy zachowania nieuniwersalnego [20,26].



Rys. 1 Diagram fazowy modelu AT – dotychczasowy stan wiedzy. Przerywane linie oznaczają nieciągłe przemiany fazowe, ciągłe – przemiany ciągłe, kropko-kreskowa – linia przemian ciągłych dla parametru porządku $\langle s\sigma \rangle$ oraz nieciągłych dla $\langle s \rangle$ i $\langle \sigma \rangle$. W fazie „Baxter” każdy parametr $\langle s \rangle$, $\langle \sigma \rangle$, $\langle s\sigma \rangle$ jest uporządkowany ferromagnetycznie, a w fazie „para” wszystkie parametry porządku $\langle s \rangle$, $\langle \sigma \rangle$, $\langle s\sigma \rangle$ są równe 0. W fazach „ $\langle s\sigma \rangle_F$ ” i „ $\langle s\sigma \rangle_{AF}$ ” $\langle s \rangle = \langle \sigma \rangle = 0$, tylko parametr $\langle s\sigma \rangle$ jest uporządkowany odpowiednio ferro- i antyferromagnetycznie. Natomiast w obszarze faz mieszanych „ $\langle s \rangle$ ” $\langle \sigma \rangle = 0$ i tylko jeden parametr $\langle s \rangle$ lub $\langle \sigma \rangle$ jest uporządkowany ferromagnetycznie, a drugi nie. Nazwane punkty diagramu są oznaczone znakami „+”, A, F, G, H, H', K, K' są punktami trójkrytycznymi.

Zachowanie nieuniwersalne wykazuje również dwuwymiarowa wersja tego modelu [9,24,26-29]. Celem pracy było również zweryfikowanie występowania nieuniwersalnego zachowania wartości wykładników krytycznych wzdłuż linii AH, na co wskazują wcześniejsze prace [14,15,23], do czego wykorzystuję wszystkie przygotowane narzędzia i skalowania skończenie rozmiarowe [20,21] dla znacznie większych rozmiarów układu niż użytych we wcześniejszych pracach. Precyzyjne analizy moich badań zostały przedstawione w pracy R2, która stanowi element mojej rozprawy doktorskiej. Podobnie precyzyjnych badań wymagało

zbadanie zachowania układu wzdłuż linii HK' w pracy R2 oraz określenie charakteru przemian fazowych wzdłuż linii pomiędzy obszarem faz mieszanych i fazy paramagnetycznej przedstawione w pracy R3. W tym celu w pracach R3 i R4 zaproponowałem oraz wdrożyłem nowe podejście do badania układów z obszarem faz mieszanych.

Kolejnym celem dysertacji było wyznaczenie punktu bifurkacji K_b oraz weryfikacja położenia punktów trójkrytycznych K i K' [14,R4]. Analizy wymagały również obliczenia wartości ciepła przemiany wzdłuż linii EK_b oraz jej dokładniejszego położenia. We wcześniejszej literaturze dotyczącej tak podstawowego modelu brakowało jednoznacznych konkluzji na ten temat. Wyniki dotyczące tych zagadnień zostały przedstawione przeze mnie w pracy R4.

Przy trudnościach, które pojawiają się przy analizie tych problemów [12,15], kluczowe znaczenie ma staranna weryfikacja obecności ciepła przemiany. Wymaga to obliczeń o dużej dokładności, gdyż wzdłuż tej samej linii H'I różne parametry porządku wykazują różnicę tego ciepła o 3 rzędy wielkości [12]. W 2018 roku ukazała się praca zespołu F. C. Sá Barreto [29], bazująca na metodzie pola średniego i wykazująca istnienie wzdłuż tej linii nowej fazy, w której parametry $\langle s \rangle$ i $\langle \sigma \rangle$ są uporządkowane, ale posiadają różne wartości wbrew symetrii Hamiltonianu (1), co planujemy jeszcze zbadać, oraz występowanie w tym obszarze obszarów metastabilnych. Model AT wzdłuż linii H'I wykazuje cechy frustracji dla parametrów porządku $\langle s \rangle$ i $\langle \sigma \rangle$, a analiza namagnesowania sugeruje potwierdzenie przypuszczenie Ditzian i in. [23], że mamy tutaj efekt skończenie rozmiarowy, który znika w granicy termodynamicznej. Ciekawym efektem jest koegzystencja przejść fazowych pierwszego i drugiego rzędu dla różnych parametrów porządku wzdłuż linii HH' [R2].

Innym celem mojej dysertacji, ale również ważnym ze względu na występowanie wspomnianych w poprzednim akapicie obszarów metastabilnych w tym układzie [29], jest weryfikacja wyników, które były do tej pory uzyskiwane tylko z wykorzystaniem algorytmu Metropolisa. Jednak algorytmu klastrowego dla trójwymiarowego modelu AT nie było do tej pory w literaturze przedmiotu. Dlatego pod kierunkiem mojego promotora podjąłem żmudny proces utworzenia tego algorytmu, co zwykle wykonywane jest przez cały zespół. Dokonałem starannego jego przetestowania i walidacji uzyskiwanych wyników. W tym celu wyznaczyłem wartość wykładnika krytycznego ν dla obydwu algorytmów w tym modelu oraz obliczyłem spowolnienie krytyczne. Dokładny opis algorytmu został przedstawiony w pracy R1 oraz w podrozdziale 4.2.

Nasz zespół zbadał również, jak zanika ciepło przemiany wzdłuż linii nieciągłych przemian fazowych pomiędzy fazą Baxtera a fazą paramagnetyczną w pobliżu punktu isingowskiego A na rysunku 1 przy $K_4 > 0$ [19,21]. Obszar ten jest wykorzystywany w literaturze do modelowania dowolnie słabych przemian fazowych w wielu działach fizyki [19, 30]. Wypracowane narzędzia posłużyły naszemu zespołowi do precyzyjnej analizy wartości ciepła ukrytego wzdłuż całej linii APF_b dla poszczególnych parametrów porządku oraz do zbadania znaczenia punktu P w trójwymiarowym modelu AT [21]. Dla potrzeb badań w mojej rozprawie obliczenia te posłużyły do dodatkowej walidacji wyników algorytmu klastrowego opracowanego przeze mnie w pracy R1. Problemy te są ważne, aktualne i nie zostały dotychczas rozwiązane w literaturze przedmiotu.

3. Model Ashkina-Tellera

Model AT jest jednym z ważnych punktów odniesienia w fizyce statystycznej od kilkudziesięciu lat, gdyż jest on nietrywialnym uogólnieniem modelu Isinga, z trzema parametrami porządku wykazującymi niezależne uporządkowanie, dając w efekcie bardzo bogaty diagram fazowy pokazany na rysunku 1. Każdego roku ukazuje się kilkanaście prac związanych z tym modelem [1-11]. Posiada on szerokie zastosowanie praktyczne, jest stosowany do opisu wielu zjawisk, np. absorpcji związku selenu na powierzchni niklu, oddziaływań chemicznych w stopach metali, właściwości termodynamicznych nadprzewodników miedziowych, elastycznej odpowiedzi cząsteczki DNA na siły zewnętrzne i moment obrotowy, sieci neuronowych oraz rozwoju wczesnego wszechświata (zob. np. [1,9,10] i prace tam cytowane). Znajduje on również zastosowanie poza fizyką, np. do badania procesu formowania się opinii w sieciach społecznościowych z efektem współzależności między różnymi wspólnotami społecznymi [31]. Model ten jest również bardzo istotny z teoretycznego punktu widzenia, ponieważ istnieją pewne odwzorowania pomiędzy modelem AT, a innymi modelami fizycznymi [32].

Trójwymiarowa wersja modelu AT z powodu trudności obliczeniowych doczekała się dokładniejszych badań dopiero w ostatnich latach, a podsumowanie wyników wcześniejszych prac znajduje się w pracach [14-20]. Diagram fazowy został wcześniej przedstawiony, ale zwłaszcza w obszarze faz mieszanych będącym przedmiotem mojej rozprawy doktorskiej, dane są niepewne i mają jedynie wstępny charakter. Wobec pojawienia się w tym obszarze parametrów bardzo słabych przemian fazowych pierwszego rodzaju, zaproponowana w naszym zespole precyzyjna weryfikacja obecności ciepła przemiany ma kluczowe znaczenie wobec postawionego frapującego pytania [15], czy układ ten wykazuje zachowanie nieuniwersalne wzdłuż wyżej wspomnianych linii rozgraniczających obszary faz mieszanych, Baxtera i fazy paramagnetycznej, kończąc na punkcie isingowskim A.

4. Eksperymenty komputerowe typu Monte Carlo

Dla wykonania badań przedmiotowych rejonów diagramu fazowego modelu AT w ramach rozprawy doktorskiej wykonywałem eksperymenty komputerowe typu MC, wykorzystujące początkowo algorytm Metropolis, później również skonstruowany przeze mnie algorytm klastrowy typu Wolffa [R1]. Specyfika badań przemian fazowych przy pomocy tych eksperymentów komputerowych polega na konieczności wykonania setek, a często nawet tysięcy przebiegów programów o czasie wykonania jednego przebiegu wahającym się od kilku godzin do wielu dni, a nawet tygodni. Żeby badania wykonać w rozsądnie krótkim czasie, dla dłuższych przebiegów wykorzystuję systemy komputerowe o dużej przepustowości, jak komputery dużej mocy (HPC) w Poznańskim Centrum Superkomputerowo-Sieciowym oraz klastry obliczeniowe na wydziale Fizyki Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu. Dla naszego układu obliczam wartości zmiennych termodynamicznych. Najpierw dla każdego stopnia swobody s , σ oraz ich iloczynu $s\sigma$, program oblicza wartości zmiennych termodynamicznych, przede wszystkim średnie namagnesowanie oraz średnią energię wewnętrzną. Na początku program doprowadza układ do stanu równowagi termodynamicznej

używając odpowiedniej ilości kroków MC. W eksperymencie komputerowym typu MC, w przeciwieństwie do prostych symulacji MC, nie tylko oblicza się wartości wielkości termodynamicznych, ale także ich niepewności. Eksperymenty komputerowe odgrywają wciąż rosnącą rolę w modelowaniu dowolnego rodzaju. Jeden przebieg programu składa się z obliczenia od 6 do 20 średnich cząstkowych, z których każda jest obliczana na podstawie około 10^7 kroków MC, ale tylko co k -ty krok daje wkład do obliczenia wielkości fizycznych ($6 < k < 20$), aby uniknąć korelacji między losowanymi konfiguracjami układu. W ten sposób uzyskuję także miarę rozrzutu statystycznego wyników (zob. np. [28]). Problem korelacji pomiędzy stanami układu jest radykalnie mniejszy w przypadku algorytmu klastrowego.

W eksperymentach komputerowych typu MC używam układów o skończonych rozmiarach, ograniczonych przez możliwości przetwarzania dostępnych komputerów, natomiast prawdziwy obraz przemiany fazowej uzyskuję dopiero w granicy termodynamicznej. Dla uzyskania wiarygodnych ekstrapolacji wyników do granicy termodynamicznej, wykonuję obliczenia z układami o możliwie największych rozmiarach, przy których uzyskanie wyników w jednym przebiegu programu wymaga obliczeń trwających wiele tygodni, czy miesięcy przy stosowaniu zwykłego przetwarzania sekwencyjnego. Dla takich sytuacji stosuję przetwarzane równoległe z wykorzystaniem biblioteki MPI [17]. Każdy ze współbieżnie wykonujących się procesów oblicza kilka średnich cząstkowych wymienionych w poprzednim akapicie. Ten sposób zrównoleglenia przetwarzania przejawia niemal perfekcyjne przyspieszenie i maksymalną wydajność w jednorodnym HPC [17], ponieważ komunikacja pomiędzy równoległymi procesami odbywa się tylko kilka razy: początkowe przesłanie danych przez proces główny i wysyłanie średnich cząstkowych z równoległych procesów do głównego. W literaturze istnieją inne metody zrównoleglenia dla algorytmów klastrowych dla modeli typu Isinga [33,34] polegające na wykonywaniu obliczeń równoległe dla nowo dodanych spinów w rosnącym klastrze przeprowadzanych na GPU. W rezultacie szybkość obliczeniowa GPU dla dwuwymiarowego modelu Isinga w temperaturze krytycznej jest większa w stosunku do prędkości obliczeniowej na bieżącym rdzeniu procesora. Jednak przeprowadzanie zrównoległonych obliczeń współbieżnie dla nowo dodanych spinów nie będzie optymalne [35], w przeciwieństwie do wykorzystywanego przeze mnie zrównoleglenia obliczeń poszczególnych średnich cząstkowych [17]. W celu uzyskiwania precyzyjnych wyników zastosowałem nowy 64-bitowy generator liczb pseudolosowych oraz dodałem parametr umożliwiający zainicjowanie tego generatora na bazie aktualnego czasu i numeru równoległego procesu. Był to niezbędny element do zrównoleglenia przetwarzania w programie, aby wyniki ze współbieżnie wykonywanych procesów były statystycznie niezależne. Dodatkowo do przetwarzania tak dużej ilości moich wyników przygotowałem skrypty w języku powłoki bash, co istotnie przyspieszyło analizy tych wyników.

4.1. Algorytm Metropolis

W algorytmie Metropolis jeden krok MC (MCS) jest zakończony, gdy każdy z węzłów sieci zostanie odwiedzony raz (wybierany systematycznie lub losowo). Stosunek wag statystycznych przy zmianie energii oddziaływania par spinów w trójwymiarowym modelu AT jest równy $e^{-2(K_2+K_4)}$, przy odwróceniu pojedynczego spinu s lub σ . Jak zaznaczyłem na początku tego rozdziału, w pierwszym kroku programu doprowadzam układ do stanu równowagi termodynamicznej poprzez wykonanie odpowiedniej ilości MCS, rzędu 10^7 , przy

czym przy zrównoległym przetwarzaniu doprowadzenie układu do stanu równowagi odbywa się w każdym współbieżnie wykonującym się procesie. Następnie obliczane są objaśnione na początku tego rozdziału średnie cząstkowe składające się z $0,8 \cdot 10^7$ MCS dla najmniejszych wartości rozmiarów układu L do $3,7 \times 10^7$ MCS dla największych L . Na końcu program oblicza wartości średnie wyznaczanych zmiennych termodynamicznych oraz ich niepewności.

4.2. Algorytm klastrowy

W 1989 roku Ulli Wolff z Instytutu Fizyki Teoretycznej w Kiel (Niemcy) zaproponował algorytm badania dwuwymiarowej sieci spinów, który bazując na twierdzeniu Fortuin'a-Kasteleyn'a [22], usuwał pewne ograniczenia wcześniej opracowanej metody Swendsena – Wanga [36], radykalnie redukując problem spowolnienia krytycznego. Algorytmy klastrowe typu MC z powodzeniem zostały użyte do zbadania nieciągłych przejść fazowych [32,37] oraz ciągłych [22,36,38] dla układów z jednym niezależnym parametrem porządku. Bardziej skomplikowane przypadki w literaturze dotyczą dwuwymiarowego modelu AT, który był badany przez Salasa i Sokala [39] oraz przez Wisemana i Domany'ego [40-42] przy użyciu algorytmów klastrowych opartych na schemacie zamrażania-usuwania i dodawania kolejnych spinów do klastra za pomocą algorytmu Swendsen'a-Wang'a (SW) [36].

Podobnie jak w realnych eksperymentach, poważnym problemem w eksperymencie komputerowym jest występowanie błędów systematycznych. Są one znacznie trudniejsze do oszacowania niż zwykle niepewności statystyczne. W eksperymencie komputerowym wykonujemy skończoną ilość kroków w celu osiągnięcia równowagi termodynamicznej. Nie ma dobrej, ogólnej metody szacowania błędów systematycznych, każde źródło błędu należy rozpatrywać oddzielnie, a strategię jego oszacowania ewaluować. Oczywiście wcześniej nasze eksperymenty komputerowe MC dla trójwymiarowego modelu AT były prowadzone tylko przy użyciu algorytmu Metropolis'a. Warto podkreślić, że moje eksperymenty komputerowe są przeprowadzane nie tylko w obszarach krytycznych, ale również w okolicach punktów trojkrytycznych, znacznie trudniejszych do analizy. Występowanie trudnych do oszacowania błędów systematycznych oraz z uwagi na znane ograniczenia algorytmu Metropolis'a, głównie spowolnienie krytyczne, poprawność dotychczasowych wyników wymagała zweryfikowania ich przy pomocy niezależnego algorytmu klastrowego. Jednak algorytm klastrowy nie pojawił się w literaturze dotyczącej trójwymiarowego modelu AT.

W pracy R1 po raz pierwszy opracowałem i wdrożyłem algorytm klastrowy typu Wolffa dla modelu z wieloma niezależnymi parametrami porządku. Ponadto w literaturze brak przykładów na temat wykorzystania algorytmów klastrowych do uzyskania histogramu rozkładu energii. Zatem w mojej rozprawie nie tylko dokonuję walidacji wcześniejszych wyników, ale również zwracam uwagę na nowe zastosowania algorytmów klastrowych.

4.3. Algorytm klastrowy typu Wolffa

Wyniki uzyskane przy użyciu algorytmu Metropolis'a były moimi punktami odniesienia dla walidacji algorytmu klastrowego opracowanego przeze mnie w pracy R1. Pomogły one zweryfikować poprawne działanie mojego nowego algorytmu. W algorytmie Metropolis'a [32], używanym wcześniej do badania zachowania trójwymiarowego modelu AT, jeden krok MC jest zakończony, gdy każdy węzeł sieci został odwiedzony raz (wybierany systematycznie lub

losowo). Zmiana energii oddziaływania pary spinów w układzie równa się $e^{-2(K_2+K_4)}$ podczas odwrócenia pojedynczego spinu. Liczba kroków potrzebnych do osiągnięcia statystycznej niezależności układu jest w istocie niezależna od temperatury. Nie dotyczy to czasu komputerowego zużywanego w tej metodzie, gdyż w miarę zbliżania się do temperatury krytycznej duże klastry powstają coraz częściej i rośnie liczba operacji, które muszą być wykonane w jednym kroku [22]. Dlatego w algorytmie typu Wolffa zaproponowanym przeze mnie jeden krok kończy się dopiero wtedy, gdy liczba odwróconych spinów w klastrach będzie większa bądź równa liczbie wszystkich spinów w układzie. Dzięki temu zabiegowi liczba odwracanych spinów w jednym kroku MC w algorytmie Wolffa jest rzędu ilości prób odwrócenia pojedynczych spinów w jednym kroku MC w algorytmie Metropolis. Odwracanie spinów odbywa się niezależnie dla obydwu podsieci, chociaż prawdopodobieństwo dodania kolejnego spinu do obracanego klastra zależy od wartości spinu na sąsiedniej podsieci i jest zdefiniowane dla spinów s jako

$$P_{add,s}(s_i, s_j) = 1 - e^{\min(0, 2(K_2 s_i s_j + K_4 s_i \sigma_i s_j \sigma_j))} = \begin{cases} 1 - e^{-2(K_2+K_4)} & \text{for } s_i \neq s_j \text{ and } s_i \sigma_i \neq s_j \sigma_j \\ 1 - e^{-2(K_2-K_4)} & \text{for } s_i \neq s_j \text{ and } s_i \sigma_i = s_j \sigma_j \\ 0 & \text{for } s_i = s_j \end{cases} \quad (2)$$

Porównanie czasów korelacji zmierzonych w kategoriach liczby kroków MC dla mojego algorytmu klastrowego typu Wolffa i algorytmu Metropolis w pobliżu przemiany fazowej, aby ustalić, który z nich jest lepszy, byłoby niesprawiedliwe. Krok MC w algorytmie Wolffa jest bardzo skomplikowaną procedurą, odwracającą czasami setki spinów i potencjalnie zabiera sporo czasu procesora. Natomiast krok MC w algorytmie Metropolis jest bardzo prosty i szybki. Na potrzeby obliczenia spowolnienia krytycznego w algorytmie Wolffa przyjmuję, że w jednym kroku MC obracane są dwa klastry, jeden spinów s i drugi spinów σ . Czas potrzebny do ukończenia jednego kroku w algorytmie Wolffa jest proporcjonalny do średniej liczby obróconych spinów n w pojedynczym klastrze. Taki klaster obejmuje ułamek n/L^d spinów w całej sieci, a zatem całkowity czas średnio będzie wynosił $\langle n \rangle / L^d$ czasu odwrócenia wszystkich spinów w układzie, gdzie $\langle n \rangle$ to średnia wielkość klastra obracanego w stanie równowagi. Średnia wartość obracanych klastrów w obu podsieciach s i σ jest taka sama. Zatem będzie to równoważne odwiedzeniu każdego węzła sieci w algorytmie Metropolis i próbie odwrócenia spinów s oraz σ . W przypadku skonstruowanego przeze mnie algorytmu typu Wolffa, w celu obliczenia wartości poszczególnych zmiennych termodynamicznych w każdym kroku obracany jest tylko jeden klaster spinów dla każdej podsieci i na tej podstawie obliczam czas korelacji. W celu porównania ze sobą działania algorytmów klastrowego i Metropolis mnożymy tak otrzymany czas korelacji przez stosunek średniej wielkości obracanego klastra w jednym kroku MC do wielkości układu [22]. Korzystając z tej definicji, możemy porównać wydajność dwóch algorytmów w pobliżu obszaru krytycznego.

Parametry, których używam do porównania tych algorytmów dla modelu AT, są takie same jak w przypadku badania standardowego modelu Isinga w literaturze, energia E_α oraz namagnesowanie układu M_α niezależnie dla każdego stopnia swobody $\alpha = s, \sigma$ lub ich iloczynu $s\sigma$. Aby obliczyć wartości średnie energii $\langle E_\alpha \rangle$ oraz namagnesowania układu $\langle M_\alpha \rangle$ na jeden węzeł, muszę najpierw określić, jak długo trzeba prowadzić eksperyment komputerowy, aby otrzymać dobre oszacowanie ich wartości oczekiwanych. To wymaga określenia ilości kroków

MC, aby doprowadzić układ do stanu równowagi oraz znajomości stałej czasu korelacji, czyli czasu na przejście układu z jednego stanu do drugiego.

Dla $\langle E_\alpha \rangle$ oraz $\langle M_\alpha \rangle$ obliczam funkcję autokorelacji pomiędzy poszczególnymi stanami układu. Jednostką czasu t w funkcji autokorelacji jest jeden krok MC [32]. Znormalizowaną funkcję autokorelacji otrzymuję poprzez podzielenie funkcji autokorelacji przez jej wariancję, dzięki temu przyjmuje ona wartości od -1 do 1 . Autokorelacja spada ze znaczącą niezerową wartością w krótkim czasie t , a po upływie dostatecznie długiego czasu spada do zera. Typowa skala czasowa (jeśli taka istnieje), na której jest odłożona miara czasu korelacji χ symulacji, definiuje czas korelacji τ . Wyznaczając wykres zależności τ od L w skalach logarytmicznych, nachylenie dopasowanej krzywej daje mi wartość wykładnika krytycznego z . To pozwala mi na porównanie wydajności tych dwóch różnych algorytmów, Metropolisa oraz klastrowego typu Wolffa.

Ciepło przemiany obliczone dla obydwu algorytmów przy pomocy metody kumulant oraz histogramu rozkładu energii daje zbieżne wyniki w granicach niepewności dla dostatecznie dużych układów. Wyznaczona wartość spowolnienia krytycznego dla punktu Isinga ($K_4 = 0$ na rysunku 1) dla obydwu algorytmów jest zgodna z wartościami występującymi w literaturze dla trójwymiarowego modelu Isinga [43-46]. Dochodzimy do wniosku, że dla obydwu algorytmów są to równoważne metody dochodzenia do stanu równowagi. Utworzony przeze mnie algorytm może być wykorzystywany zarówno przy przemianach ciągłych, jak też nieciągłych. W pracy R1 wykazałem również, że w niektórych przypadkach algorytm Wolffa całkowicie eliminuje problem spowolnienia krytycznego dla trójwymiarowego modelu AT.

4.3.1. Funkcja autokorelacji

Jak zaznaczyłem wyżej, do porównania algorytmu Metropolisa i mojego algorytmu klastrowego dla modelu AT, w pracy R1 użyłem takich samych parametrów, jakie zostały użyte dla standardowego modelu Isinga, energii wewnętrznej E_α i namagnesowania M_α [47-49] wyznaczanych niezależnie dla każdego rodzaju stopni swobody $\alpha = s, \sigma$ oraz ich iloczynu $s\sigma$. Aby określić średnie wartości $\langle E_\alpha \rangle$ oraz $\langle M_\alpha \rangle$ na jeden węzeł sieci, musiałem najpierw określić, na jaki czas trzeba uruchomić eksperyment komputerowy w celu uzyskania dobrego oszacowania ich wartości oczekiwanych. Wymaga to znajomości czasu, który jest potrzebny do osiągnięcia równowagi termodynamicznej i stałej czasowej korelacji τ . τ jest miarą czasu potrzebnego na przejście układu z jednego stanu do drugiego, który znacząco różni się od poprzedniego [32]. Istnieje wiele sposobów szacowania czasu korelacji. Najbardziej bezpośredni z nich to obliczenia oparte na znormalizowanej funkcji autokorelacji $\chi_A(t)$ [32,39,42] dowolnej własności A modelu. W naszym przypadku, są to $A = E_\alpha$ lub M_α . Dla dyskretnych wartości uzyskanych w moim eksperymencie komputerowym obliczam funkcję autokorelacji przez podzielenie nieznormalizowanej funkcji autokorelacji przez jej wariancję σ_A^2 [30]

$$\chi_A(t) = \frac{\sum_{i=1}^{l_{max}-t} (A_{i+t} - \bar{A})(A_i - \bar{A})}{(t_{max} - t) \sigma_A^2}, \quad (3)$$

gdzie:

$$\sigma_A^2 = \frac{1}{t_{max}} \sum_{t=1}^{t_{max}} (A_t - \bar{A})^2. \quad (4)$$

A_t jest tutaj chwilową wartością średniego namagnesowania M_a lub energii E_a w czasie t , podczas gdy \bar{A} jest obliczoną wartością średnią wszystkich wartości chwilowych. W naszym przypadku miara czasu t określona jest jako jeden krok MC, podczas gdy t_{max} to liczba wszystkich zarejestrowanych mikrostanów układu. Funkcja autokorelacji daje nam miarę korelacji w dwóch różnych czasach, przesuniętych względem siebie o i . Jeżeli $\chi_A(t) = 0$, to fluktuacje danej wielkości nie są skorelowane [32]. Formalnie powinno się obliczyć $\chi_A(t)$ całkując po nieskończonym przedziale czasu $t \rightarrow \infty$. Dlatego w programie komputerowym robię wszystko, co w mojej mocy, aby zbliżyć się do tego wymogu i po prostu sumuję po wszystkich pomiarach wykonanych od początku do końca przebiegu mojego program po osiągnięciu stanu równowagi, czyli sumuję od $t = 1$ do $t_{max} \sim 10^7$ kroków MC. Staram się, aby czas t_{max} pomiarów był znacznie większy niż czas korelacji τ . Autokorelacja maleje ze znaczną niezerową prędkością w miarę upływu czasu t , a po bardzo długim czasie spada do zera [32]. Oczekuje się, że będzie ona zmniejszać się wykładniczo z czasem. Związek pomiędzy funkcją autokorelacji $\chi_A(t)$ i czasem korelacji $\tau_{exp,A}$ dla wielkości badanej właściwości termodynamicznej A jest określona wzorem [32]

$$\chi_A(t) \approx C e^{-t/\tau_{exp,A}} \quad (5)$$

Wyznaczenie $\tau_{exp,A}$ jest bardzo czułe na określenie zakresu dopasowania funkcji wykładniczej do funkcji autokorelacji. Łatwiej jest obliczyć zintegrowany czas korelacji $\tau_{int,A}$ dla funkcji korelacji niż dopasowanie wykładnicze, ponieważ metoda ta nie jest tak wrażliwa na szum statystyczny [32]. To jednak jest powszechną praktyką, chociaż, jak wykazały wcześniejsze badania [32,39,45], czasy $\tau_{exp,A}$ i $\tau_{int,A}$ mogą w niektórych przypadkach nieznacznie różnić się od siebie [45]. Całkowy czas korelacji określony jest następująco [32]

$$\tau_{int,A} = \frac{1}{2} \sum_{t=-\infty}^{+\infty} \chi_A(t) = \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^{+\infty} \chi_A(t) \quad (6)$$

W estymacji numerycznej $\tau_{int,A}$ oblicza się w granicy dużych wartości t (t_∞), przy czym jednak jej błąd statystyczny szybko rośnie. Jako kompromis pomiędzy błędami systematycznymi a statystycznymi, często stosowana procedura polega na wyznaczeniu górnej granicy t_∞ , w sposób samozgodny przez obcięcie sumowania dla $t_\infty \geq 6\tau_{int,A}(t_\infty)$ [32]. Krytyczne fluktuacje, które zwiększają wielkość niepewności pomiaru, są integralną cechą fizyczną symulacji modeli Isinga, a więc także modelu AT. Algorytm MC dowolnego typu prawidłowo próbkuje rozkład Boltzmana ustalonych wielkości fizycznych w obszarze krytycznym, ale będzie miał znaczne wahania. Efekt ten nazywany jest spowolnieniem krytycznym i jest integralną właściwością algorytmu typu MC. Znane algorytmy mają różne wartości czasu korelacji w zależności od temperatury układu T , a czas korelacji często istotnie wzrasta, gdy zbliżamy się do temperatury krytycznej T_c . Ponieważ jestem zainteresowany badaniem zachowania modelu AT w obszarze krytycznym, zaproponowałem algorytm, który wykazuje

znacznie mniejsze spowolnienie krytyczne niż algorytm Metropolis, a w pewnych warunkach nawet całkowicie je eliminuje.

4.3.2. Wyznaczanie wykładnika krytycznego z

Aby określić wartość wykładnika krytycznego z zarówno dla algorytmu Metropolis, jak też dla mojego algorytmu klastrowego, wykorzystuję pomiary ich całkowitego czasu korelacji $\tau_{int,A}$. Zależność pomiędzy czasem korelacji $\tau_{M,A}$ a wykładnikiem krytycznym $z_{M,A}$ dla algorytmu Metropolis (wskazanego przez indeks M) zawiera długość korelacji ξ , natomiast ξ jest proporcjonalna do rozmiaru układu L [32], stąd

$$\tau_{M,A} \sim \xi^{z_{M,A}} \sim L^{z_{M,A}} \quad (7)$$

Równanie (7) pokazuje, że gdy znajdujemy się w obszarze krytycznym, czas korelacji wzrasta wraz z rozmiarem układu jak $L^{z_{M,A}}$. Podstawowym powodem dla dużej wartości $z_{M,A}$ w algorytmie Metropolis jest rozbieżność długości korelacji i fluktuacji krytycznych w pobliżu punktu przemiany fazowej. Przedstawiając wykres zależności $\tau_{M,A}$ od L w skalach logarytmicznych, na podstawie nachylenia dopasowanej funkcji, określam wartość $z_{M,A}$.

W celu porównania czasów korelacji mojego algorytmu klastrowego i algorytmu Metropolis w obszarze krytycznym byłoby nieadekwatnym zmierzyć τ dla obu algorytmów w zależności od liczby kroków MC. Jak podkreśliłem wcześniej, wynika z faktu, że jeden krok MC w algorytmie Wolffa to bardzo skomplikowana procedura, czasami odwracanie setek spinów, co potencjalnie zajmuje dużo czasu procesora, podczas gdy krok MC w algorytmie Metropolis jest prostszy i zwykle zajmuje mniej czasu procesora [32]. Do obliczenia spowolnienia krytycznego w moim algorytmie typu Wolffa zakładam, że dwa klastry są odwracane w jednym kroku MC, jeden spinów s , a drugi spinów σ . To jest inna definicja kroku MC niż przedstawiona w rozdziale 4.3, jednak tutaj została ona zmodyfikowana tylko dla porównania wyników otrzymanych przeze mnie z wartościami przedstawionymi w literaturze [22,40-45]. Czas potrzebny do wykonania jednego kroku MC mojego algorytmu typu Wolffa jest proporcjonalny do średniej liczby n odwróconych spinów w jednym klastrze. Taki klaster zawiera ułamek n/L^d całej sieci spinów, a zatem całkowity czas wyniesie średnio $\langle n \rangle / L^d$ czasu odwrócenia wszystkich spinów układu, gdzie $\langle n \rangle$ jest średnim rozmiarem odwracanych klastrów w stanie równowagi. Będzie to zatem równoznaczne z odwiedzeniem każdego węzła sieci w algorytmie Metropolis i z próbami odwracania spinów s i σ . W przypadku skonstruowanego przeze mnie algorytmu typu Wolffa, w celu obliczenia poszczególnych zmiennych termodynamicznych, przy każdym kroku MC tylko jeden klaster spinów dla każdej podsięci jest odwracany i na tej podstawie obliczam czas korelacji $\tau_{MCS,A}$. W celu porównania działania algorytmów klastrowego i Metropolis, mnożę tak otrzymany czas korelacji $\tau_{MCS,A}$ przez stosunek średniej wielkości $\langle n \rangle$ odwracanych klastrów w jednym kroku MC do rozmiaru układu L^3 dla danej wielkości termodynamicznej [22,32]

$$\tau_{W,A} = \tau_{MCS,A} \frac{\langle n \rangle}{L^3}. \quad (8)$$

Korzystając z tej definicji, porównuję czasy korelacji $\tau_{M,A}$ i $\tau_{W,A}$ dla algorytmu Metropolisia (indeks M) i mojego algorytmu typu Wolffa (indeks W) w obszarze krytycznym i określam wartość krytyczną wykładnika $Z_{W,A}$, analogicznie jak w przypadku algorytmu Metropolisia.

5. Kumulanty

Dla każdego stanu układu program komputerowy oblicza wartości namagnesowania oraz energii wewnętrznej dla każdego parametru porządku $\langle \alpha \rangle$ oddzielnie, $\alpha = s, \sigma, s\sigma$, lub H dla całego hamiltonianu. Wykorzystując wartości tych parametrów program oblicza wartości kumulant Bindera $Q_{\alpha,L}$ [24], typu Chalii $V_{\alpha,L}$ [50] oraz typu Lee-Kosterlitz $U_{\alpha,L}$ [51]. Ta ostatnia została przeze mnie po raz pierwszy zastosowana do modelu AT i wprowadzona do programu. Wykonując eksperymenty komputerowe, ustalam stałą wartość oddziaływania czterospinowego K_4 i najpierw analizuję zależności $Q_{\alpha,L}(K_2)$ (patrz np. [13, 52]). Kumulanta Bindera $Q_{\alpha,L}$, związana jest z momentami parametru porządku $\langle \alpha \rangle$ zależnością

$$Q_{\alpha,L} = \langle \alpha^2 \rangle_L^2 / \langle \alpha^4 \rangle_L \quad (9)$$

gdzie $\langle \alpha^n \rangle$ jest n -tym momentem parametru porządku stopni swobody $\langle \alpha \rangle$ oddzielnie, $\alpha = s, \sigma$ lub ich iloczynu $s\sigma$, uśrednionymi po zespole niezależnych próbek o rozmiarach $L \times L \times L$. Ich analiza daje mi wstępną lokalizację punktu przemiany fazowej na diagramie $K_4(K_2)$. W ten sposób wstępnie lokalizuję punkty przemian fazowych zarówno ciągłych, jak i pierwszego rodzaju. Aby móc obliczyć ciepło przemiany fazowej, jednocześnie z wyżej wymienionymi kumulantami Bindera, program oblicza także trzy kumulanty typu Chalii [14,50]

$$V_{\alpha,L} = 1 - \langle E_\alpha^4 \rangle_L / 3 \langle E_\alpha^2 \rangle_L^2 \quad (10)$$

i trzy kumulanty typu Lee-Kosterlitz [51]

$$U_{\alpha,L} = \langle E_\alpha^2 \rangle_L / \langle E_\alpha \rangle_L^2 \quad (11)$$

dla ustalonej wartości K_4 , gdzie $\langle E_\alpha^n \rangle_L$ jest n -tym momentem energii wewnętrznej E z całego hamiltonianu $H(1)$ lub z jednego z jego członów dla stopni swobody α ($\alpha = s, \sigma$ lub ich iloczynu $s\sigma$) uśrednionym po zespole niezależnych próbek o rozmiarach $L \times L \times L$. Kumulanty typu Chalii zostały zmodyfikowane [14,21], aby móc obliczać ciepło przemiany nie tylko dla całego układu (hamiltonianu), ale również oddzielnie dla każdego parametru porządku. Analogiczną modyfikację wykonałem dla kumulant typu Lee-Kosterlitz i wprowadziłem obliczanie tych kumulant do programu komputerowego. Dla ciągłej przemiany fazowej $V_{\alpha,L} = \frac{2}{3}$ oraz $U_{\alpha,L} = 1$ w granicy termodynamicznej. Z drugiej strony zależności $V_{\alpha,L}(K_2)$ pokazują charakterystyczne lokalne minima, a $U_{\alpha,L}(K_2)$ wykazuje charakterystyczne lokalne maksima przy ustalonej wartości stałej sprzężenia K_4 dla nieciągłych przemian fazowych. Wartości tych minimów $V_{\alpha,L}^{min}$ i ich położenia $K_{2,\alpha,L}^{min}$ skalują się liniowo w zależności od L^{-3} [27,53]. Analogiczne właściwości pokazują maksima zależności $U_{\alpha,L}(K_2)$ [54]. Własności te pozwalają na ekstrapolację wartości tych parametrów do granicy termodynamicznej. Wartości graniczne $K_{2,\alpha,L}^{min}$ i $K_{2,\alpha,L}^{max}$ dla stopni swobody α są lepszymi oszacowaniami krytycznej wartości K_2 , niż wartość uzyskana z wyżej wspomnianej analizy zależności kumulant Bindera $Q_{\alpha,L}(K_2)$.

Dla nieciągłej przemiany fazowej zachodzi [51]

$$V_{\alpha,L \rightarrow \infty}^{min} = 2/3 - (1/12)(E_{\alpha,+}/E_{\alpha,-} - E_{\alpha,-}/E_{\alpha,+})^2 + c_V/L^3, \quad (12)$$

gdzie c_V to skomplikowane wyrażenie, którego wartość nie zależy od L , ani od K_2 , przy czym $E_{\alpha,\pm} = \langle E_\alpha \rangle (K_{\alpha,2} \rightarrow K_{\alpha,2,c} |_{\pm})$ w granicy termodynamicznej. Wartość ważnego dla tematyki rozprawy ciepła przemiany obliczam przy użyciu metody zaproponowanej przez Musiała [17]. Dysponując wartością $V_{\alpha,L}^{min}$ w granicy termodynamicznej, ze wzoru (12) obliczam wartość $E_{\alpha,-}$ podstawiając tam wartość $E_{\alpha,+}$ oszacowaną z wykresów energii wewnętrznej $E_{\alpha,L}(K_2)$ dla próbek o skończonym rozmiarze. Ciepło przemiany to $E_{\alpha,+} - E_{\alpha,-}$. Przy tym starannie sprawdzam, czy ciepło przemiany dla całego układu ($\alpha = H$) jest sumą jego częściowych wartości pochodzących od poszczególnych stopni swobody α , $\alpha = s$, σ oraz od ich iloczynu $s\sigma$. Gdy w danej sytuacji możliwa jest analiza histogramu rozkładu energii wewnętrznej $E_{\alpha,L}(K_2)$, czyli gdy jest ciepło przemiany nie ma zbyt małej wartości, wtedy używam tutaj również wyznaczonej w ten sposób wartości $E_{\alpha,+}$, która ma mniejszą niepewność. Metodę histogramu rozkładu energii objaśniam w następnym rozdziale. Warto zauważyć, że gdy ciepło przemiany $E_{\alpha,+} - E_{\alpha,-}$ dąży do zera, wtedy wartość $V_{\alpha,L \rightarrow \infty}^{min}$ zmierza do wartości $2/3$, jak opisałem powyżej dla ciągłych przejść fazowych. Wyniki naszych wcześniejszych badań potwierdzają, że przybliżenie podane przez Challę i in. [18,50] stosuje się tylko do słabych przemian fazowych, w przeciwieństwie do przybliżenia Lee-Kosterlitz (12). Nasze analizy potwierdzają, że wzór (12) daje poprawne wyniki nie tylko silnych przemian fazowych, jak twierdzą w swojej pracy Lee i Kosterlitz [51], ale także dla słabych przemian pierwszego rodzaju.

Niezależnie ciepło przemiany wyliczam w analogiczny sposób przez przeskalowanie do granicy termodynamicznej wartości maksimum zależności kumulant $U_{\alpha,L}(K_2)$ dla całego hamiltonianu i niezależnie dla każdego parametru porządku, gdyż dla przemian fazowych pierwszego rodzaju mamy [51]

$$U_{\alpha,L \rightarrow \infty}^{min} = (E_{\alpha,+} - E_{\alpha,-})^2 / (4E_{\alpha,+}E_{\alpha,-}) + c_U/L^3, \quad (13)$$

gdzie c_U to wyrażenie o skomplikowanej postaci, którego wartość nie zależy od L , ani od K_2 . Podobnie jak przy wzorze (12), wartości tego maksimum $U_{\alpha,L}^{min}$, jak i jego lokalizacja $K_{2,\alpha,L}^{max}$ skalują się liniowo w funkcji L^{-3} , co również pozwala mi ekstrapolować wartości tych dwóch parametrów do granicy termodynamicznej. Warto zauważyć, że również tutaj gdy ciepło przemiany fazowej $E_{\alpha,+} - E_{\alpha,-}$ dąży do zera, to wartość $U_{\alpha,L \rightarrow \infty}^{max}$ zmierza do wartości 1, jak opisałem powyżej dla ciągłych przejść fazowych.

6. Histogram rozkładu energii

Wykorzystanie histogramu rozkładu energii w symulacjach silnych przemian fazowych pierwszego rodzaju z wykorzystaniem układów o skończonych rozmiarach zostało opisane na przełomie lat 80 i 90 XX wieku (zob. [51,52,55] i prace tam cyt.). Podobnie jak w q -stanowym modelu Potts'a z q równoważnymi uporządkowanymi stanami i jednym nieuporządkowanym [51], również w trójwymiarowym modelu AT zaobserwowaliśmy charakterystyczny histogram

o dwóch pikach w obszarze krytycznym. Maksima tych pików pojawiają się przy wartości energii $E_{\alpha,L,-}$ dla stanu uporządkowanego oraz $E_{\alpha,L,+}$ dla nieuporządkowanego i są rozdzielone przez wyraźne minimum. Hamiltonian (1) trójwymiarowego modelu AT jest sumą trzech członów, z których każdy przedstawia energię oddziaływania w obrębie jednego parametru porządku. Jak w źródłowych pracach [51,52,55], prowadzimy analizę histogramu dla całkowitej energii układu, ale nie daje ona wglądu w indywidualne zachowanie się poszczególnych stopni swobody układu s , σ oraz ich iloczynu $s\sigma$ wykazujących niezależne uporządkowanie. Żeby obliczyć indywidualny wkład każdego z tych trzech stopni swobody układu do ciepła przemiany, zaproponowaliśmy także przeanalizowanie histogramu energii oddziaływania poszczególnych stopni swobody, czyli każdego z trzech członów hamiltonianu osobno. W pracy [20] zostało zaprezentowane pierwsze użycie metody histogramu energii w modelu z wieloma parametrami porządku.

Technicznie histogram wyznaczany jest w programie poprzez podzielenie przedziału wszystkich energii E (w jednostkach $k_B T$) pojawiających się w moich eksperymentach komputerowych na małe podprzedziały (na ogół o szerokości rzędu 0,001), program zlicza występowanie energii w poszczególnych podprzedziałach. Następnie dzieląc w tym programie wartości poszczególnych zliczeń przez ich sumę, czyli ilość kroków MC, otrzymujemy wartości prawdopodobieństwa P pojawiania się energii w poszczególnych podprzedziałach w układach o skończonych rozmiarach L^3 . Program oblicza niezależnie wartości $P_L(E_{\alpha,L},\beta)$ oraz $-\ln P_L(E_{\alpha,L},\beta)$, gdzie $\alpha = s, \sigma$ lub $s\sigma$, a także biorąc dla $\alpha = H$, energii z całego hamiltonianu (1) przy krytycznej wartości parametru K_2 wyznaczonej z analiz wykorzystujących kumulanty Bindera $Q_{\alpha,L}$ [24], typu Chalii $V_{\alpha,L}$ [50] oraz typu Lee-Kosterlitz $U_{\alpha,L}$ [51], dla założonej wartości parametru K_4 . Pozwalają one na ważny test, odpowiednie wartości energii $E_{\alpha,-}$ i $E_{\alpha,+}$ dla stanów uporządkowanego i nieuporządkowanego wyznaczone z analiz wyników naszych eksperymentów MC w obrębie poszczególnych stopni swobody i całego hamiltonianu powinny wypadać w górnym i dolnym rejonie charakterystycznego gwałtownego skoku średnich wartości odpowiednich energii E_α w funkcji K_2 . Ciekawe własności wykazuje funkcja $-\ln P_L(E,\beta)$, która ma minima przy $E=E_{\alpha,L,\pm}$ rozdzielone maksimum przy $E=E_{\alpha,L,m}$. Różnica $E=E_{\alpha,L,m}$ oraz $E=E_{\alpha,L,m}$ jest równa $\Delta F(L)$, wysokości bariery energii swobodnej pomiędzy stanami uporządkowanym i nieporządkowanym, która nie zależy od ilości kroków MC [22]. Przy ciągłych przemianach fazowych wielkość $\Delta F(L)$ nie zależy od rozmiaru układu L , natomiast przy przemianie fazowej pierwszego rodzaju jest rosnącą funkcją L , która przy $L \gg \xi$ wzrasta proporcjonalnie do L^{d-1} , gdzie ξ jest długością korelacji podczas tej przemiany. Własność ta wynika stąd, że w pobliżu przemiany fazowej pierwszego rodzaju funkcja $F(E,L)$ ma rozwinięcie [51]

$$F(E_\alpha, L) = L^d f_0(E_\alpha) + f_1(E_\alpha) + \dots, \quad (14)$$

gdzie $f_0(E)$ jest przestrzenną energią swobodną mającą minimum przy $E_{\alpha,+} \geq E_\alpha \geq E_{\alpha,-}$ pozostając stałą w tym przedziale, zaś $f_1(E_\alpha)$ jest powierzchniową energią swobodną z maksimum przy wartości $E_{\alpha,m}$. Z równania (6) wynika, że funkcja $F(E_\alpha, L)$ ma dwa minima przy $E = E_{\alpha,+}(L)$ oraz $E_{\alpha,-}(L)$.

Własnością, którą wykorzystuję w moich eksperymentach komputerowych, jest fakt, że położenia minimów $E_{\alpha,L,\pm}$ zależności $-\ln P_L(E_{\alpha,L},\beta)$ w funkcji L^{d-1} ($\beta = 1/k_B T$, k_B to stała

Boltzmann, a d wymiar układu) wykazują dobrą liniową skalowalność do granicy termodynamicznej do wartości $E_{\alpha,\pm}$ [51], co ja potwierdzam na podstawie omówionych w poprzednim rozdziale wartości $E_{\alpha,\pm}$ otrzymanych przeze mnie z obliczeń uzyskanych na podstawie analiz zachowania się zmodyfikowanych kumulant V_L i U_L [20].

Na podstawie tych wyników obliczam bezpośrednio ciepło przemiany

$$l = (E_{\alpha,+} - E_{\alpha,-}), \quad (15)$$

gdzie $\alpha = s, \sigma, s\sigma$ lub H .

7. Opis wyników uzyskanych w poszczególnych pracach rozprawy

7.1 Cluster Monte Carlo method for the 3D Ashkin-Teller model [R1]

Opis algorytmu znajduje się w rozdziale 4.3. Praca R1 poza dokładnym opisem mojego nowego algorytmu zawiera również opis metodologii służącej do porównania efektywności dotychczas stosowanego algorytmu Metropolis z opracowanym przeze mnie algorytmem klastrowym (podrozdziały 4.3.1 i 4.3.2). W artykule jest przedstawiona klastrowa metoda MC stosowalna zarówno do układów z przemianami fazowymi nieciągłymi, jak również ciągłymi, w trójwymiarowym modelu AT. Algorytm klastrowy jest niezbędny do weryfikacji poprawności wyników uzyskanych przedtem przy użyciu algorytmu Metropolis wykazującego znaczne spowolnienie krytyczne.

Praca R1 demonstruje także dynamiczne zachowanie krytyczne nowego algorytmu klastrowego typu Wolffa. Rozszerzone przeze mnie eksperymenty komputerowe wykorzystują nie tylko właściwości kumulant Bindera i typu Challi, ale także wprowadzone przeze mnie do programu kumulanty zaproponowane przez Lee i Kosterlitz. Ten ostatni zaadaptowany przeze mnie, aby dać jednoznaczne wyniki dla modelu AT, analogicznie jak zaadaptowana wcześniej przez Musiała kumulanta Challi. Własności i sposób wykorzystania tych kumulant objaśniłem w rozdziale 5 rozprawy. Metoda histogramu rozkładu energii została przez nasz zespół po raz pierwszy zastosowana w trójwymiarowym modelu AT, natomiast ja po raz pierwszy w literaturze zastosowałem ją z wykorzystaniem algorytmu klastrowego. Opis tej metody przedstawiłem w rozdziale 6 rozprawy. W celu weryfikacji poprzednich wyników i walidacji mojego algorytmu, w pracy R1 wykazaliśmy, że wyniki obliczeń z użyciem nowego algorytmu klastrowego wzdłuż linii między punktami Isinga A i Potts P (pokazanych na rysunku 1), które są przeskalowane do ich granic termodynamicznych, w granicach niepewności są zgodne z wcześniejszymi wynikami uzyskanymi przy użyciu algorytmu Metropolis. Pokazałem również, że przedstawiony algorytm klastrowy typu Wolffa znacznie zmniejsza problem spowolnienia krytycznego dla trójwymiarowego modelu AT, a dynamiczny wykładnik krytyczny osiąga wartości bliskie zeru.

Nowy algorytm jest nie tylko dobrym narzędziem do weryfikacji wyników uzyskanych wcześniej za pomocą algorytmu Metropolis dla trójwymiarowego modelu AT, który jest układem z wieloma zachowującymi się niezależnie parametrami porządku. W pracy R1 wykazałem także, że algorytm klastrowy może być wykorzystany do obliczenia wielkości

statystycznych, w tym ciepła przemiany, nie tylko metodą kumulant, ale także niezależnie metodą opartą na histogramie rozkładu energii, przy czym ta ostatnia metoda ma znacznie mniejszą złożoność. Jednak aby wykorzystać metodę histogramu, konieczne jest wystarczająco dokładne wyznaczenie miejsca badanej przemiany fazowej, co uzyskuje stosując metodę kumulant. W ten sposób zweryfikowaliśmy poprawność wyników uzyskanych poprzednio za pomocą algorytmu klastrowego typu Wolffa. Eksperymenty komputerowe zostały przeprowadzone nie tylko w obszarach krytycznych, ale także w pobliżu punktów trójkrytycznych, które są trudniejsze do analizy. Największą zaletą algorytmu klastrowego jest znaczne ograniczenie problemu spowolnienia krytycznego, a nawet w niektórych przypadkach dynamiczny wykładnik krytyczny osiąga wartości bliskie zeru. Warto podkreślić, że zastosowanie algorytmu klastrowego typu Swendsena-Wanga do dwuwymiarowego modelu AT zmniejsza spowolnienie krytyczne w znacznie mniejszym stopniu [34-37], niż opisany w pracy R1 algorytm klastrowy. Podobnie sprawdziłem również, że mój algorytm klastrowy może być wykorzystywany dla układów zarówno z ciągłymi, jak też nieciągłymi przemianami fazowymi w trójwymiarowym modelu AT. Podsumowując skuteczność mojego algorytmu klastrowego, sprawdziłem, że czasy wykonania dla próbek o tej samej wielkości są porównywalne przy użyciu naszego algorytmu klastrowego i algorytmu Metropolis. Chociaż obserwuję pewien wzrost efektywności algorytmu klastrowego w miarę wzrostu rozmiaru sieci. Zatem algorytmy Metropolis oraz klastrowy mogą być stosowane zamiennie, jednak w pobliżu punktu krytycznego szybciej i bardziej wiarygodne wyniki daje algorytm klastrowy. Porównując wyniki ciepła przemiany dla metody kumulant z wykorzystaniem obydwu algorytmów, stwierdzam, że dają one wartości zgodne w granicach niepewności. Z uwagi na to, że algorytm typu Wolffa preferuje układy uporządkowane, niepewności wartości ciepła przemiany dla całego układu, jak też dla spinów s i σ oraz ich iloczynu $s\sigma$, obliczone metodą histogramu energii są około trzykrotnie większe niż dla algorytmu Metropolis. Jednak należy tutaj podkreślić, że te ostatnie zostały otrzymane z liczbą kroków MC 8 do 10 razy większą z uwagi na mniejszą złożoność algorytmu Metropolis. Jednak przy porównywalnej liczbie kroków MC, wyniki algorytmu klastrowego mają mniejsze niepewności. Z drugiej strony dzięki mniejszemu spowolnieniu krytycznemu możemy uzyskiwać wyniki dla większych układów.

Dla małych układów wyniki eksperymentów komputerowych MC odbiegają od liniowej zależności przy skończonej wielkości skalowanie (patrz np. [38,41,56]). W ten sposób wyniki powinny być obliczane dla wystarczająco dużych próbek do ich ekstrapolacji do granicy termodynamicznej. W efekcie nie stwierdziłem wymiernego wpływu spowolnienia krytycznego, ani obecności stanów metastabilnych lub niestabilnych na wartości wielkości termodynamicznych, które do tej pory były wyznaczane za pomocą algorytmu Metropolis. Największą zaletą mojego algorytmu klastrowego jest znaczące zmniejszenie problemu krytycznego spowolnienia, a w niektórych przypadkach dynamiczny wykładnik krytyczny osiąga wartości bliskie zeru.

Aby wyciągnąć jednoznaczne wnioski odnośnie wydajności algorytmu klastrowego, sprawdziłem, czy czasy wykonania dla próbek o tym samym rozmiarze L są porównywalne, gdy analizujemy punkty poza obszarem krytycznym, gdzie klastry spinów są zbyt małe, aby zrekompensować większą złożoność algorytmu typu Wolffa. Z kolei obserwuję wyższą efektywność mojego algorytmu klastrowego w pobliżu punktu przemiany fazowej, gdzie

dominują większe klastry spinów i czasy wykonywania programów są o około 30% krótsze w porównaniu do przypadku korzystania z algorytmu Metropolisa z tymi samymi parametrami hamiltonianu, wielkością próbki L i liczbą kroków MC. Warto w tym miejscu wspomnieć, że obserwuję również pewien wzrost wydajności mojego algorytmu klastrowego, gdy rozmiar sieci L wzrasta, chociaż wzrost ten jest niewielki w porównaniu do dużego spadku spowolnienia krytycznego (dla porównania patrz np. [57]). Z tych powodów skonkludowaliśmy również, że lepiej jest wykorzystywać algorytm Metropolisa poza obszarem krytycznym, ponieważ jego mniejsza złożoność pozwala osiągnąć niższe niepewności wyznaczonych wartości wielkości termodynamicznych z nieco krótszym czasem działania programu, gdyż dzięki temu możemy wykonać większą liczbę kroków MC. Natomiast w obszarze krytycznym dominują duże klastry i ten efekt z nadwyżką rekompensuje większą złożoność mojego algorytmu klastrowego, dającego w efekcie wyniki z porównywalnymi niepewnościami w krótszym czasie. Dlatego jako najefektywniejszą strategię zaproponowałem użycie algorytmu klastrowego w regionie krytycznym i algorytmu Metropolisa poza nim.

Korzystając z bibliograficznych metod porównywania algorytmów, w podrozdziale 5.3 pracy R1 pokazałem, że mój algorytm klastrowy typu Wolffa prawie nie wykazuje krytycznego spowolnienia, gdyż pokazuje tylko niewielkie spowolnienie krytyczne (z jest rzędu 0,3 i ta wartość zgadza się z danymi bibliograficznymi dla trójwymiarowego modelu Isinga w granicach niepewności [58]) w punkcie z $K_4=0$ i $K_2=0,221655$, w którym model AT redukuje się do modelu Isinga, w przeciwieństwie do dużego spowolnienia ($z \approx 2,02$) algorytmu Metropolisa. Dla wszystkich analizowanych punktów diagramu fazowego wartość wykładnika krytycznego z_W obliczonego dla mojego algorytmu klastrowego jest znacznie mniejsza niż wartość z_M wyznaczona dla algorytmu Metropolisa. W niektórych przypadkach dla przemian fazowych pierwszego rodzaju otrzymałem nawet $z_W = 0$, ponieważ tam klastry z odwracanymi spinami są małe i nie rosną tak szybko jak rozmiar układu.

Dla wszystkich analizowanych punktów wzdłuż linii AP na diagramie fazowym pokazanym na rysunku 1, wykładnik krytyczny z_W obliczony dla mojego algorytmu klastrowego jest znacznie mniejszy niż ten wykładnik z indeksem M dla algorytmu Metropolisa. Komentarza wymagają również przypadki wartości ujemnych wykładników krytycznych z_{W,E_s} i z_{W,M_s} otrzymane w przedostatnim akapicie podrozdziału 5.3 w pracy R1, gdy brałem pod uwagę stosunek średniego rozmiaru klastra do rozmiaru układu wykorzystując równanie (8), co wykonałem w tym celu porównania wydajności obydwu algorytmów. Ujemna wartość wykładnika z oznacza, że do dekorrelacji $\langle E_\alpha \rangle$ oraz $\langle M_\alpha \rangle$ wystarczy mniej niż aktualizacja całej sieci. Podobny efekt zaobserwowano, gdy algorytm Wolffa zastosowano do modelu Isinga [58].

Na końcu pracy R1 poczyniłem uwagę, że wstępne wyniki uzyskane w przedmiotowym dla mojej rozprawy obszarze z $K_4 < 0$ prowadzą do podobnych wniosków. Jednak w tym obszarze sytuacja jest bardziej złożona z uwagi na fakt, że poszczególne człony w hamiltonianie (1) opisują oddziaływania ferro- i antyferromagnetyczne. Dlatego wyniki bibliograficzne dla tego rejonu diagramu fazowego są skromne. Wyniki moich dokładniejszych badań zachowania się trójwymiarowego modelu AT w tym obszarze znajdują się w kolejnych pracach mojej rozprawy R2, R3 i R4.

7.2. Wide crossover in the 3D Ashkin-Teller model [R2]

W pracy R2 skupiłem się na zbadaniu linii przemian fazowych, dla której we wcześniejszych pracach badano możliwość zachowania nieuniwersalnego w eksperymentach komputerowych MC w trójwymiarowym standardowym modelu AT. Fragment linii AHH' pokazanej na rysunku 1 został przeze mnie dokładnie zbadany. Wyniki moich eksperymentów komputerowych MC dla przemian pomiędzy fazami paramagnetyczną i Baxtera, a także obszarem faz mieszanych dla ujemnych wartości stałej sprzężenia K_4 pomiędzy sąsiednimi parami spinów σ , dotyczą najbardziej złożonego i najmniej rozpoznanego obszaru w trójwymiarowym modelu AT. Do badań wykorzystałem własności kumulant Bindera, typu Challi, a także kumulanty typu Lee-Kosterlitz po raz pierwszy w literaturze przedmiotu zaimplementowane przeze mnie do trójwymiarowego modelu AT, których własności i sposób wykorzystania objaśniłem w rozdziale 5 rozprawy. Niezależnie wykorzystałem również metodę histogramu energii wewnętrznej, którą wyjaśniłem w rozdziale 6 rozprawy. Pokazałem również rzadką koegzystencję ciągłych i nieciągłych przemian fazowych wzdłuż tej samej granicy faz dla różnych parametrów porządku układu (linia HH' na rysunku 1). Pracę zamyka konkluzja o istnieniu szerokiego efektu typu crossover, który obejmuje całą linię pomiędzy punktami trójkrytycznymi A i H, gdzie wcześniejsze prace wskazywały na możliwość nieuniwersalnego zachowania także trójwymiarowego modelu AT przy wartościach wykładników krytycznych zmieniających się w sposób ciągły.

Punkty przemian fazowych przy ustalonych wartościach stałej sprzężenia K_4 były wstępnie zlokalizowane z punktów przecięcia [50] krzywych kumulant Bindera $Q_{\alpha,L}(K_2)$. Tylko dla wystarczająco dużych rozmiarów układu L obserwowałem punkt przecięć tych krzywych podczas zbliżania się do punktu H z lewej strony na rysunku 1, co jest typowym zachowaniem w pobliżu punktu bifurkacji. Im większe są wartości L , przy których obserwowałem początek przecinania się krzywych $Q_{\alpha,L}(K_2)$, tym bliższej jest punkt bifurkacji H, który jednocześnie jest punktem trójkrytycznym. Dla $-0,08 \leq K_4 \leq 0$ obserwuję tylko jeden obszar przecięć krzywych $Q_{\alpha,L}(K_2)$, natomiast dla $K_4 < -0,08$ są dwa obszary przecięć tych krzywych, co oznacza, że punkt H na rysunku 1 jest punktem bifurkacji, który wstępnie został zlokalizowany w przedziale $-0,09 \leq K_4 \leq -0,07$.

Kluczowe znaczenie w pracy R2 miało obliczenie ciepła przemiany wzdłuż linii AHH' przedstawionej na rysunku 1. W tym celu przy użyciu regresji liniowej przeanalizowałem zależności $V_{\alpha,L}^{min}(L^{-3})$ wartości oraz $K_{2,\alpha,L}^{min}(L^{-3})$ położen charakterystycznych minimów kumulant typu Challi w funkcji K_2 przy ustalonej wartości K_4 omówione w rozdziale 5 tej rozprawy. Wartości odciętych i rzędnych minimów $V_{\alpha,L}(K_2)$ w zależności od L^{-3} odchylają się od liniowości dla wartości L mniejszych niż pewna wartość graniczna L_t [50]. Zgodnie z oczekiwaniami zaobserwowałem, że wartość L_t rośnie w miarę zbliżania się do punktu bifurkacji H. Dlatego na przykład przy $K_4 = -0,08$ wartości te są skorelowane liniowo dopiero począwszy od rozmiaru układu $L \geq 42$. Takie specyficzne zachowanie tych krzywych zaobserwowaliśmy już wcześniej dla dowolnie słabych przemian fazowych pierwszego rodzaju blisko punktu Isinga A przy $K_4 > 0$ [19]. Podobne analizy przeprowadziłem niezależnie dla kumulant typu Lee-Kosterlitz $U_{\alpha,L}$, które dają takie same wyniki jak dla kumulant typu Challi $V_{\alpha,L}$ w granicach niepewności. Warto podkreślić, że obliczenia dla kumulant $U_{\alpha,L}$ zostały przeze mnie wprowadzone do programu i użyte w badaniu modelu AT po raz pierwszy w literaturze

przedmiotu. Dla walidacji starannie sprawdziłem, że wyniki dla kumulant $U_{\alpha,L}$ są zgodne w granicach niepewności z otrzymanymi wcześniej wynikami naszych eksperymentów komputerowych opartych o kumulanty $V_{\alpha,L}$ [14,19,20].

Na podstawie precyzyjnie wyznaczonych wartości ciepła przemiany stwierdziłem, że wzdłuż tej samej linii H'H pokazanej na rysunku 1 mamy do czynienia z nieciągłą przemianą fazową dla stopni swobody $\alpha = s$ i σ , a jednocześnie ciągłą dla $\alpha = s\sigma$. Takie współlistnienie przemian fazowych nieciągłych i ciągłych dla różnych parametrów porządku wzdłuż tej samej granicy faz jest obserwowane rzadko. Warto podkreślić, że wykorzystanie skalowania położenia ekstremów zależności $V_{\alpha,L}(K_2)$ i $U_{\alpha,L}(K_2)$ do granicy termodynamicznej pozwala precyzyjnie określić położenie przejścia fazowego, tj. wartości krytycznej stałej sprzężenia K_2 . Wartości krytyczne K_2 wyznaczone na podstawie przecięć zależności kumulant Bindera $Q_{\alpha,L}(K_2)$ w granicach niepewności są zgodne z wynikami skalowania położenia ekstremów zależności $V_{\alpha,L}(K_2)$ i $U_{\alpha,L}(K_2)$ do granicy termodynamicznej.

W pracy R2 przedstawiłem również wyniki analiz histogramu rozkładu energii wewnętrznej E dla $K_4 = -0,17$. Dla stopni swobody $\alpha = s$ zaobserwowałem dwa różne piki prawdopodobieństwa $P_{\alpha,L}$, które odpowiadają energiom układu $E_{-, \alpha, L}$ i $E_{+, \alpha, L}$, odpowiednio po stronie fazy uporządkowanej i nieuporządkowanej, podczas gdy dla stopni swobody $\alpha = s\sigma$ jest tylko jeden pik. Jak wyjaśniłem w ostatnim akapicie rozdziału 2 pracy R2 oraz w rozdziale 6 rozprawy doktorskiej, potwierdza to występowanie nieciągłych i ciągłych przejść fazowych odpowiednio dla parametrów porządku $\langle s \rangle$ i $\langle s\sigma \rangle$ wzdłuż linii H'H zilustrowanej na rysunku 1. Kluczowe dla pracy R2 i dla tematyki rozprawy jest moje odkrycie, że spiny s i σ , jak też ich iloczyn $s\sigma$, mają niezerową wartość ciepła przemiany l_α w przedziale wartości $-0,08 \geq K_4 \geq -0,02$, chociaż wartość $l_\alpha = 0$ mieści się w granicach niepewności. Np. dla $K_4 = -0,06$ otrzymałem $V_{\alpha, \infty}^{min} = 0,66644(33)$, co daje $l_s = 0,006(7)$, dla $K_4 = -0,04$ otrzymałem $V_{\alpha, \infty}^{min} = 0,66655(18)$, co daje $l_s = 0,004(5)$, a dla $K_4 = -0,02$ otrzymałem $V_{\alpha, \infty}^{min} = 0,66660(15)$, co daje $l_s = 0,003(5)$, w jednostkach $k_B T$. Zwykle stopniowy zanik ciepła przemiany, czyli crossover, ogranicza się do wąskiego otoczenia punktu trójkrytycznego. Przemiany fazowe wzdłuż linii AH dla stopni swobody s i σ są formalnie klasyfikowane jako ciągłe, ale obserwujemy tutaj raczej bardzo szeroki efekt crossover wzdłuż całej linii, niż nieuniwersalne zachowanie sugerowane wcześniej na podstawie wyników symulacji MC [14,15,23]. Warto dodać, że wyniki pracy R2 zostały zweryfikowane za pomocą algorytmu klastrowego typu Wolffa opisanego wyżej w pracy R1.

7.3. The Monte Carlo Computer Experiment to Study the Order and Phase Transitions in the Mixed Phase Region Based on the Example of the 3D Ashkin-Teller Model [R3]

Praca R3 prezentuje nowe podejście do prowadzenia eksperymentów komputerowych MC w obszarze faz mieszanych. Obszar ten jest bardzo trudny do badania, gdyż ze względu na porządkowanie się układu w jednej z dwóch faz z określonym prawdopodobieństwem. Powoduje to duże oscylacje wartości obliczonych wielkości termodynamicznych, co sprawia, że ich interpretacja jest bardzo problematyczna. Swoje wyniki przedstawiłem na przykładzie trójwymiarowego modelu AT, gdzie w pewnym zakresie parametrów z równymi prawdopodobieństwami istnieją dwa różne, ale równoważne sposoby uporządkowania dwóch z

trzech parametrów porządku, które wykazują niezależne zachowanie. Zastosowanie nowego podejścia w eksperymencie komputerowym MC pozwoliło mi z powodzeniem użyć kumulant Bindera, jak również kumulant typu Challi i typu Lee-Kosterlitz, których własności i sposób wykorzystania objaśniłem w rozdziale 5 rozprawy. Umożliwiło mi to zlokalizowanie przemian fazowych na tyle dokładnie, aby móc wykorzystać metodę histogramu rozkładu energii. Zgodnie z najefektywniejszą strategią, w regionie krytycznym stosuję zaproponowany przeze mnie ostatnio algorytm klastrowy typu Wolfa i algorytm Metropolisa poza nim, które z powodzeniem można stosować w układzie z przemianami fazowymi zarówno pierwszego rodzaju, jak też ciągle przejścia fazowych [R1]. Nowe podejście zademonstrowałem poprzez wyznaczenie gładkich krzywych namagnesowania i energii wewnętrznej, a w konsekwencji poprzez określenie miejsca i charakteru przemian fazowych na granicy pomiędzy obszarem faz mieszanych a fazą paramagnetyczną (linia HK' na rysunku 1).

Dla ujemnych wartości stałej sprzężenia K_4 w trójwymiarowym modelu AT występuje obszar faz mieszanych, który zgodnie z konwencją przyjętą w literaturze oznaczyłem jako $\langle\sigma\rangle$ na rysunku 1. W obszarze $\langle\sigma\rangle$ z równym prawdopodobieństwem występują dwa różne, ale równoważne, sposoby uporządkowania dwóch z trzech wykazujących niezależne uporządkowanie parametrów: $\langle s\sigma\rangle = 0$ i tylko jeden $\langle s\rangle$ albo $\langle\sigma\rangle$ jest uporządkowany ferromagnetycznie, a drugi nie. Dla zilustrowania mojej metody zbadałem przemianę fazową w punkcie z $K_4 = -0,3$ leżącym na linii HK' .

Moja koncepcja uzyskiwania czytelnych wyników opiera się na konwencjonalnym podziale naszego układu na dwie podsieci. Uporządkowaną, którą oznaczam wielką literą Σ , i nieuporządkowaną, oznaczoną wielką literą S . Decyzja o alokowaniu rzeczywistych spinów s lub σ do jednej z tych konwencjonalnych podsieci Σ lub S jest podejmowana dopiero po wykonaniu każdego kroku MC. Wyniki dla spinów o większym namagnesowaniu są systematycznie dodawane do wyników konwencjonalnej podsieci Σ , podczas gdy wyniki z spinów drugiego rodzaju są dodawane do wyników konwencjonalnej podsieci S . Kontroluję jednocześnie, czy liczba kroków MC jest wystarczająco duża, aby zrekompensować podział układu na te dwie sztuczne podsieci Σ i S w obszarze paramagnetycznym.

Jak pokazałem poniżej, obserwuję tutaj, że wartości charakterystycznych lokalnych minimów zależności $V_{\alpha,L}(K_2)$ oraz wartości charakterystycznych maksimów lokalnych zależności $U_{\alpha,L}(K_2)$ dla $\alpha = \Sigma, S, s\sigma$ i H w granicy termodynamicznej skalują się odpowiednio do wartości $2/3$ dla minimów i do wartości 1 dla maksimów. Wskazuje to jednoznacznie na ciągły charakter przemian fazowych.

Na rysunku 2 w pracy R3 przedstawiłem zależności wartości średnich temperaturowych kwadratu namagnesowania na jeden węzeł $\langle M \rangle_{\alpha,L}^2$ od dla próbki o skończonej wielkości L^3 przy $K_4 = -0,3$ dla wszystkich trzech parametrów porządku z $\alpha = \Sigma, S$ i $s\sigma$ wskazanych w legendzie. Linia przerywana wskazuje położenie punktu przemiany fazowej $K_{2,c} = 32905(30)$ oszacowane poniżej. Przebieg tej zależności $\langle M \rangle_{\alpha,L}^2(K_2)$ wyjaśnia również przyczynę pojawiania się minimów zależności kumulant $V_{\alpha,L}(K_2)$ i maksimów zależności kumulant $U_{\alpha,L}(K_2)$ także dla $\alpha = S$ i $s\sigma$, dla których mamy fazę paramagnetyczną po obu stronach linii HK na rysunku 1. Ekstrema tych kumulant pojawiają się także dla $\alpha = S$ i $s\sigma$ ponieważ w obszarze

krytycznym widzimy tutaj niezerowe wartości namagnesowania, które jednak zanika wraz ze wzrostem rozmiaru układu L , również objaśnione w legendzie, co jest zgodne z oczekiwaniami.

Z tego wstępu wynika również, że na początku badań konieczne jest określenie miejsca przemiany fazowej zaznaczonej pionową linią przerywaną na rysunku 2 w pracy R3. Wstępne oszacowanie położenia punktu przemiany fazowej otrzymuję wielkości obszaru przecięć krzywych $Q_{\alpha,L}(K_2)$ kumulant Bindera [14,24] przy ustalonej wartości stałej sprzężenia $K_4 = -0,3$ przedstawione na rysunku 3 w pracy R3. Analiza została przeprowadzona dla parametru porządku $\langle \Sigma \rangle$, co pozwala mi oszacować trzy do czterech dziesiętnych cyfr znaczących wartości krytycznej stałej sprzężenia $K_{2,c} = 0,3274(18)$. Wykorzystuję tutaj własność opisaną w rozdziale 5 rozprawy, że tutaj krzywe $Q_{\Sigma,L}(K_2)$ przecinają się w taki sposób, że dla $L_1 < L_2$ przy $K_2 < K_{2,c}$ mamy $Q_{\Sigma,L_1} > Q_{\Sigma,L_2}$, natomiast przy $K_2 > K_{2,c}$ obserwujemy $Q_{\Sigma,L_1} < Q_{\Sigma,L_2}$. Jest to tylko przybliżone wskazanie wartości krytycznej $K_{2,c}$, a jej niepewność należy oszacować tutaj starannie, pamiętając, że wartości niepewności zaokrąglamy w górę.

Aby sprawdzić, czy występuje ciepło przemiany i aby poprawić oszacowanie lokalizacji przemiany fazowej, wykorzystuję własności kumulant typu Challi $V_{\alpha,L}$ i typu Lee-Kosterlitz $U_{\alpha,L}$. Najpierw starannie wyznaczam wartości i położenia minimów zależności kumulant $V_{\alpha,L}(K_2)$ oraz wartości i położenia maksimów zależności kumulant $U_{\alpha,L}(K_2)$. Następnie wyznaczam ich wartości w granicy termodynamicznej przy użyciu regresji liniowej z zależności $V_{\alpha,L}^{min}(L^{-3})$, $U_{\alpha,L}^{min}(L^{-3})$, $K_{2,\alpha,L}^{min}(L^{-3})$ oraz $K_{2,\alpha,L}^{max}(L^{-3})$ z $\alpha = \Sigma$ i H , co wynika odpowiednio z równań (12) i (13) w rozdziale 5 rozprawy. W wyniku tych ekstrapolacji do granicy termodynamicznej otrzymałem wartości dla $V_{\Sigma,\infty}^{min}$ oraz $V_{H,\infty}^{min}$, w granicach niepewności których mieści się wartość graniczna $2/3$. Podobnie w granicach niepewności wartości dla $U_{\Sigma,\infty}^{max}$ oraz $U_{H,\infty}^{max}$ mieści się wartość graniczna 1. To oznacza, że wartość ciepła tej przemiany fazowej wynosi zero. Natomiast wyniki ekstrapolacji do granicy termodynamicznej położenia minimów zależności kumulant $V_{\alpha,L}(K_2)$ oraz maksimów zależności kumulant $U_{\alpha,L}(K_2)$, mianowicie wartości $K_{2,\Sigma,\infty}^{min}$ i $K_{2,H,\infty}^{min}$ oraz $K_{2,\Sigma,\infty}^{max}$ i $K_{2,H,\infty}^{max}$, pozwoliły mi oszacować z dużą precyzją krytyczną wartość $K_{2,c} = 0,32905(30)$ przy $K_4 = -0,3$.

Dla weryfikacji tych wyników, niezależnie obliczyłem również prawdopodobieństwo $P_{\alpha,L}$ występowania energii wewnętrznej $E_{\alpha,L}$ w układach o skończonej wielkości L^3 . Podobnie jak dla kumulant, wartości $P_{\alpha,L}(E_{\alpha,L})$ obliczane są niezależnie dla stopni swobody $\alpha = \Sigma$, a także dla całego hamiltonianu (1) wskazane przez $\alpha = H$, przy wystarczająco dokładnie obliczonej wartości krytycznej $K_{2,c} = 0,32905(30)$. Otrzymane przeze mnie histogramy rozkładu energii $E_{\alpha,L}$ zawierają tylko jeden pik w wąskim obszarze krytycznym dla $\alpha = \Sigma$ i H . To jednoznacznie potwierdza, że przy $K_4 = -0,3$ zachodzi ciągła przemiana fazowa.

Otrzymane przeze mnie wyniki dla konwencjonalnych stopni swobody Σ i S , pozwalają mi opisać ilościowo przemianę fazową na granicy obszaru faz mieszanych, w którym występują dwie równo prawdopodobne fazy: jedna z $\langle s \rangle = 0$ i $\langle \sigma \rangle \neq 0$ oraz druga z $\langle s \rangle \neq 0$ i $\langle \sigma \rangle = 0$. Podobne zachowanie obserwuję wzdłuż całej linii HK' przedstawionej na rysunku 1 rozprawy.

Podsumowując, w pracy R3 zademonstrowałem sposób wykonania naszych niedawno opublikowanych eksperymentów MC [21] w obszarze faz mieszanych, który jest trudny do badania dotychczas stosowanym klasycznym sposobem prowadzenia symulacji MC, gdyż z

pewnymi prawdopodobieństwami występują tutaj różne sposoby uporządkowania, co skutkuje dużymi oscylacjami wartości obliczanych wielkości termodynamicznych. Moją metodę przedstawiłem na przykładzie punktu z $K_4 = -0,3$ na granicy obszaru faz mieszanych „ $\langle\sigma\rangle$ ” i fazy paramagnetycznej na diagramie fazowym trójwymiarowego modelu AT pokazanego na rysunku 1 rozprawy. Jednak ta metoda może być z powodzeniem stosowana do innych modeli spinowych, których diagram fazowy zawiera obszar faz mieszanych.

W przeciwieństwie do wyników publikowanych dotychczas w literaturze, wdrożenie mojego nowego podejścia w eksperymencie komputerowym MC pozwoliło użyć z powodzeniem kumulant Bindera, kumulant typu Challi i typu Lee-Kosterlitz, a także histogramu rozkładu energii wewnętrznej w celu uzyskania gładkich zależności, bez oscylacji, w obszarze faz mieszanych. Zgodnie z najskuteczniejszą strategią, którą przedstawiłem w pracy R1, w obszarze krytycznym wykorzystuję niedawno zaproponowany przeze mnie klasterowy algorytm MC typu Wolffa i algorytm Metropolisza poza obszarem krytycznym. Metoda ta jest odpowiednia zarówno dla nieciągłych, jak też ciągłych przemian fazowych.

7.4. The behavior of the three-dimensional Ashkin-Teller model at the mixed phase region by a new Monte Carlo approach [R4]

Moje nowe podejście do wykonywania symulacji MC, opisane w pracy R3, z powodzeniem użyłem w pracy R4. Dzięki tej nowej metodzie mogłem wykorzystać gładkie zależności, bez oscylacji występujących przy dotychczas stosowanym klasycznym sposobie prowadzenia symulacji MC, namagnesowania i energii wewnętrznej, kumulant Bindera, kumulant typu Challa i typu Lee-Kosterlitz, jak również histogram rozkładu energii wewnętrznej. Ta metodologia posłużyła mi do jednoznacznego wykazania istnienia dwóch różnych punktów trójkrytycznych K i K' , co jest zgodne z wynikami uzyskanymi wcześniej i punktu bifurkacji K_b , co było kwestionowane we wcześniejszych pracach. Punkty te są przedstawione w lewej części diagramu fazowego na rysunku 1 rozprawy. Linia K_bE jest granicą pomiędzy obszarem faz mieszanych, oznaczonym jako „ $\langle\sigma\rangle$ ”, a fazą antyferromagnetyczną oznaczoną jako „ $\langle s\sigma\rangle_{AF}$ ”, w której tylko parametr porządku $\langle s\sigma\rangle$ ma wartości różne od zera. Linia $K_bK'H$ oddziela obszar faz mieszanych od fazy paramagnetycznej, a linia K_bKD jest granicą pomiędzy fazami paramagnetyczną i antyferromagnetyczną „ $\langle s\sigma\rangle_{AF}$ ”. Dzięki zastosowaniu mojej metody mogłem dokładnie określić lokalizację punktów K_b , K i K' .

Innym moim ciekawym wynikiem w pracy R4 jest pokazanie, że chociaż układ jako całość nie wykazuje obecności ciepła ukrytego na granicy obszaru fazy mieszanej i fazy antyferromagnetycznej (linia K_bE), to ciepło przemiany występuje dla różnych parametrów porządku. W szczególności wzrostowi energii wewnętrznej jednego rodzaju stopni swobody towarzyszy taki sam spadek energii wewnętrznej stopni swobody innego rodzaju. Uzasadniając ilościowo ten wniosek, najbardziej precyzyjne wyniki uzyskałem z analizy histogramu rozkładu energii $P_{\alpha,L}(E_{\alpha,L})$, który został przedstawiony na rysunku 6 w pracy R4 dla stałej sprężenia $K_4 = -0,376$ oraz rozmiaru układu $L = 40$. Wartość krytyczna stałej sprężenia $K_{2,c} = 0,375999(31)$ wyznaczona z analiz zachowania się kumulant jest przedstawiona pionową linią przerywaną. Z moich analiz wynika, że $l_{s\sigma} = 0,090(10)$, $l_{\Sigma} = 0,086(5)$, obie te wartości są zgodne w granicach niepewności pomiarowych. Ze względu na przeciwny kierunek zmian energii wewnętrznej iloczynu $s\sigma$ i konwencjonalnych stopni swobody Σ podczas tej przemiany

fazowej, spadkowi wartości tego pierwszego ciepła przemiany towarzyszy wzrost wartości tego ostatniego, a całkowita zmiana energii całego systemu wynosi 0,004(15), która w granicach niepewności jest zgodna z zerem. Dlatego nie zaobserwowałem ciepła przemiany nie tylko dla konwencjonalnych stopni swobody S , ale także dla układu jako całości, ciepło przemiany l_H wynosi zero. Ilustruje to rysunek 6 w pracy R4, gdzie dla $\alpha = S$ i H widzimy pojedyncze piki prawdopodobieństwa $P_{\alpha,L}$. Jak wyjaśniłem w rozdziale 6 rozprawy, obecność pojedynczych pików prawdopodobieństwa wystąpienia energii wskazuje na brak ciepła przemiany podczas przemiany fazowej. Wyniki uzyskane metodą histogramu wewnętrznego rozkładu energii są zgodne w granicach niepewności z wynikami określonymi za pomocą kumulant V i U .

Wynika stąd, że mój nowy sposób wykonywania eksperymentu komputerowego MC, którego istota została wyjaśniona w pracy R3, zostały z powodzeniem wykorzystane w celu zbadania przemian na granicach obszaru faz mieszanych z fazą paramagnetyczną i fazą antyferromagnetyczną „ $\langle s \sigma \rangle_{AF}$ ”. Wyniki moich eksperymentów komputerowych wyraźnie potwierdzają, że w obszarze faz mieszanych „ $\langle \sigma \rangle$ ” w trójwymiarowym modelu AT istnieją dwie równo prawdopodobne fazy, w których albo parametr porządku $\langle s \rangle$, albo $\langle \sigma \rangle$ jest ferromagnetycznie uporządkowany, a drugi z nich nie.

Wykonując eksperymenty komputerowe MC dla zbadania przemian fazowych wzdłuż granicy przedmiotowego obszaru faz mieszanych $HK'K_bE$ (zobacz rysunek 1 rozprawy), stosowałem najskuteczniejszą strategię wskazaną przeze mnie w pracy R1. Mianowicie w obszarze krytycznym wykorzystywałem niedawno zaproponowany przeze mnie w pracy R1 algorytm klastrowy MC oraz algorytm Metropolisia poza obszarem krytycznym. Przy tym obydwie te algorytmy są odpowiednie zarówno do badania nieciągłych przemian fazowych, jak również ciągłych. Należy jednak zauważyć, że również zbadana w pracy R4 sąsiednia linia przemian fazowych KK_b jest poza zakresem stosowalności naszego algorytmu klastrowego typu Wolffa określonego w pracy R1 jako $|K_4| < K_2$ (zobacz również [41, 47, 48]). Zademonstrowałem moją metodę na granicy obszaru faz mieszanych „ $\langle \sigma \rangle$ ”, gdzie istnieje tylko kilka wstępnych wyników bibliograficznych [14, 23]. Warto tutaj wspomnieć, że przedmiotowy model AT jest ważnym punktem odniesienia w fizyce statystycznej. Jednak zaproponowana w pracy R4 moja metoda może być stosowana do innych spinowych modeli sieciowych, których diagram fazowy zawiera obszar faz mieszanych.

Ponieważ dla konwencjonalnych stopni swobody Σ i S zbierane są wkłady z obydwu jednakowo prawdopodobnych faz: jednej z $\langle s \rangle = 0$ i $\langle \sigma \rangle \neq 0$ oraz drugiej z $\langle s \rangle \neq 0$ i $\langle \sigma \rangle = 0$, zatem pokazałem, że przemiany fazowe dla $K_4 \leq -0,36$ są ciągłe. Moje wyniki dowodzą, że ciągłe przemiany fazowe kończą się w punktach trójkrytycznych K o współrzędnych $(-0,360(1), 0,35951(11))$ i K' ze współrzędnymi $(-0,360(1), 0,36110(12))$ na diagramie fazowym (K_4, K_2) na rysunku 1 rozprawy. Te wartości są zgodne z uzyskanymi wcześniej [14], ale są dokładniejsze. Uzyskałem jednoznaczne potwierdzenie, że dla wartości $K_4 < -0,36$ w układzie zachodzą nieciągłe przemiany fazowe. Wstępne wyniki Ditzian i in. [23] wskazują na istnienie pojedynczego punktu K , na lewo od którego przebiega granica pomiędzy fazą antyferromagnetyczną „ $\langle s \sigma \rangle_{AF}$ ”, a obszarem faz mieszanych „ $\langle \sigma \rangle$ ”. Z kolei wyniki Musiała i in. [14] już wskazały na istnienie dwóch różnych punktów trójkrytycznych K i K' z liniami przemian fazowych KE i $K'E$ asymptotycznie zbliżającymi się do siebie po obu stronach linii $K_2 = K_4$. Jednakże moje wyniki w pracy R4 jednoznacznie wskazują na istnienie punktu

bifurkacji K_b , a jego współrzędne to $(-0,371(1), 0,37103(12))$. Dla $K_4 < -0,37$ faza antyferromagnetyczna „ $\langle s\sigma \rangle_{AF}$ ” i obszar faz mieszanych „ $\langle \sigma \rangle$ ” są oddzielone linią K_bE .

Przedstawione wyniki dowodzą również, że aby wyjaśnić zachowanie złożonego modelu z wieloma zachowującymi się niezależnie parametrami porządku, jak model AT, nie wystarczy obliczyć ciepło przemiany całego systemu, ale aby w pełni zrozumieć zachowanie systemu, konieczne jest rozważenie indywidualnych wkładów do tego ciepła pochodzących od różnych stopni swobody. Na poparcie tej tezy odkryłem i wyjaśniłem, że chociaż układ jako całość nie wykazuje obecności ciepła przemiany wzdłuż linii K_bE , to ciepło to występuje dla różnych parametrów porządku i wzrostowi tej energii stopni swobody Σ w obszarze faz mieszanych „ $\langle \sigma \rangle$ ”, czyli s oraz σ , towarzyszy równy co do wartości spadek tej energii dla iloczynu $s\sigma$ po stronie fazy „ $\langle s\sigma \rangle_{AF}$ ”.

8. Podsumowanie

Prace R1, R2, R3 i R4 składające się na niniejszą rozprawę doktorską przedstawiają wyniki moich badań uporządkowania w obszarze faz mieszanych oraz weryfikację nieuniwersalnego zachowania w trójwymiarowym modelu AT wraz komplementarnymi metodami, które obejmują wszystkie aspekty założone przy otwarciu mojego przewodu doktorskiego, jak również zawarte w tytule rozprawy. Jest to jeden z podstawowych modeli w fizyce statystycznej, jest stosowany do opisu wielu zjawisk, a także jest wiele odwzorowań pomiędzy tym modelem a innymi modelami fizycznymi.

Największym wyzwaniem na początku moich badań był poważny brak wiarygodnych narzędzi do zbadania tego najmniej poznanego obszaru na diagramie fazowym trójwymiarowego modelu AT, gdzie współistnieją sprzężenia ferro- i antyferromagnetyczne. W programie komputerowym, który otrzymałem do dyspozycji, używany był algorytm Metropolis obarczony dużym spowolnieniem krytycznym, a dodatkowo w literaturze ukazały się wyniki badań, które wykazały istnienie stanów metastabilnych w tym modelu. Stany te mogą istotnie wpływać na wyniki obliczeń numerycznych, zwłaszcza uzyskiwanych za pomocą algorytmu Metropolis. Niestety, w literaturze brak było pozbawionego tej wady algorytmu klastrowego dla modelu AT, poza algorytmem typu Swendsena-Wanga zaimplementowanego tylko w dwuwymiarowym modelu AT, który tylko w pewnym stopniu ograniczył spowolnienie krytyczne. W tej sytuacji w celu walidacji wyników uzyskanych wcześniej przy pomocy algorytmu Metropolis w pracy R1 pod kierunkiem mojego promotora skonstruowałem, zastosowałem do trójwymiarowego modelu AT w obszarach z przemianami nieciągłymi i ciągłymi oraz starannie przetestowałem klastrowy algorytm bazujący na idei Jula Wolffa. Także metoda histogramu rozkładu energii została przeze mnie po raz pierwszy wykorzystana z użyciem algorytmu klastrowego w trójwymiarowym modelu AT. W celu uzyskiwania precyzyjnych wyników ekstrapolacji do granicy termodynamicznej starałem się otrzymywać wyniki dla możliwie największych rozmiarów układu i aby uzyskać wyniki w rozsądnym czasie. W programie wykorzystywałem przetwarzanie równoległe oparte o bibliotekę MPI. W tym celu zastosowałem nowy 64-bitowy generator liczb pseudolosowych oraz dodałem parametr umożliwiający zainicjowanie tego generatora na bazie aktualnego czasu i numeru

równoległego procesu. Był to niezbędny element do zrównoleżenia przetwarzania w programie, aby wyniki ze współbieżnie wykonywanych procesów były statystycznie niezależne. Natomiast do przetwarzania tysięcy plików moich wyników przygotowałem skrypty w języku powłoki bash, co istotnie przyspieszyło analizy tych wyników nie tylko mnie, ale całemu zespołowi.

Wyniki moich badań w pracy R2 obejmują linię przemian fazowych AHH'I na rysunku 1 rozprawy i wykazały istnienie szerokiego efektu typu crossover, który obejmuje całą linię pomiędzy punktami trójkrytycznymi A i H, gdzie wcześniejsze prace literaturowe wskazywały na ciągłe przemiany fazowe z możliwością nieuniwersalnego zachowania także trójwymiarowego modelu AT przy wartościach wykładników krytycznych zmieniających się w sposób ciągły. Wykazałem również rzadko spotykaną koegzystencję ciągłych i nieciągłych przemian fazowych wzdłuż tej samej granicy faz dla różnych parametrów porządku HH' oraz podałem precyzyjną lokalizację tych punktów trójkrytycznych. Wzbogaciłem też program o nowe narzędzie badawcze w postaci zaimplementowania kumulant typu Lee-Kosterliza.

W kolejnych pracach R3 i R4 badając linię przemian fazowych HK'K_bE na rysunku 1 rozprawy zaproponowałem nowe podejście do wykonywania symulacji MC eliminujące obserwowane przeze mnie wcześniej duże oscylacje wartości wielkości termodynamicznych dla obszaru faz mieszanych, gdzie wyniki teorii pola średniego przewidują, że z równymi prawdopodobieństwami występują dwa różne sposoby uporządkowania dwóch rodzajów stopni swobody, których istnienie jednoznacznie potwierdziłem w moich symulacjach. Obecność tych oscylacji sprawiała, że interpretacja wyników była bardzo problematyczna. Idea mojego nowego podejścia została przedstawiona na przykładzie przemian z fazy paramagnetycznej do obszaru faz mieszanych w pracy R3. Metodologia wypracowana w pracach R3 i R4 pozwoliła mi na weryfikację dotychczas uzyskanych wyników odnośnie ciągłego charakteru przemian fazowych wzdłuż linii HK' i istnienia dwóch punktów trójkrytycznych K i K' w tym rejonie, dla których podałem precyzyjniejsze lokalizacje. Całkowicie nowym wnioskiem jest istnienie punktu bifurkacji K_b, dla którego również podałem precyzyjną lokalizację.

Uzyskane przeze mnie wyniki jasno dowodzą, że aby wyjaśnić zachowanie złożonego modelu z wieloma zachowującymi się niezależnie parametrami porządku, jak model AT, nie wystarczy badać ciepło przemiany całego układu. Aby w pełni zrozumieć zachowanie układu. Konieczne jest rozważenie indywidualnych wkładów do tego ciepła pochodzących od różnych stopni swobody. Na poparcie tej tezy odkryłem i wyjaśniłem, że chociaż układ jako całość nie wykazuje obecności ciepła przemiany wzdłuż linii K_bE, to ciepło to występuje dla różnych parametrów porządku i wzrostowi tej energii konwencjonalnych stopni swobody Σ w obszarze faz mieszanych „ $\langle\sigma\rangle$ ”, czyli s oraz σ , towarzyszy równy co do wartości spadek tej energii dla iloczynu $s\sigma$ po stronie fazy antyferromagnetycznej „ $\langle s\sigma\rangle_{AF}$ ”.

Potwierdzeniem istotnego znaczenia uzyskanych przeze mnie wyników jest systematycznie rosnąca liczba cytowań prac tworzących rozprawę w renomowanych czasopismach naukowych przez uznane autorytety w dziedzinie fizyki statystycznej i obliczeniowej. Wypracowane przeze mnie metody mogą być stosowane do badania innych spinowych układów sieciowych. W szczególności planuję wykorzystanie tych metod do zbadania nieuniwersalnego zachowania w dwuwymiarowym modelu AT.

Literatura

- [1] Ü. Akinci, Phys. A **469**, 740 (2017)
- [2] S.-P. Li, Z.-H. Sun, Phys. Rev. A **98(2)**, 022317 (2018)
- [3] J.P. Santos, J.A.J. Avila, D.S. Rosa, J. Francisco, J. Magn. Magn. Mater. **469**, 35 (2019)
- [4] G. Delfino, N. Lamsen, J. Phys. A **52(35)**, 35LT02 (2019)
- [5] P. Patil, A.W. Sandvik, Phys. Rev. B **101(1)**, 014453 (2020)
- [6] A. Benmansour, S. Bekhechi, B.N. Brahmi, N. Moussa, H. Ez-Zahraouy, J. Magn. Magn. Mater. **511**, 166944 (2020)
- [7] S.S. Lee, S.S., B.J. Kim, Phys. Rev. E **99(4)**, 043308 (2019)
- [8] G.-Y. Zhu, G.-Y. Zhang, Phys. Rev. Lett. **122(17)**, 176401 (2019)
- [9] J. P. Santos, D. S. Rosa, F. C. Sá Barreto, Phys. Lett. A **382**, 272 (2018)
- [10] J. P. Santos, F. C. Sá Barreto, Braz. J. Phys. **46**, 70 (2016)
- [11] J. Ashkin, E. Teller, Phys. Rev. **64**, 178 (1943)
- [12] G. Musiał, Phys. Stat. Sol. B **236**, 486 (2003)
- [13] G. Musiał, L. Dębski, G. Kamieniarz, Phys. Rev. B **66**, 012407 (2002)
- [14] G. Musiał, Phys. Rev. B **69**, 024407 (2004)
- [15] G. Musiał, J. Rogiers, Phys. Stat. Sol. B **243**, 335 (2006)
- [16] G. Szukowski, G. Kamieniarz, G. Musiał, Phys. Rev. E **77**, 031124 (2008)
- [17] G. Musiał, L. Dębski, D. Jeziorek-Knioła, K. Gołąb, Lect. Notes in Comp. Sci. **4967**, 429 (2008)
- [18] D. Jeziorek-Knioła, G. Musiał, L. Dębski, J. Rogiers, and S. Dylak, Acta Phys. Polon. A **21121**, 1105 (2012)
- [19] D. Jeziorek-Knioła, G. Musiał, Z. Wojtkowiak, Acta Phys. Polon. A **127**, 327 (2015)
- [20] D. Jeziorek-Knioła, Z. Wojtkowiak, G. Musiał, Acta Phys. Polon. A **133(3)**, 435 (2018)
- [21] G. Musiał, D. Jeziorek-Knioła, Z. Wojtkowiak, Phys. Rev. E **103**, 062124 (2021)
- [22] U. Wolff, Phys. Rev. Lett. **62**, 361 (1989)
- [23] R. V. Ditzian, J. R. Banavar, G. S. Grest and L. P. Kadanoff, Phys. Rev. B **22**, 2542 (1980)

- [24] R. J. Baxter, *Exactly Solvable Models in Statistical Mechanics*, Academic Press, London (1982)
- [25] C. Fan, *Phys. Lett. A* **39**, 136 (1972)
- [26] C. Naon, *Phys. Rev. E* **79**, 051112 (2009)
- [27] F.A.P. Piolho, F.A. da Costa, C.G. Bezerra, A.M. Mariz, *Phys. A* **387**, 1538 (2008)
- [28] M. S. Grønsløth, T. B. Nilssen, E. K. Dahl, E. B. Stiansen, C. M. Varma, A. Sudbo, *Phys. Rev. B* **79**, 094506 (2009)
- [29] H. A. Fernandes, R. da Silva, A. A. Caparica, J. R. Drugowich de Felício, *Phys. Rev. E* **95**, 042105 (2017)
- [30] P. Arnold and Y. Zhang, *Nuclear Phys. B* **501**, 803 (1997)
- [31] S. Jang, J. S. Lee, S. Hwang, and B. Kahng, *Phys. Rev. E* **92**, 022110 (2015)
- [32] M. E. J. Newman and G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (Oxford University Press, Oxford, 1999)
- [33] T. Preisab, P. Virnau, W. P. Johannes, J. Schneidera, J. L. Lebowit, *Journ. of Comp. Phys.* **228**, 4468 (2009)
- [34] Y. Komura, Y. Okabe, *Journ. of Comp. Phys.* **231**, 1209 (2012)
- [35] T. A. Kampmann, H.-H. Boltz, J. Kierfel, *Journ. of Comp. Phys.*, **281**, 864 (2015)
- [36] R. H. Swendsen and J. S. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 86 (1987)
- [37] S. Sinha and S. K. Roy, *Phys. Rev. E* **81**, 022102 (2010)
- [38] A. K. Murtazaev and A. B. Babaev, *J. Magn. Magn. Mater.* **324**, 3870 (2012)
- [39] J. Salas and A. D. Sokal, *J. Stat. Phys.* **85**, 297 (1996)
- [40] D. Kandel and E. Domany, *Phys. Rev. B* **43**, 8539 (1991)
- [41] S. Wiseman and E. Domany, *Phys. Rev. E* **48**, 4080 (1993)
- [42] S. Wiseman and E. Domany, *Phys. Rev. E* **51**, 3074 (1995)
- [43] K. Oerding, H.K. Janssen, *J. Phys. A* **28**, 4271 (1995)
- [44] P. D. Coddington, C. F. Baillie, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 962, (1992)
- [45] D. Ivaneykoa, J. Ilnytskyib, B. Berchec, Yu. Holovatchabd, *Phys. A* **370**, 163, (2006)
- [46] P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche, W. Janke, *Eur. Phys. J. B* **38**, 463, (2004)

- [47] D. Bonn, J. Eggers, J. O. Indekeu, J. Meunier, and E. Rolley, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 739 (2009)
- [48] J. Indekeu (2010). *Physica A* **389** (20), 4332-4359.
- [49] Xu X., Vereecke G., Chen C., Pourtois G., Armini S., Verellen N., Tsai W., Kim D., Lee E., Lin C., Van Dorpe P., Struyf H., Holsteys F., Moshchalkov V., Indekeu J., De Gendt S., *ACS Nano* **8** (1), 885 (2014)
- [50] M. S. S. Challa, D. P. Landau, K. Binder, *Phys. Rev. B* **34**, 1841 (1986)
- [51] J. Lee, J. M. Kosterlitz, *Phys. Rev. B* **43**, 3265 (1991)
- [52] A. M. Ferrenberg, R. H. Swendsen, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2635 (1988)
- [53] M. L. Trobo, E. V. Albano, and K. Binder, *Phys. Rev. E* **90**, 022406 (2014)
- [54] K. Binder, D. Landau, M. J. Müller, *Stat. Phys.* **110**, 1411–1514 (2003)
- [55] J. Lee, J. M. Kosterlitz, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 137 (1990)
- [56] X.-T. Wu, D. B. Abraham, J. O. Indekeu *Phys. Rev. Lett.* **116**, 046101 (2016)
- [57] S. Aouini, S. Ziti, H. Labrim, L. Bahmad, *Solid State Communications* **241**, 14 (2016)
- [58] E. V. Albano, L. Luque, M. L. Trobo, and K. Binder *Phys. Rev. E* **95**, 022801 (2017)

Pełny tekst publikacji składających się na rozprawę

R1. Zbigniew Wojtkowiak, Grzegorz Musiał

Cluster Monte Carlo method for the 3D Ashkin–Teller model

Journal of Magnetism and Magnetic Materials **500**, 166365 (2020);

DOI: doi.org/10.1016/j.jmmm.2019.166365

R2. Zbigniew Wojtkowiak, Grzegorz Musiał

Wide crossover in the 3D Ashkin–Teller model

Physica A: Statistical Mechanics and its Applications **513**, 104 (2019);

DOI: doi.org/10.1016/j.physa.2018.08.166

R3. Zbigniew Wojtkowiak, Grzegorz Musiał

The Monte Carlo Computer Experiment to Study the Order and Phase Transitions in the Mixed Phase Region Based on the Example of the 3D Ashkin-Teller Model

Computational Methods in Science and Technology **7(3)**, 129 (2021);

DOI:doi.org/10.12921/cmst.2021.0000019

R4. Zbigniew Wojtkowiak, Grzegorz Musiał

Experiment The Behavior of the Three-Dimensional Askin–Teller Model at the Mixed Phase Region by a New Monte Carlo Approach

Journal of Statistical Physics **189**, 3 (2022);

DOI:doi.org/10.1007/s10955-022-02964-w



Contents lists available at ScienceDirect

Journal of Magnetism and Magnetic Materials

journal homepage: www.elsevier.com/locate/jmmm

Research articles

Cluster Monte Carlo method for the 3D Ashkin–Teller model

Zbigniew Wojtkowiak*, Grzegorz Musiał

Faculty of Physics, Adam Mickiewicz University, ul. Uniwersytetu Poznańskiego 2, 61-614 Poznań, Poland



ARTICLE INFO

Keywords:

Monte Carlo method
 Cluster algorithm
 Critical behavior
 Phase transitions
 Lattice spin systems
 3D Ashkin–Teller model

ABSTRACT

This paper presents a cluster Monte Carlo method suitable for both, the first- and the second-order phase transitions in the 3D Ashkin–Teller (AT) model. A cluster algorithm is necessary to verify correctness of the results obtained so far using Metropolis algorithm exhibiting significant critical slowing down. Moreover, metastable states have recently been investigated in this model which can affect the results, especially obtained using the Metropolis algorithm. Our Wolff type algorithm is described and its dynamic critical behavior is demonstrated. Our computer experiments exploit the properties of Binder and Challa cumulants and additionally the one proposed by Lee and Kosterlitz, the last two adapted by us to give clear results for the AT model. The energy distribution histogram method is also independently applied for the first time for the 3D AT model using the Wolff type algorithm. For validation of the previous results and of our algorithm, it is demonstrated that the results of our computations along the line between Ising and Potts points, which are rescaled to their thermodynamic limits, are consistent with those obtained using the Metropolis algorithm. It is also shown that the presented cluster algorithm of the Wolff type significantly reduces the problem of critical slowing down for the 3D AT model, and the dynamic critical exponent reaches values close to zero. As the best strategy, it is suggested to use the cluster algorithm in the critical region and the Metropolis one beyond.

1. Introduction

The lattice Ashkin–Teller (AT) model [1] is one of the most important in statistical physics and every year a dozen works are devoted to it as it has got a rich phase diagram containing first order and continuous phase transitions, many tricritical points, and interesting mixed phase region. It follows from the fact that it is non-trivial generalization of the widely applicable Ising model. This model is very important from the theoretical point of view because there are some mappings between the AT model and other physical models and it has got a number of interesting practical applications and is used to describe many phenomena, such as the absorption of Se compound on Ni surface, chemical interactions in metal alloys, thermodynamic properties of superconducting cuprates, magnetic properties of nanotubes, elastic response of DNA molecule to external forces and torque, neural networks and development of the early Universe (see e.g. [2–6] and the papers cited therein). It also finds applications outside of physics, for example, to study the process of forming opinions in social networks with the effect of interdependence between various social communities which are modelled using Ising models placed on different planes [7].

The interest in the AT model substantially increased after Fan's work [8] expressing this model in terms of two independent Ising

models. We denote their degrees of freedom by s and σ . Each of these Ising models is put on the same lattice with both spins s_i and σ_i residing on the same lattice site i but these spins s_i and σ_i do not interact directly. Only two-spin interactions of the constant magnitude J_2 between the nearest neighbors of the same species are non-zero. These two Ising models are extended to the AT one by introducing the four-spin interaction of the constant magnitude J_4 also only between couples of $s\sigma$ nearest-neighboring spins. Thus, one obtains the following effective Hamiltonian H [8]

$$-\frac{H}{k_B T} = \sum_{[i,j]} \left\{ K_2 \left(s_i s_j + \sigma_i \sigma_j \right) + K_4 s_i \sigma_i s_j \sigma_j \right\}. \quad (1)$$

Here summation is taken over pairs $[i, j]$ of the nearest-neighboring lattice sites, $K_i = -J_i/k_B T$, with $i = 2$ or 4 , as defined above, k_B is the Boltzmann constant, and T is the system temperature. We consider here the standard AT model in 3D put on the cubic lattice.

The research done for this model and its applications can be found in many papers, e.g. [2,3,9–14]. The AT model is characterized by a complex and interesting $K_2(K_4)$ phase diagram shown in Fig. 1, as besides the thermal averages $\langle s \rangle$ and $\langle \sigma \rangle$ also $\langle s\sigma \rangle$ can order independently all forming three components of the order parameter.

The Monte Carlo (MC) cluster algorithms were used to study the

* Corresponding author.

E-mail address: zbigniew.wojtkowiak@amu.edu.pl (Z. Wojtkowiak).

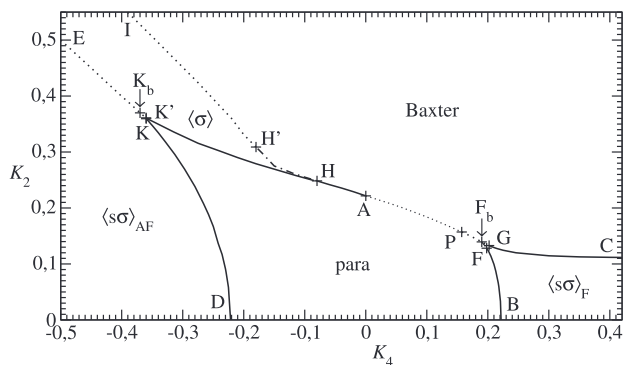


Fig. 1. The phase diagram of the 3D AT model on a cubic lattice – the present state of knowledge. The dotted curves denote the 1st order phase transitions, the solid ones stand for continuous transitions and the dotted-broken one indicates transitions of both types for different components of the order parameter. In the phase labeled “Baxter” the system is ferromagnetically ordered with all order parameter components $\langle s \rangle$, $\langle \sigma \rangle$ and $\langle s \sigma \rangle$ nonzero, whereas in the phase labeled “para” they all are zero. In the phases “ $\langle s \sigma \rangle_F$ ” and “ $\langle s \sigma \rangle_{AF}$ ” there is $\langle s \rangle = \langle \sigma \rangle = 0$, and only the component $\langle s \sigma \rangle$ is ferromagnetically and anti-ferromagnetically ordered, respectively. For the phase “ $\langle \sigma \rangle$ ” called the mixed phase region $\langle s \sigma \rangle = 0$ and either $\langle s \rangle$ or $\langle \sigma \rangle$ is ferromagnetically ordered but the other is not. The positions of labeled points inside the phase diagram are marked by + and A, F, G, H, H', K, K' are the tricritical points.

first-order phase transitions [15,16] and the continuous ones [17–20] for systems with one independent component of an order parameter. The more complicated cases in the bibliography deal the 2D AT model, which was studied by Salas and Sokal [21] and by Kandel, Wiseman and Domany [22–24] using cluster algorithms based on the freeze-delete scheme and on adding more spins to the cluster using the Swendsen-Wang (SW) like algorithm [17]. Our computer experiments exploit the properties of Binder, Challa, and Lee-Kosterlitz cumulants, the last two adapted by us to compute the latent heat not only of the whole system, but also to calculate the contribution from each kind of degrees of freedom separately. In this paper, we also check the suitability of our cluster algorithm for determining the latent heat using the energy distribution histogram method [25] originally adapted by us for the first time for this model but with the use of the Metropolis algorithm [26].

Unfortunately, until now the 3D AT model has been studied using only the Metropolis algorithm showing a significant critical slowing down which may affect the results. Moreover, metastable states have recently been investigated in this model [2] which may also affect the results, especially obtained using the Metropolis algorithm. Therefore, the main goal of this paper is not to construct a more efficient algorithm, but above all having smaller constraints than the Metropolis algorithm, although in the critical region our cluster algorithm is more effective. This is important because it allows us to check whether the results, which have been received so far using the Metropolis algorithm (see e.g. [9–12,14,27] and the papers cited therein), are not subject to significant errors due to the critical slowing down or to the presence of metastable and unstable states.

Thus, the main aim of this paper is to present our cluster MC method for the first time adapted for the 3D AT model. We demonstrate the dynamic critical behavior of our algorithm which is of Wolff type [18]. For its validation we show the consistency of its results with those obtained using the Metropolis algorithm along the line between Ising A and Potts P points (see Fig. 1). We demonstrate that this cluster method is applicable at any amount of latent heat both, in a system with a single independent order parameter, like the Ising and the Potts models, and also with a multicomponent order parameter where these components can order independently. Our computer experiments are carried out not only in a critical regions, but also in the vicinity of tricritical points,

which are much more difficult to analyze.

Thus, in the next section we propose the large-scale MC computer experiment in which we determine the type of a phase transition and its precise location including the uncertainty, using our cluster algorithm. In Section 3 we describe the steps of our cluster algorithm which substantially reduces the value of the critical exponent compared to the version of Wiseman and Domany [23,24] and in Section 4 we present the method of measurement of the autocorrelation function and of the critical exponent z for both algorithms in order to justify the efficiency. The last section demonstrates the efficiency and validity of our cluster method, the latter by comparing our results in the thermodynamic limit for both algorithms: the cluster and the Metropolis one.

2. The Monte Carlo experiment

Performing our MC experiment, we consider finite-size cubic samples of the standard AT model defined in Hamiltonian (1) to be able to obtain the thermodynamic limit of our results. The number of degrees of freedom in our system is far too large to take into account all the states of the system. Thus, we use tools of statistical mechanics including the MC method with importance sampling of states. To reduce critical slowing down, we have constructed the Wolff [18] like scheme for sampling of states.

In our MC computer experiment, we not only compute thermodynamic quantities but we also determine their uncertainties. Such a way of computing of results should be called a measurement and we refer to it as *the computer experiment* which is situated somewhere between a real experiment and a theory.

Our computer experiments enable us to predict the equilibrium behavior of our system according to the statistical mechanics methodology. Thus, using thermalization we generate equilibrium configurations (often called microstates) of finite-size cubic spin samples of the size $L \times L \times L$ ($16 \leq L \leq 38$) for fixed values of the model parameters described above at Hamiltonian (1) using our Wolff type cluster algorithm. We assume periodic boundary conditions as our final results are calculated in the thermodynamic limit.

In the Metropolis algorithm [20], used so far to study the 3D AT model behavior, one Monte Carlo step (MCS) is completed when each of the lattice sites has been visited once (selected systematically or randomly). Obviously, the ratio of statistical weights at the change of interaction energy of a pair of spins in a system is equal to $e^{-2(K_2+K_4)}$ when flipping a single spin. In the case of Wolff type algorithm one MCS is completed when the accumulated number of flipped spins in a couple of sampled clusters reaches the number of spins in the lattice. The detailed algorithm description is specified in Section 3.

To determine uncertainties of the measured quantities, we split each MC run into k ($8 \leq k \leq 20$) segments called partial averages. Thermalization and such a partial average consists from 0.8×10^7 MCS for smallest L values up to 3.6×10^7 MCS for the largest L 's.

Let us note that the problem of correlations between sampled microstates of spins is substantially reduced, and in some areas completely eliminated, in the Wolff type algorithm because after each MCS we get a completely new configuration [18]. This fact has been also confirmed during our computations.

Our MC computer experiments take from about 20 h for the smallest system size $L = 16$ up to a couple of weeks for the largest L values considered when applying sequential processing. Therefore we parallelize processing in our computing program. Each of parallel processes computes a couple of partial averages mentioned above. This way of parallelization manifests almost perfect speedup and maximum efficiency in homogeneous HPC [28,29] as communication between parallel processes takes place only a few times: initial data broadcasting by the master process and sending of partial averages from the slave processes to the master one. There are other methods of parallelizing for cluster algorithms for the Ising model [30,31] in the bibliography, which consist in performing computations in parallel for newly added

spins in an ascending cluster, that were run on the GPU. The GPU computing speed for a 2D Ising model at the critical temperature is higher than for the current CPU core, but in this case concurrent processing for the newly added spin will not be optimal [32] in contrast to parallelize computations of individual partial averages [28,29].

2.1. Cumulants

Performing our computer experiment, we fix the value of coupling K_4 and analyze Binder cumulants $Q_{\alpha,L}(K_2)$ dependences (see e.g. [19,33–35])

$$Q_{\alpha,L} = \frac{\langle M_{\alpha}^2 \rangle_L^2}{\langle M_{\alpha}^4 \rangle_L}, \quad (2)$$

to initially locate a temperature-driven phase transition point. Here $\langle M_{\alpha}^n \rangle_L$ is the n -th power of the α -degrees order parameter M_{α} , i.e. magnetization M_{α} per a lattice site, with $\alpha = s, \sigma$, or their couples $s\sigma$, averaged over an ensemble of independent samples of the size $L \times L \times L$. In this way one can locate both, continuous and first order phase transition points. For initial location of a phase transition point, it is enough to exploit the property that the dependences $Q_{\alpha,L}(K_2)$ intersect around the critical point $K_{2,c}$, because for $K_2 < K_{2,c}$ and $L_1 < L_2$ we have $Q_{\alpha,L_1}(K_2) > Q_{\alpha,L_2}(K_2)$, while for $K_2 > K_{2,c}$ occurs $Q_{\alpha,L_1}(K_2) < Q_{\alpha,L_2}(K_2)$ [12,33–35].

To be able to compute the latent heat, simultaneously with the above mentioned Binder cumulants, we calculate three Challa like cumulants [13,36]

$$V_{\alpha,L} = 1 - \frac{\langle E_{\alpha}^4 \rangle_L}{3\langle E_{\alpha}^2 \rangle_L^2} \quad (3)$$

and three Lee–Kosterlitz like cumulants [9,25]

$$U_{\alpha,L} = \frac{\langle E_{\alpha}^2 \rangle_L}{\langle E_{\alpha} \rangle_L^2} \quad (4)$$

for a particular value of the K_4 coupling. Here $\langle E_{\alpha}^n \rangle_L$ is the n -th moment of the α -degrees of freedom order parameter interaction energy E_{α} ($\alpha = s, \sigma$ or $s\sigma$), i.e. the respective term in Hamiltonian (1) separately, which is averaged over an ensemble of independent samples of the size $L \times L \times L$. The Challa and Lee–Kosterlitz cumulants have been modified by us [9,13] to be able to compute the latent heat for each component of the order parameter separately, as well as for the whole system when taking the whole Hamiltonian (1) for E .

For a continuous phase transition $\lim_{L \rightarrow \infty} V_{\alpha,L} = 2/3$ and $\lim_{L \rightarrow \infty} U_{\alpha,L} = 1$. On the other hand, the dependences $V_{\alpha,L}(K_2)$ show characteristic local minima and $U_{\alpha,L}(K_2)$ characteristic local maxima for first order phase transitions. The values of these minima $V_{\alpha,L}^{\min}$ and their positions $K_{2,\alpha,L}^{\min}$ scale linearly versus L^{-3} [13,36]. Analogous properties show maxima of $U_{\alpha,L}(K_2)$ dependences [9,25]. This property allows one to extrapolate the values of these parameters to their thermodynamic limits. The $K_{2,\alpha,L}^{\min}$ and $K_{2,\alpha,L}^{\max}$ limit values are the better estimations of the critical K_2 value than the initial value obtained from the above mentioned analysis of the behavior of the Binder cumulants (2).

2.2. Latent heat computed on the basis of cumulant limit values

We fix the coupling K_2 at its critical value $K_{2,c}$ in a phase transition and determine the partial internal energy $E_{\alpha,\pm}$ values related to the above mentioned α -degrees of freedom in the limit $L \rightarrow \infty$, where $E_{\alpha,\pm} = E_{\alpha}(K_2 \rightarrow K_{2,c} |_{\pm})$, from the Lee–Kosterlitz formula (5) and using the method proposed by us [13]. The Lee–Kosterlitz formula is of the form

$$V_{\alpha,L}^{\min} = \frac{2}{3} - \frac{1}{12} \left(\frac{E_{\alpha,+}}{E_{\alpha,-}} - \frac{E_{\alpha,-}}{E_{\alpha,+}} \right)^2 + \frac{A_V}{L^3}, \quad (5)$$

where A_V stands for an L independent complicated expression [25].

According to the latter we compute the value $E_{\alpha,-}$ from Eq. (5) using $V_{\alpha,\infty}^{\min}$ limit value determined from the analysis explained above in the next paragraph after Eq. (3) and the value $E_{\alpha,+}$ estimated from the $E_{\alpha,L}(K_2)$ plots for the finite-size samples [13]. Although such an estimation of the $E_{\alpha,+}$ value is imprecise, but this procedure allows the initial calculation of the values $E_{\alpha,+}$ and $E_{\alpha,-}$. Moreover, we qualitatively verify correctness of the location of this energy value jump from $E_{\alpha,+}$ to $E_{\alpha,-}$ in the background of the course of the dependence $E_{\alpha,L}(K_2)$.

Based on these results we can calculate directly the latent heat l_{α}

$$l_{\alpha} = E_{\alpha,+} - E_{\alpha,-} \quad (6)$$

where α denotes $s, \sigma, s\sigma$ or H when we take the whole Hamiltonian for energy. Obviously, the latent heat obtained using the internal energy of the whole system should be the sum of the partial ones within error bars.

When the latent heat $E_{\alpha,+} - E_{\alpha,-}$ tends to zero, $V_{\alpha,\infty}^{\min}$ approaches the value $2/3$, as described above for the continuous phase transitions. It is worth noting that Eq. (5) has been derived for strong phase transitions [25]. So, to calculate the latent heat l_{α} for weak phase transitions of the first order, one should use the approximation of Challa et al. [36], which is an alternative to Eq. (5). Nevertheless, although Eq. (5) has been derived for strong phase transitions, our analyzes show that it gives correct results for both the strong and the weak ones.

In a similar way, we independently calculate the latent heat by scaling up the cumulants $U_{\alpha,L}$ maxima to the thermodynamic limit for each order parameter component energy separately, and for the whole system energy, using the Lee–Kosterlitz formula

$$U_{\alpha,L}^{\max} = \frac{(E_{\alpha,+} + E_{\alpha,-})^2}{4E_{\alpha,+}E_{\alpha,-}} + \frac{A_U}{L^3}, \quad (7)$$

where A_U stands for L independent complicated expression [25]. It is worth noting that when the latent heat $E_{\alpha,+} - E_{\alpha,-}$ tends to zero, $U_{\alpha,\infty}^{\max}$ approaches the value 1, as described above for the continuous phase transitions.

For the validation of the cumulant method, we also use here the $E_{\alpha,+}$ values determined recently using the energy distribution histogram method, described in the next subsection. This is a much better determination of the values of $E_{\alpha,+}$ than its estimation from the $E_{\alpha}(K_2)$ plots for the finite-size samples used above.

2.3. Latent heat obtained on the basis of the internal energy distribution histogram

We have also observed the characteristic internal energy distribution histogram with two peaks in the critical region [26], just like it was originally observed [25] in the q -state Potts model with q equivalent ordered states and one disordered. Maxima of these peaks appear at the energy value $E_{\alpha,-,L}$ for the ordered state and at $E_{\alpha,+,L}$ for the disordered one. It is worth to underline that Hamiltonian (1) of the 3D AT model is the sum of three terms, each of which shows the interaction energy within one component of the order parameter as mentioned above. We have performed the analysis of the histogram of the entire energy of the system as originally proposed by Lee and Kosterlitz [25], but it does not give an insight into the individual behavior of the degrees of freedom $\alpha = s, \sigma$ and $s\sigma$ which demonstrate independent ordering. To calculate the individual contribution of each of these three degrees of freedom to the latent heat, we also analyze the behavior of the histogram of the interaction energy of each kind of degrees of freedom, i.e. the histogram of the mean value of each of the three terms in Hamiltonian (1) separately.

From technical point of view, we compute the histogram dividing the interval of the whole energy E (in $k_B T$ units) occurring in our computer experiments into small subintervals and our program counts the energy appearing in each subinterval separately. On this basis, we calculate the probability value P of the energy in the different subintervals in our system of the finite size $L \times L \times L$. The program

independently computes the values $P_L(E_\alpha, \beta)$ and $-\ln P_L(E_\alpha, \beta)$ with $\beta = 1/k_B T$, where $\alpha = s, \sigma, s\sigma$ and, obviously, we also take the whole Hamiltonian (1) as an argument. This method requires that the system is very close to the phase transition point. Thus, we perform our computations at the K_2 critical value carefully determined from analyzes using the $Q_{\alpha,L}$, $V_{\alpha,L}$ [36] and $U_{\alpha,L}$ [25] cumulants, mentioned above for the fixed K_4 value. Besides validating the code of our computer experiment, analyzes of the behavior of these cumulants also allow for the important test: the respective energy values E_- and E_+ for the ordered and unordered states, defined for each kind of degrees of freedom and for the entire Hamiltonian H , should fall in the upper and lower regions of the characteristic sudden jump of the average values of the respective internal energies E_α in the K_2 function at the fixed value of K_4 parameter.

To determine the latent heat value, we will use the property that the positions $E_{\alpha,-L}^{\min}$ and $E_{\alpha,+L}^{\min}$ of the dependence $-\ln P_L(E_\alpha, \beta)$ minima and their thermodynamic limit values $E_{\alpha,-}$ and $E_{\alpha,+}$ fulfill the relation [25]

$$E_{\alpha,i,L}^{\min} - E_{\alpha,i} = O(L^{-(d-1)}), \quad (8)$$

where $i = -$ or $+$ and d is the dimensionality of the system. Thus, we can exploit the property that for finite systems with ever greater dimensions L the energy values $E_{\alpha,i,L}^{\min}$ linearly approach their bulk values $E_{\alpha,i}$ as a function of $L^{-(d-1)}$. It is noteworthy that this relation has been derived for strong first order phase transitions [25].

3. Our cluster algorithm of the Wolff type

In 1989 Wolff [18] proposed the algorithm to study the behavior of spin lattices which is based on the previous work of Swendsen and Wang (SW) [17] and which removed some restrictions previously developed for this method. The Wolff concept radically reduces the problem of critical slowing down [18], which is characterized by the critical exponent z , often referred to as the dynamic exponent [20]. The method of its calculation is presented in Section 4. It is a way to quantify the effect of the critical slowing down [20], which is observed in computer simulations. For different algorithms, we get different values of the critical exponent z , which is not a universal one. A small value of z means a relatively small critical slowing down and faster processing of the algorithm near critical point, i.e. faster program execution. If $z = 0$, then we do not observe the critical slowing down, similarly to other models (see *e.g.* the recent papers [37] for the three-state Potts antiferromagnetic model).

For the Metropolis algorithm $z \geq 2$ for 2D and 3D systems, *e.g.* in the case of the 3D Ising model $z = 2.02(2)$ [38], but for existing cluster algorithms of the Wolff type $z = 0.33(1)$ [39] and of the SW type $z = 0.54(2)$ [20]. For the 2D 4-state Potts model for the SW algorithm $z = 0.876(12)$ [21]; whereas for the 2D AT model for the SW algorithm $z = 0.733(14)$ [20,21]. These data are important reference points, because for $K_4 = 0$ the 3D AT model reduces to the Ising model, and for $K_4 = K_2 \approx 0.157154$ to the 4-state Potts model as explained above. The z values obtained for the Ising model differ between each other for different algorithms and the thermodynamic variable on the basis of which they are calculated (see *e.g.* [40] and the papers cited therein). The quantitative aspects of the critical slowing down and the critical exponent z for our algorithm are presented in Section 5.

The Wolff scheme originally was applied to the Ising model. Generally, the Wolff algorithm is based on building clusters of spins of the same sign, where joining of spins occurs with a certain probability. There is a close relation between the Wolff and the SW method. Namely, the probability of adding a new spin to the cluster under construction in the Wolff method is equal to the probability of not to interrupt a bind in the SW algorithm [17,18]. However, while each cluster has the ability to perform a flip at each step in the SW procedure, in the Wolff method a flip only applies to a cluster that contains the starting spin. This means that larger clusters more often undergo a

flip procedure in the Wolff algorithm, in contrast to the Metropolis algorithm where single spins are being flipped. This effort put into large clusters causes the greater efficiency of the Wolff algorithm despite its greater complexity. This motivated us to turn to the Wolff type algorithm for the AT model in contrast to the papers [21–24] in which authors refer to the SW algorithm and to 2D systems.

The number of MCS required to achieve statistical equilibrium in the Wolff type algorithm is temperature independent. This does not apply to the computer time consumed in this method, as large clusters become increasingly when approaching the critical temperature and there is a growing number of operations that need to be done in one MCS [18]. Therefore, in the algorithm proposed by us, one step ends when the accumulated number of reversed spins in the built clusters reaches the number of all spins in the system, similarly as the number of attempts to reverse single spins in one MCS in the Metropolis algorithm.

To study the equilibrium phase transitions of the first- or the second-order in the standard 3D AT lattice model, we have constructed the Wolff type algorithm. As described in Hamiltonian (1), there are two non-interacting spins s_i and σ_i on each lattice site i . Unlike to the method developed for 2D AT model based on the SW algorithm [23,24], our algorithm creates and flips s_i or σ_i spin clusters independently of each other. This approach is valid in the space of model parameters where the interaction between spins s or σ dominates. Thus, the scope of application of both algorithms is the same: $|K_4| < K_2$ [21,23,24].

There is an alternative update scheme of flipping composite spin variable $s\sigma$ together with a single spin variable (s or σ) in the MC simulations of the AT model [41] and ergodicity of this algorithm is guaranteed as well.

As each step in a Wolff type algorithm begins with construction of a cluster of spins that are reversed, our algorithm begins from generating a three-dimensional lattice of spins s and σ with a starting value of 1. Although s_i and σ_i spins residing on the same lattice site i do not interact directly, they are coupled by the third term in Hamiltonian (1). Therefore, our algorithm works as follows.

1. Randomly choose spin s or σ , and then randomly select a lattice site i as the first element of cluster C to be built.
2. Flip the randomized spin selected in step 1. and add it to cluster C .
3. Connect this randomly selected spin at site i to each of its nearest neighbours j with probability $P_{add,s}$ for spin s

$$P_{add,s}(s_i, s_j) = 1 - e^{\min(0, 2(K_2 s_i s_j + K_4 s_i \sigma_i \sigma_j))} = \begin{cases} 1 - e^{-2(K_2 + K_4)} & \text{for } s_i \neq s_j \text{ and } s_i \sigma_i \neq s_j \sigma_j \\ 1 - e^{-2(K_2 - K_4)} & \text{for } s_i \neq s_j \text{ and } s_i \sigma_i = s_j \sigma_j \\ 0 & \text{for } s_i = s_j \end{cases} \quad (9)$$

or with probability $P_{add,\sigma}$ for spin σ

$$P_{add,\sigma}(s_i, \sigma_j) = 1 - e^{\min(0, 2(K_2 \sigma_i \sigma_j + K_4 s_i \sigma_i s_j \sigma_j))} = \begin{cases} 1 - e^{-2(K_2 + K_4)} & \text{for } \sigma_i \neq \sigma_j \text{ and } s_i \sigma_i \neq s_j \sigma_j \\ 1 - e^{-2(K_2 - K_4)} & \text{for } \sigma_i \neq \sigma_j \text{ and } s_i \sigma_i = s_j \sigma_j \\ 0 & \text{for } \sigma_i = \sigma_j \end{cases} \quad (10)$$

and, if this happens, add j to cluster C containing i and flip this spin. It is worth noting that this probability is well defined for $|K_4| < K_2$, as mentioned above, because when $|K_4| > K_2$ both probabilities of adding next spins will be equal to 0 and consequently both Ising bonds between spins are broken forming the paramagnetic phase.

4. Repeat step 3. in sequence for i equal to j for each spin just joined to cluster C .
5. Return to step 1. and repeat operations until the accumulated number of flipped spins reaches the number of these spins in the lattice.

According to the Markov process, this procedure satisfies the

criterion of availability, as there is always a non-zero probability that the cluster will contain only a single spin, and flipping the sequence of the individual spins allows to achieve any configuration. The micro-reversibility criterion is also satisfied, as one can consider two spin configurations, α and α' , whose spins take values s_i and s'_i which turn into each other by flipping the spin cluster C . The transition probability P for a cluster of spins s obeys

$$\frac{P(\alpha \rightarrow \alpha')}{P(\alpha' \rightarrow \alpha)} = \prod_{(i \in C, j \notin C)} \frac{1 - P_{add,s}(s_i, s_j)}{1 - P_{add,s}(s'_i, s'_j)} = \exp \left[-2 \sum_{(i \in C, j \notin C)} \left(K_2 s_i s_j + K_4 s_i \sigma_i s_j \sigma_j \right) \right] = \exp \left(-\frac{E_{\alpha'} - E_{\alpha}}{k_B T} \right) \quad (11)$$

In Eq. (11) the invariance of Hamiltonian (1) in terms of reversal of two neighboring and interacting spins is used to simplify the probability of internal spins added to the cluster for two configurations. According to Hamiltonian (1) symmetry, the formula (11) for spins σ will be the same.

4. Critical slowing down

4.1. Autocorrelation function

The procedure described in Section 2 should be started for a sufficiently long time in order to achieve the thermodynamic equilibrium by the system at a given temperature. Then the program computes the required quantities for the time needed to determine their average values with error bars. The parameters we used to compare the Metropolis and our cluster algorithm for the AT model are the same as for the standard Ising model: the internal energy E_{α} and the magnetization M_{α} [19–21,38–40] determined independently for each kind of degrees of freedom $\alpha = s, \sigma$ and $s\sigma$. To determine the average values $\langle E_{\alpha} \rangle$ and $\langle M_{\alpha} \rangle$ per one lattice site, we have first to determine how long we need to run our procedure in order to get a good estimation of their expected values. This requires a knowledge of time to attain the thermodynamic equilibrium and of the correlation time constant τ . τ is a measure of the time it takes for the transition of the system from one state to another, which is significantly different from the previous one, i.e. to the state in which the number of spins the same as in the initial state is equal to the number of spins that could have been in this state accidentally [20]. There are many ways to estimate the correlation time. The most direct of these is the computation based on the normalized autocorrelation function $\chi_A(t)$ [20,21,24] of any property A of the model. In our case, these are $A = \langle E_{\alpha} \rangle$ or $\langle M_{\alpha} \rangle$. For the discrete values obtained in our computer experiment, we compute autocorrelation function by dividing the non-normalized autocorrelation function by its variance σ_A^2 [14]:

$$\chi_A(t) = \frac{\sum_{i=1}^{t_{max}-t} (A_{i+t} - \bar{A})(A_i - \bar{A})}{(t_{max} - t)\sigma_A^2} \quad (12)$$

where

$$\sigma_A^2 = \frac{1}{t_{max}} \sum_{i=1}^{t_{max}} (A_i - \bar{A})^2. \quad (13)$$

A_t is the instantaneous value of the average magnetization $\langle M_{\alpha} \rangle$ or the energy $\langle E_{\alpha} \rangle$ in time t , while \bar{A} is the average value computed from all instantaneous values. In our case, the measure of the time t is defined as one MCS, while t_{max} is the number of all received microstates. The autocorrelation function gives us a measure of correlation in two different times, shifted by each other by i . If $\chi_A(t) = 0$ then the fluctuations of the given quantity are not correlated [20]. Formally, we should calculate $\chi(t)$ by integrating after an infinite interval time $t \rightarrow \infty$. Therefore, in a computer program, we do everything in our power to get closer to this requirement and we simply sum up after all

the measurements made from the start to the end of the run of our program after reaching the state of equilibrium, i.e. we sum up from $t = 1$ to $t_{max} \sim 10^7$ MCS. We try to make the time t_{max} of measurements much greater than the correlation time τ . Autocorrelation decreases with a significant non-zero speed as time t passes, and after a sufficiently long time drops to zero [20]. It is expected that it will decrease exponentially with time. The relationship between the autocorrelation function $\chi(t)$ and the correlation time $\tau_{exp,A}$ for a quantity A is as follows [20]:

$$\chi_A(t) \approx C e^{-t/\tau_{exp,A}}. \quad (14)$$

Determination of $\tau_{exp,A}$ is very sensitive to specify the fitting range of the exponential function to the autocorrelation function.

It is easier to calculate integrated correlation time $\tau_{int,A}$ for the autocorrelation function than to carry out an exponential fit, since it is not so sensitive to statistical noise [20]. It is a common practice, although as earlier studies have shown [20,21,40,42], the times $\tau_{exp,A}$ and $\tau_{int,A}$ may in some cases differ slightly from each other [40]. The integral correlation time is defined [20,42]

$$\tau_{int,A} = \frac{1}{2} \sum_{t=-\infty}^{+\infty} \chi_A(t) = \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^{+\infty} \chi_A(t). \quad (15)$$

In numerical estimation of $\tau_{int,A}$ it is calculated in the limit of large t value (t_{∞}) where, however, its statistical error increases rapidly. As a compromise between systematic and statistical errors, the often employed procedure is to determine the upper limit t_{∞} self-consistently by cutting off the summation once $t_{\infty} \geq 6\tau_{int,A}(t_{\infty})$ [42].

Critical fluctuations that increase the size of measurement uncertainties are the internal physical feature of simulations of Ising type models, thus also of the AT one. A MC algorithm of any type, that correctly samples Boltzmann's distribution of values of determined physical quantities in the critical region, will have significant fluctuations. This effect is called the critical slowing down and is an integral property of a MC type algorithm. The known algorithms have different values of correlation time depending on the system temperature T , and the correlation time often increases significantly when approaching the critical temperature T_c . Because we are interested in studying the behavior of the AT model in the critical region, we propose the algorithm that shows a significantly smaller critical slowing down than the Metropolis algorithm, and even completely eliminates it. This will allow validation of our results and will allow us to achieve much greater accuracy.

4.2. Determination of the critical exponent z

To determine the critical exponent z for both Metropolis and our cluster algorithms, we use measurements of their integral correlation times τ_{int} . The relationship between the correlation time $\tau_{M,A}$ and the critical exponent $z_{M,A}$ for the Metropolis algorithm (denoted by the index M) contains the correlation length ξ , while ξ is proportional to the system size L [20], hence

$$\tau_{M,A} \sim \xi^{z_{M,A}} \rightarrow \tau_{M,A} \sim L^{z_{M,A}}. \quad (16)$$

Eq. (16) shows that when we are in the critical region, the correlation time increases with the size as $L^{z_{M,A}}$. The basic reason for the large value of $z_{M,A}$ in the Metropolis algorithm is the divergence of the correlation length and critical fluctuations near the phase transition point. By presenting a graph of the $\tau_{M,A}$ dependence on L in logarithmic scales, on the basis of the slope of the fitted function, we can determine the value of $z_{M,A}$.

In order to compare the correlation times of our cluster and the Metropolis algorithms in the critical region, it would be inadequate to measure τ for both algorithms in terms of the number of MCS. This results from the fact that one MCS in the Wolff algorithm is a very complicated procedure, sometimes flipping hundreds of spins and

potentially taking up a lot of CPU time, while MCS in the Metropolis algorithm is simpler and usually takes less CPU time [20].

For calculation of the critical slowing down in our Wolff type algorithm only, we assume that two clusters are flipped in one MCS, one of s spins and the other of σ spins. This is a different definition of MCS than presented in Section 3, however, it has been modified here only to compare the results obtained by us with the values presented in the bibliography [18,20,21,24,38–40].

The time required to complete one MCS of our Wolff type algorithm is proportional to the average number n of flipped spins in a single cluster. Such a cluster includes the n/L^d fraction of the whole lattice, and thus the total time will be, on average, $\langle n \rangle / L^d$ of the time of flipping of all system spins, where $\langle n \rangle$ is the average size of the cluster flipped in the equilibrium state. Thus, it will be equivalent to visiting each lattice site in the Metropolis algorithm and trying to flip the spins s and σ . In the case of the Wolff type algorithm constructed by us in order to calculate individual thermodynamic variables, at each MCS only one spin cluster for each sublattice is flipped and on this basis we calculate the correlation time $\tau_{MCS,A}$. In order to compare the operation of the cluster and Metropolis algorithms, we multiply the so obtained correlation time $\tau_{MCS,A}$ by the ratio of the average size of the flipped cluster in one MCS $\langle n \rangle$ to the size L^3 of the system for a given thermodynamic quantity A [18–20]:

$$\tau_{W,A} = \tau_{MCS,A} \frac{\langle n \rangle}{L^3} \quad (17)$$

Using this definition, we can compare the correlation times $\tau_{M,A}$ and $\tau_{W,A}$, for the Metropolis (index M) and our Wolff type (index W) algorithms in the critical region and determine the value of the critical exponent $z_{W,A}$ in the same way as in the case of the Metropolis algorithm.

Therefore, without taking into account the average size of a flipped cluster, the value of the critical exponent $z_{MCS,A}$ for the correlation time $\tau_{MCS,A}$ is calculated exactly in the same way as for the Metropolis algorithm. In order to verify the correctness of the results obtained, for continuous phase transitions, the value of $z_{W,A}$ may be obtained independently by applying its relationship with $z_{MCS,A}$ [20]

$$z_{W,A} = z_{MCS,A} + \frac{\gamma}{\nu} - d \quad (18)$$

where γ and ν are the critical exponents of the magnetic susceptibility and the correlation length respectively, and d is the dimensionality of the model, which in our case is 3. If we know the value of the ratio γ/ν , we can use Eq. (18) to calculate the value z directly, without having to measure the average cluster size of the cluster algorithm, which eliminates one source of uncertainty. In order to control the correctness of the results of our calculations, we convert the Eq. (18) to the form

$$\frac{\gamma}{\nu} = z_{W,A} - z_{MCS,A} + d, \quad (19)$$

which allows us to calculate the value of the ratio γ/ν . This value should remain constant, regardless of the kind of a thermodynamic variable used to determine the autocorrelation function.

5. The results

5.1. Cumulants

The results used for validation of our cluster algorithm in this paper deal with transitions along the line between Ising A and Potts P points (see Fig. 1) between the Baxter phase, where all three components of the order parameter are ferromagnetically ordered, to the disordered (paramagnetic) one, where all three components of the order parameter tend to zero. For our analysis we took the point with $K_4 = 0.1$, where there is the phase transition of the first order with the intermediate value of the latent heat (investigated by a recently formulated effective

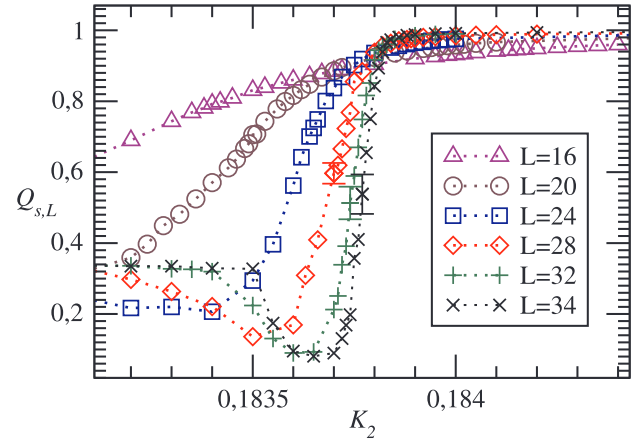


Fig. 2. The dependences $Q_{s,L}(K_2)$ at the critical coupling $K_4 = 0.1$ obtained using our Wolff type algorithm for system sizes L listed in the legend box. These graphs present the data in the surrounding of the critical region where these curves intersect. The results of our MC computer experiments are denoted by symbols. The uncertainties are less than magnitudes of symbols for $L < 28$. For clarity, for larger L values only exemplary uncertainties have been marked and the results only for selected L values are presented.

field theory [37] and by the MC method [13,14,26,41] using the Metropolis algorithm).

As described in Section 2 below Eq. (2), we have initially located temperature-driven phase transition points for fixed value of coupling $K_4 = 0.1$ from the common intersection point of the curves $Q_{\alpha,L}(K_2)$ specified by Eq. (2) independently for $\langle \alpha \rangle$ order parameter components with $\alpha = s, \sigma$ and $s\sigma$ (see e.g. [13,34]). The example of this analysis for spins s obtained using our Wolff type algorithm is presented in Fig. 2. For validation in Table 1 also the results obtained applying the Metropolis algorithm are presented. The agreement of the intersection region $K_{2,Q}$ for both algorithms within four decimal digits and within error bars is clearly seen as shown in the second column of Table 1. Obviously, one obtains similar results for spins σ for Hamiltonian (1) symmetry reasons. The analyzes for cumulants Q_α allow us to achieve the accuracy of about four decimal digits for K_2 coupling critical value.

As for the data presented in tables and in figures for the Metropolis algorithm, it is worth recalling here that results only every 8th to 10th MCS contribute to the determined thermodynamic quantities to avoid correlations between sampled microstates of spins. Therefore, these results were obtained with the number of MCS 8 to 10 times greater than for the cluster algorithm. Of course, the results obtained using our cluster algorithm would have greater precision with an equal number of MCS.

The characteristic minima in dependences $Q_{s,L}(K_2)$, shown in Fig. 2, attributed to a first order phase transition [33], are also obtained using our cluster algorithm. It is worth noting that the existence of these minima is an important signal obtained at the initial stage of analysis, but *not the proof* of the presence of the latent heat (see e.g. [11,33]).

To compute the latent heat and to improve the phase transition point location, we estimate values and positions of cumulants $V_{\alpha,L}$ minima and of cumulants $U_{\alpha,L}$ maxima, where α indicates that the interaction energy of $s, \sigma, s\sigma$ degrees of freedom or of the whole Hamiltonian (1) is taken into account. The examples of these dependences are illustrated in Fig. 3 for spins s . To average the scatter of the results and to determine more precisely the ordinates of extrema $V_{s,L}^{\min}$ and $U_{s,L}^{\max}$ as well as their abscissas $K_{2,\alpha,L}^{\min}$ and $K_{2,\alpha,L}^{\max}$ in Fig. 3, our MC data were approximated by a polynomial of the third degree and marked by solid lines in Fig. 3. Nevertheless, the uncertainties of the ordinates $V_{s,L}^{\min}$ (left) and $U_{s,L}^{\max}$ (right) in Fig. 4 and of the abscissas $K_{2,\alpha,L}^{\min}$ and $K_{2,\alpha,L}^{\max}$ in Fig. 5 of the extrema shown in Fig. 3 fully take into account the scatter of the MC results as the uncertainties should always be

Table 1

The estimated values of computed parameters and quantities, which are defined in the text of Section 2, using our Wolff type and the Metropolis algorithm at the constant coupling $K_4 = 0.1$. The value $K_{2,\infty} = 0.183846(25)$ is the mean value of the results presented in Fig. 5 and should be identified with the critical value $K_{2,c}$.

Algorithm	$K_{2,0}$	$K_{2,\infty}$	$V_{s,\infty}^{\min}$	$V_{s\sigma,\infty}^{\min}$	$V_{H,\infty}^{\min}$	$U_{s,\infty}^{\max}$	$U_{s\sigma,\infty}^{\max}$	$U_{H,\infty}^{\max}$
Wolff type	0.1838(1)	0.183846(25)	0.5467(25)	0.6212(20)	0.568(6)	1.088(23)	1.0318(13)	1.0696(32)
Metropolis	0.1839(2)	0.18387(8)	0.547(5)	0.624(5)	0.568(8)	1.08(5)	1.033(3)	1.069(6)

rounded up.

The finite-size scaling analyzes of the ordinates and of the abscissas of cumulants $V_{\alpha,L}$ minima and of cumulants $U_{\alpha,L}$ maxima for degrees of freedom α indicated in the legend boxes are illustrated in Figs. 4 and 5. The values $V_{\alpha,L}^{\min}$ (the left hand side graph in Fig. 4) and $U_{\alpha,L}^{\max}$ (the right hand side graph in Fig. 4) are obtained using our cluster Wolff type algorithm and extrapolated to the thermodynamic limit at the fixed value of the coupling $K_4 = 0.1$. The line for $\alpha = \sigma$ falls within the thickness of the line for $\alpha = s$ for the Hamiltonian (1) symmetry reasons. Our MC data are fitted by the straight solid lines using the linear regression for $L \geq 24$. These data for finite-size systems are linearly correlated from a certain L value up [25,36]. In Fig. 5 we present abscissas $K_{2,\alpha,L}^{\min}$ of cumulants $V_{\alpha,L}$ minima and $K_{2,\alpha,L}^{\max}$ of cumulants $U_{\alpha,L}$ maxima obtained using our cluster Wolff type algorithm and extrapolated to the thermodynamic limit at the fixed value of the coupling $K_4 = 0.1$. Here cumulants, degrees α and extrema are specified in the legend box. One can see the clear linear character of our MC computer experiment data which are inter- and extrapolated by the solid lines using linear regression starting from data with the sufficiently large $L = 24$. For comparison and validation, also the extrapolated results obtained using the Metropolis algorithm are presented in Table 1.

Critical regions of K_2 values, which result from Fig. 2, are consistent with the more precise ones resulting from the above finite-size scaling analyzes, i.e. $K_{2,c}$ presented in Table 1 are the mean value taken from all $K_{2,c}^{\min}$ and $K_{2,c}^{\max}$ presented in Fig. 5. In Table 1 we have demonstrated that both Metropolis and our cluster algorithms with high precision give the same results extrapolated to the thermodynamic limit for the large enough samples ($L \geq 24$).

In this way, the results previously obtained using the Metropolis algorithm have been verified by our cluster algorithm what enabled us also to validate the latter. The main limitation of this method is its scope of applicability, as one should remember that our cluster algorithm of the Wolff type can be used for $K_2 > |K_4|$ as described and justified in Section 3 and in previous works regarding the 2D AT model [21,23,24].

5.2. Computation of latent heat on the basis of cumulants and of the internal energy distribution histogram

We have initially determined the partial latent heat l_α connected with $\langle \alpha \rangle$ component of the order parameter for particular $K_4 = 0.1$ coupling value using formula (5), the Challa-like cumulants $V_{\alpha,\infty}^{\min}$ values, and the values $E_{\alpha,+}$ estimated from the $E_\alpha(K_2)$ energy plots (see the left-hand graph in Fig. 6 discussed below) for $\alpha = s, \sigma, s\sigma$ or the whole Hamiltonian H (1) for finite-size samples 9,13, as explained in Sub-Section 2.2. Although such an estimation of the step change in the energy $E_{\alpha,+}$ value is imprecise, but it allows the initial calculation of the values $E_{\alpha,+}$ and $E_{\alpha,-}$ and a qualitative verification of the location of this energy value jump from $E_{\alpha,+}$ to $E_{\alpha,-}$ in the background of the course of the dependences $E_{\alpha,L}(K_2)$. Below we present the better estimate of $E_{\alpha,+}$ value in the thermodynamic limit using the energy distribution histogram method. The results of this analysis using this second estimate of $E_{\alpha,+}$ value for latent heat $l_\alpha = E_{\alpha,+} - E_{\alpha,-}$ in $k_B T$ units computed using our cluster Wolff type algorithm and (for comparison) the Metropolis one for $K_4 = 0.1$ and the critical value $K_{2,c} = 0.183846(25)$ are presented in Table 1 and denoted by the method V in the first column.

The results of analogous analyzes for latent heat l_α values using the Lee-Kosterlitz like cumulants $U_{\alpha,\infty}^{\max}$ values and Eq. (7) are shown in Table 2 in the rows denoted by the method U in the first column. Latent heat values obtained using both algorithms from the above-explained analyzes of the behavior of the individual cumulants for all degrees of freedom shown in Table 2 demonstrate good agreement within the given uncertainty limits.

The applicability of the method of the energy distribution histogram presented in Section 2 for the study of systems with a multicomponent order parameter was confirmed only with the use of the Metropolis algorithm [26]. We have used this procedure to obtain a histogram shown in the right hand side graph of Fig. 6 with two peaks in the critical region using our cluster algorithm for 3D AT model of size $L = 34$ in the phase transition point. The critical value of constant coupling $K_{2,c} = 0.183846(25)$ at $K_4 = 0.1$, which is marked on the left hand side graph in Fig. 6 with vertical dotted line, has been carefully determined by our analysis of the behavior of the above mentioned cumulants of Binder [33] and of Challa [36] and Lee-Kosterlitz [25]

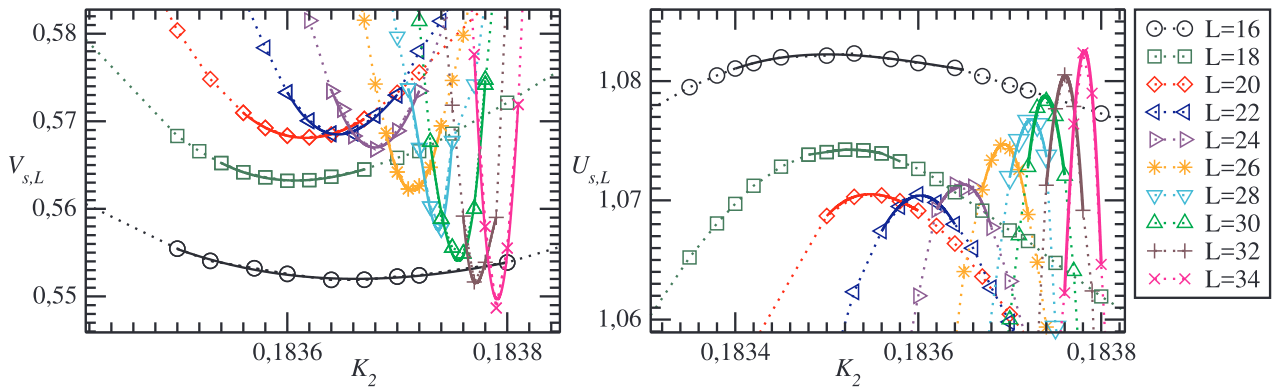


Fig. 3. The dependences $V_{s,L}(K_2)$ (left) and $U_{s,L}(K_2)$ (right) with characteristic minima and maxima for system sizes L listed in the legend box and at the critical coupling $K_4 = 0.1$ obtained using our cluster Wolff type algorithm. The uncertainties are less than magnitudes of symbols and for clarity are omitted.

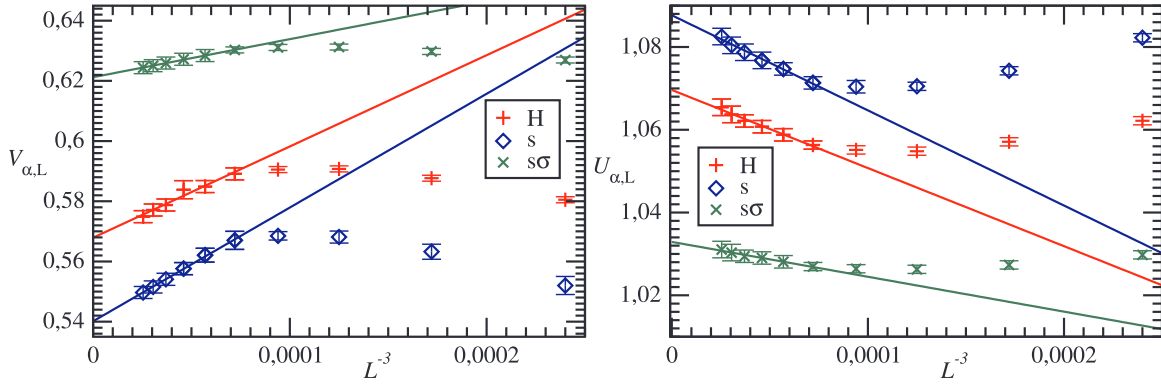


Fig. 4. The values $V_{\alpha,L}^{\min}$ (left) and $U_{\alpha,L}^{\max}$ (right) obtained using our cluster Wolff type algorithm and extrapolated to the thermodynamic limit for degrees of freedom α indicated in the legend box at the fixed value of the coupling $K_4 = 0.1$. The dependences are fitted by the straight solid lines using the linear regression for $L \geq 24$. The uncertainties are less than magnitudes of symbols and for clarity are omitted.

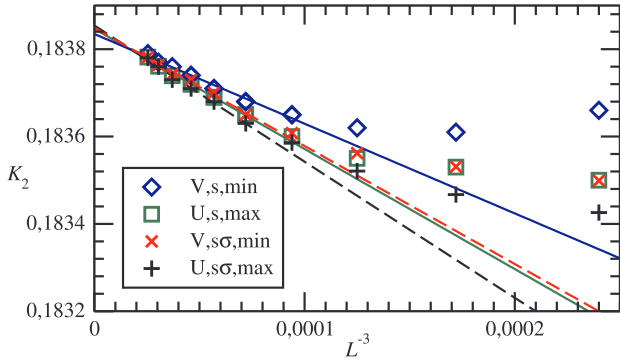


Fig. 5. Abscissas $K_{2,\alpha,L}^{\min}$ of cumulants $V_{\alpha,L}$ minima and $K_{2,\alpha,L}^{\max}$ of cumulants $U_{\alpha,L}$ maxima obtained using our cluster Wolff type algorithm and extrapolated to the thermodynamic limit, at the fixed value of the coupling $K_4 = 0.1$. Cumulants, degrees α and extrema are specified in the legend box. The dependences are fitted by the straight solid lines using the linear regression for $L \geq 24$.

Table 2

Latent heat values determined on the basis of the values of V and U cumulants in the thermodynamic limit and of the energy distribution histogram (denoted as $P(E)$ in the first column) for 3D AT model at $K_4 = 0.1$ and $K_{2,c} = 0.183846(25)$.

Method	Degrees of freedom	Wolff type algorithm	Metropolis algorithm
$P(E)$	s or σ	0.0891(16)	0.0891(10)
V	s or σ	0.0885(6)	0.0887(12)
U	s or σ	0.089(8)	0.091(16)
$P(E)$	$s\sigma$	0.0424(19)	0.0431(12)
V	$s\sigma$	0.0421(8)	0.0430(14)
U	$s\sigma$	0.0429(7)	0.0423(14)
$P(E)$	whole H	0.2203(21)	0.2202(18)
V	whole H	0.225(5)	0.224(6)
U	whole H	0.225(4)	0.224(6)
$P(E)$	$s + \sigma + s\sigma$	0.2206(51)	0.2205(24)
V	$s + \sigma + s\sigma$	0.2194(20)	0.220(4)
U	$s + \sigma + s\sigma$	0.221(18)	0.224(33)

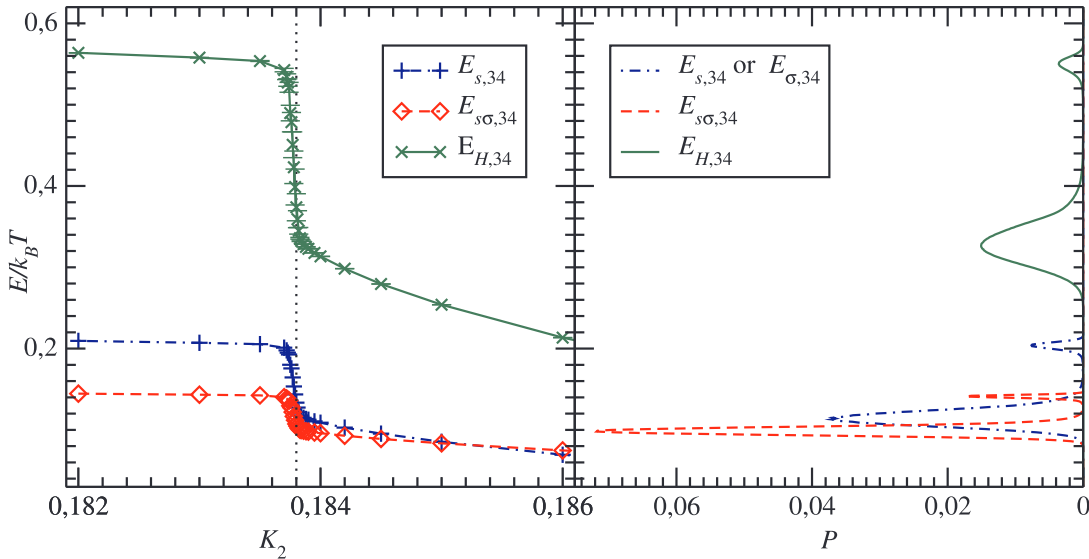


Fig. 6. The energy distribution histograms $P_{\alpha}(E)$ shown on the right hand side graph obtained using our cluster algorithm for the 3D AT model for degrees of freedom specified in the legend box. The left hand side graph presents the $E_{\alpha,L}(K_2)$ dependences for our cluster algorithm with $\alpha = s, \sigma, s\sigma$ or H at $K_4 = 0.1$ and for $L = 34$. The critical value $K_{2,c} = 0.183846(25)$ is marked with a vertical dotted line. For clarity only selected points are shown and error bars are omitted, as they are less than magnitudes of symbols.

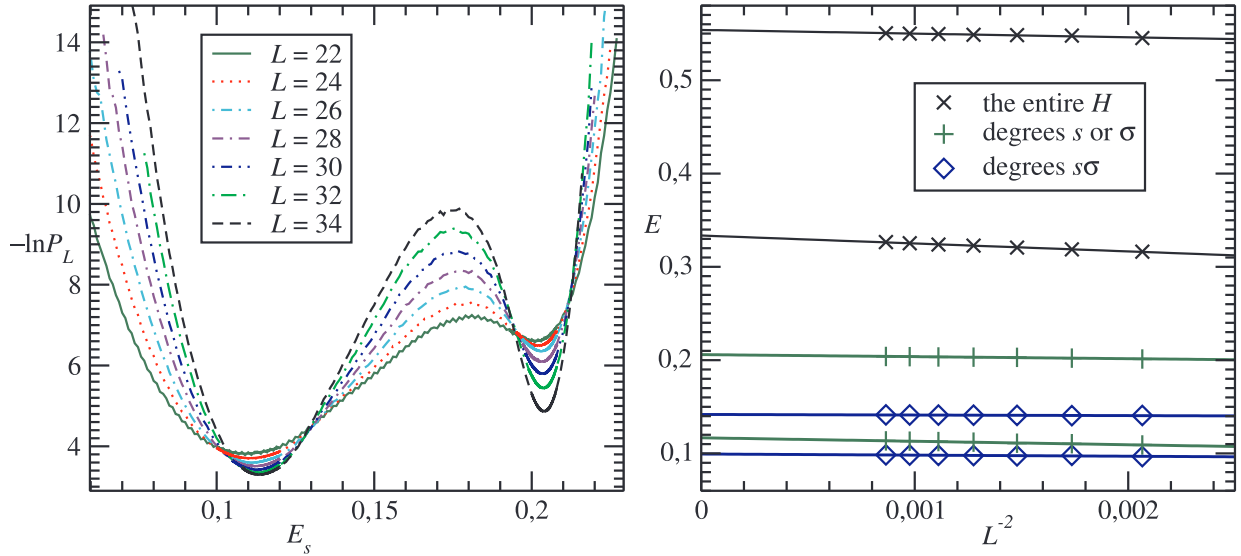


Fig. 7. The course of dependences $-\ln P_L(E_\alpha, \beta)$ for degrees of freedom $\alpha = s$ (or σ) at $K_4 = 0.1$ and the critical value $K_2 = 0.183846(25)$ shown in the left hand side graph. The values of the system size L are explained in the legend box. In the minima regions the dependencies $-\ln P_L(E_\alpha, \beta)$ have been smoothed by the solid curves using the third degree regression. The right hand side graph presents the minima positions of these dependencies $-\ln P_L(E_\alpha, \beta)$ received for a system of finite size L for degrees of freedom explained in the legend box. The individual lines are extrapolated to their thermodynamic limits $E_{\alpha,+}$ or $E_{\alpha,-}$ using linear regression. Error bars are less than the magnitude of symbols which are explained in the legend box.

type. $K_{2,c}$ has the same value for each of the three degrees of freedom of the system. It differs slightly from the value $K_2 = 0.18381(2)$ obtained earlier in the paper [26], but they are consistent within the error bars. Locating accurately the phase transition point is crucial for this method [25].

Also here the probability peaks P_L fall in the upper and lower region of the characteristic rapid jump of the average values of both the energy $E_{H,34}$ from the whole Hamiltonian, as well as the energy $E_{\alpha,34}$ of interaction of degrees of freedom $\alpha = s$ (the same course for σ spins due to the Hamiltonian (1) symmetry) and $s\sigma$ in the K_2 function as shown in the left hand side graph of Fig. 6. This is the next positive test for validity of the code of our new computer program presented in this paper.

Another important test for the validation and for the correctness of the results of our analyzes was to check whether the sum of the values of latent heat from subsequent components of the order parameter is equal to this heat of the entire system computed from analysis of the entire Hamiltonian in the range of uncertainties, which are of the order of magnitude of symbols in Fig. 7.

As explained in SubSection 2.3, in order to calculate the latent heat based on the internal energy distribution histogram, our program computes $-\ln P_L$ as a function of energy $E_{\alpha,L}$ not only for the whole Hamiltonian, but also for the energy of the interaction of degrees of freedom s , σ and $s\sigma$ separately for a system of different sizes L [26]. Fig. 7 shows these dependences $-\ln P_L(E_{\alpha,L})$ for degrees of freedom s (or σ) with $K_4 = 0.1$ at critical value $K_2 = 0.183846(25)$ for system size values $22 \leq L \leq 34$ explained in the legend box.

On the basis of these graphs, we have determined on the abscissa axis the positions of both minima occurring in Eq. (8), which are the most probable energy values $E_{\alpha,-,L}$ for the ordered state (left minima)

and $E_{\alpha,+,L}$ for the unordered state (right minima). In order to increase the precision of minima position determination, in their vicinity a smooth approximating curve is used, applying regression of the third degree. The approximating curves are illustrated by the solid lines in Fig. 7. In this way, we have determined the values of minima positions $E_{\alpha,+,L}$ and $E_{\alpha,-,L}$ for the dependence $-\ln P_L$ on the energy $E_{H,L}$ from the whole Hamiltonian and on the interaction energy $E_{\alpha,L}$ of degrees of freedom $\alpha = s$, σ and $s\sigma$.

The graph on the right hand side of Fig. 7 shows the results of these analyzes for energies $E_{\alpha,+,L}^{min}$ and $E_{\alpha,-,L}^{min}$ for the whole Hamiltonian, as well as for the energy of interaction of the degrees of freedom s , σ and $s\sigma$ separately, using the symbols explained in the legend box for the system of different sizes $22 \leq L \leq 34$. According to the formula (8), the values of $E_{\alpha,+,L}^{min}$ and $E_{\alpha,-,L}^{min}$ in the L^{-2} function scale to the respective bulk values $E_{\alpha,+}$ and $E_{\alpha,-}$ [26]. Therefore, the individual lines in the right hand side graph of Fig. 7 are extrapolated to their thermodynamic limits using linear regression. The results of these analyzes for data obtained using our cluster algorithm are summarized in Table 3. For validation, they are collated with our results for the Metropolis algorithm.

The resulting values $E_{\alpha,+}$ and $E_{\alpha,-}$ after substituting into Eq. (6) at $K_4 = 0.1$ give the latent heat $l_s = 0.0891(16)$ for spins s (or σ) and $l_{s\sigma} = 0.0424(19)$ for degrees of freedom $s\sigma$, which sum up to $l_{sum} = 0.2206(51)$. While latent heat determined on the basis of the entire internal energy is $l_H = 0.220(10)$ and is consistent with l_{sum} value within the error bars as shown in Table 2 in the rows denoted as $P(E)$.

Of course, the values $E_{\alpha,+}$ and $E_{\alpha,-}$ are determined more precisely using the energy histogram method than on the basis of Eqs. (5) and (7) as reported in the first two paragraphs of this Section. However, all

Table 3

Energy values $E_{\alpha,+}$ and $E_{\alpha,-}$ in the thermodynamic limit determined on the basis of energy histogram analyzes for individual degrees of freedom α , which are specified in the lower index, using our cluster algorithm of the Wolff type and (for comparison) the Metropolis one for 3D AT model at $K_4 = 0.1$ and $K_{2,c} = 0.183846(25)$. The results with the H index are based on the energy of the whole Hamiltonian $H(1)$.

Algorithm	$E_{s,+}$ or $E_{\sigma,+}$	$E_{s,-}$ or $E_{\sigma,-}$	$E_{s\sigma,+}$	$E_{s\sigma,-}$	$E_{H,+}$	$E_{H,-}$
Wolff type	0.2059(8)	0.1168(8)	0.1418(5)	0.0994(14)	0.5539(12)	0.3336(9)
Metropolis	0.2050(4)	0.1159(6)	0.14183(16)	0.09954(20)	0.5527(6)	0.3325(12)

these results, which were collated in Table 2, are consistent within error bars. They are in good agreement with the detailed results in Table 3 obtained using the energy distribution histogram both from the cluster algorithm, as well as Metropolis one. Particularly noteworthy is the very good consistency of the summed latent heats obtained for the individual degrees of freedom with that obtained for the entire Hamiltonian using each of the two algorithms. This shows the good validation of our algorithm and the computer program that exploits it.

Thus, the method of computation of latent heat based on the energy distribution histogram can successfully be used in systems with many components of an order parameter, which show their individual ordering, also with the use of our cluster algorithm.

The method based on the energy distribution histogram requires much less numerical computation, and the results for extrapolation to the thermodynamic limit in Fig. 7 exhibit significantly lower statistical scattering than those based on the Challa and Lee–Kosterlitz type cumulants. However, let us note that in order to use it, it is necessary to have quite precisely determined position of the investigated phase transition which can be effectively done using the cumulant method.

As the best strategy, it is suggested to use the cluster algorithm in the critical region and the Metropolis one beyond.

5.3. Critical slowing down

As we explained in Section 4, the slope of the curve fitted to the dependence of the correlation time τ on the system size L presented in the logarithmic scales gives the value of the dynamic critical exponent z . The autocorrelation function $\chi_{M_s, \langle M_s \rangle}$ of the magnetization $\langle M_s \rangle$ and our analysis are illustrated in Fig. 8 for $K_4 = 0$ and the critical value $K_2 = 0.221655^1$. This is the point where the AT model is reduced to the Ising model. The results obtained for the correlation of $\langle M_s \rangle$ for this point give the critical exponent $z_{M_s, \langle M_s \rangle} = 2.019(25)$, where the first index M indicates that this is the result obtained for the Metropolis algorithm. Thus, we observe here a good compatibility with the results presented earlier in the bibliography of the 3D Ising model $z_{M_s, \langle M_s \rangle} = 2.02(1)$ [20,38].

Our results obtained for the correlation of individual energy values $\langle E_s \rangle$ for the Metropolis algorithm at $K_4 = 0$ give the critical exponent value $z_{M_s, \langle E_s \rangle} = 1.873(25)$. We have found no bibliographic reference for the standard 3D Ising model, but for the 3D Ising model with the probability $p = 0.85$ of finding a spin on a node these values are $z_{M_s, \langle E \rangle} = 1.92(4)$ and $z_{M_s, \langle M_s \rangle} = 2.21(16)$ [40]. Thus, our results have values comparable to the bibliographic ones.

From the slope of the line in the right hand side graph in Fig. 8 we have also estimated the dynamic exponent for our cluster algorithm. Taking into account the error bars, our best fit gives the value $z_{W, \langle E_s \rangle} = 0.31(2)$ (here also the first index W means our Wolff like cluster algorithm), which is consistent with the value given in the bibliography $z_{W, \langle E \rangle} = 0.33(1)$ [20]. To check this result, we have also calculated the exponent $z_{MCS, \langle E_s \rangle} = 1.31(2)$ value for the flip of individual clusters in the system. Thus taking into account $v/\gamma = 1.97(2)$ [44] and $d = 3$ from Eq. (18) we get the value $z_{W, \langle E_s \rangle} = 0.28(4)$, which within error bars is consistent with the value shown above. This value is significantly lower than $z = 2.02$ for the Metropolis algorithm [20,38]. Our results for the correlation of individual magnetization average values lead to $z_{W, \langle M_s \rangle} = 0.18(4)$, which can be compared with the value given in the bibliography $z_{W, \langle M_s \rangle} = 0.19(1)$ for 3D random Ising model with $p = 0.85$ [40]. For our algorithm, we have also calculated the exponent $z_{MCS, \langle M_s \rangle} = 1.19(4)$ for the flip of individual clusters in the system. For its checking, considering $v/\gamma = 1.97(2)$ and $d = 3$ from Eq. (18) we get the value $z_{W, \langle M_s \rangle} = 0.16(6)$. Both of these values are consistent within the

limits of error bars. Of course, the analysis of correlation times for σ spins leads us to the same results as for spins s due to the symmetry of the Hamiltonian (1).

In addition to the results referenced in the bibliography for the point with $K_4 = 0$, where the AT model is reduced to the Ising model, we have determined the critical slowing down for our cluster algorithm and for the Metropolis one and calculated the z exponent for the typical phase transition point on line AP (see Fig. 1) with $K_4 = 0.1$ and $K_2 = 0.183846(25)$. The results obtained for the correlations of averages of individual energies and magnetizations are consistent within the limits of error bars. Extrapolations of the correlation times τ for the Metropolis algorithm for the system sizes $16 < L < 36$ are shown in the left hand side graph of Fig. 9. The presented analysis concerns correlation for the degree of freedom s and gave the values $z_{M_s, \langle E_s \rangle} = 8.5(5)$ and $z_{M_s, \langle M_s \rangle} = 8.5(5)$. After taking into account the size of clusters in relation to the size of the system for samples with $24 < L < 72$ using Eq. (18) for the analysis of the data shown in the right hand side graph of Fig. 9 we have received $z_{W, \langle E_s \rangle} = -0.07(4)$ and $z_{W, \langle M_s \rangle} = -1.58(7)$, what suggests that less than an entire lattice update is sufficient to decorrelate $\langle E_s \rangle$ or $\langle M_s \rangle$. Excluding Eq. (17), we have obtained $z_{MCS, \langle E_s \rangle} = 2.13(5)$ and $z_{MCS, \langle M_s \rangle} = 0.61(4)$.

Although for the point with $K_4 = 0.1$ and $K_2 = 0.183846(25)$ we have a phase transition of the first order, the value of the expression $z_{W,A} - z_{MCS,A} + d$ should not depend on the thermodynamic variable A used for calculation. Similarly to Eq. (19), for $\langle E_s \rangle$ we get $\gamma/v = 0.80(9)$, whereas for $\langle M_s \rangle$ we have $\gamma/v = 0.81(11)$. These values are consistent within the limits of error bars, although here, of course, they can not be interpreted as the ratio of critical exponents. These are another results for the validation of our algorithm and the computer program.

6. Conclusions

It is worth recalling that for small samples, the results of MC computer experiments deviate from the linear dependence at finite size scaling (see e.g. [23,25,33,36]), as shown in Figs. 4, 5, and 9. Thus, the results should be computed for large enough samples to extrapolate them to the thermodynamic limit.

Our cluster algorithm of the Wolff type proved to be the good tool for verification of the results along the line between Ising A and Potts P points (see Fig. 1) previously obtained using the Metropolis algorithm for the 3D AT model which is a complex system with many components of the order parameter showing independent ordering. In our work, we have shown that the cluster algorithm can be successfully used to compute statistical quantities including latent heat not only using the cumulant method, but also on the basis of the energy distribution histogram, the latter with significantly lower complexity. However, in order to use the histogram method, it is necessary to have quite precisely determined position of the investigated phase transition what we have done applying the cumulant method.

Fortunately, we did not find a measurable effect of the critical slowing down, nor the presence of metastable or unstable states on the values of thermodynamic quantities that until now were determined using the Metropolis algorithm. Regarding the uncertainties of the data presented in tables and figures for the Metropolis algorithm, one should remember that they have been obtained with the MCS number 8–10 times greater. With an equal number of MCS, results obtained using our cluster algorithm are more precise. Our computer experiments have been carried out in critical regions along the line AP, including the vicinity of tricritical point A, which is more difficult to analyze. We have also verified that our cluster algorithm is suitable for both continuous and first order phase transitions in the 3D AT model.

The biggest advantage of our cluster algorithm is the significant reduction of the critical slowing down problem, and in some cases the dynamic critical exponent reaches values close to zero. Application of the cluster algorithm of the SW type to the 2D AT model reduces the critical slowing down to a lesser extent [15,16].

¹For comparison we have applied the K_2 critical value used in the cited bibliography, but recently Ferrenberg et al. [43] published the more accurate value $K_2 = 0.221654626(5)$.

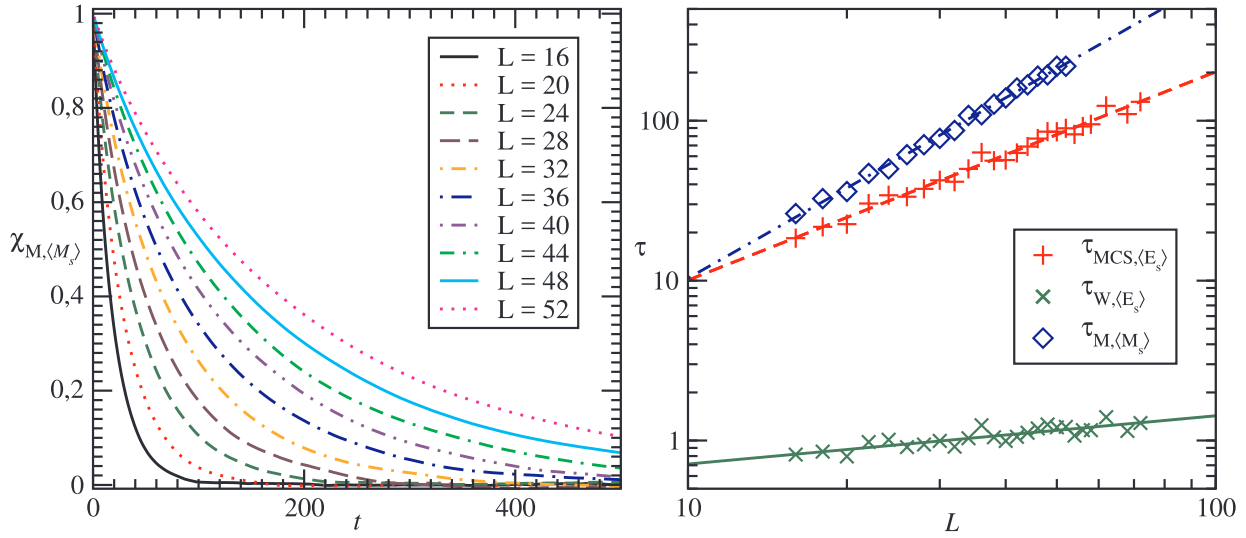


Fig. 8. The left hand side graph shows the autocorrelation function $\chi_{M, \langle M_s \rangle}$ of the magnetization $\langle M_s \rangle$ depending on the time shift t for the Metropolis algorithm in the Ising point $K_4 = 0$ and $K_2 = 0.221655$ for system sizes L provided in the legend box. The graph on the right hand side presents the dependence of the correlation time length τ on the size L of the investigated system in logarithmic scales. The physical parameters and the algorithm by which they were determined (W-Wolff, M-Metropolis) are presented in the legend box. Based on the slope of the $\tau(L)$ function, one can determine the value of the critical exponent z value. Error bars are of the order of magnitude of symbols.

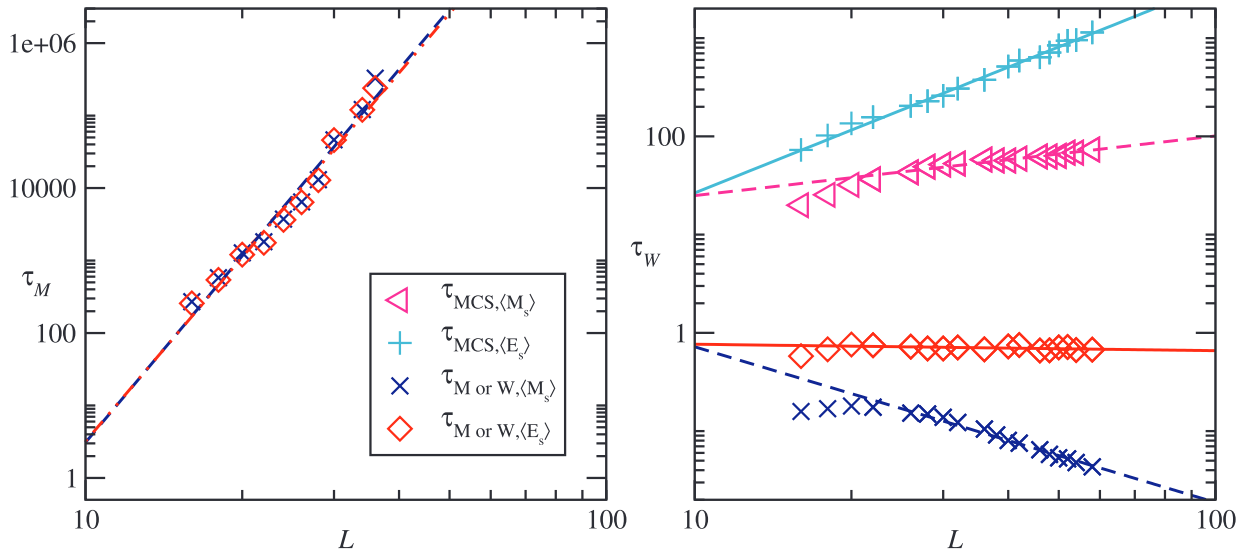


Fig. 9. The values of integral correlation times depending on the system size L for the Metropolis algorithm (the left hand side graph) and for our cluster algorithm of the Wolff type (the right hand side graph) of various physical parameters given in the legend box for the critical point with $K_4 = 0.1$ and $K_2 = 0.183846$. Both axes have logarithmic scales. Error bars are of the order of magnitude of symbols.

To conclude about efficiency of our cluster algorithm, we have checked that the execution times for samples of the same size L are comparable when we analyze points beyond the critical region where clusters are too small to compensate for the greater complexity of the Wolff-type algorithm. In contrast, we observe the higher efficiency of our cluster algorithm in the vicinity of the phase transition point, where larger spin clusters dominate and the execution times of programs are about 30% shorter compared to the case of using the Metropolis algorithm with the same Hamiltonian parameters, sample size L and the number of MCS. It is worth mentioning here that we also observe a certain increase in the efficiency of our cluster algorithm as the lattice size L increases, although this increase is modest in comparison to the large decline in the critical slowing down (for comparison see *e.g.* [45]).

For the reasons indicated in the previous paragraph, we also

conclude that it is better to exploit the Metropolis algorithm beyond a critical region because its lower complexity allows to achieve lower uncertainties of the determined thermodynamic quantities values with a slightly shorter program run time, as we can take the larger number of MCS. In the critical region, however, large clusters dominate and this effect, with a surplus, compensates for the greater complexity of our cluster algorithm, in effect giving the results with comparable uncertainties in a shorter time.

Using the bibliographic methods of algorithm comparison, we have shown in SubSection 5.3 that our Wolff-type cluster algorithm at point A, in which the AT model reduces to the Ising model, shows only small critical slowing down (z is of order of 0.3 and this value agrees with the bibliographic data for the 3D Ising model within the limits of uncertainties), as opposed to a large slowing down ($z \approx 2.02$) for the

Metropolis algorithm. For all analyzed points along line AP in the phase diagram shown in Fig. 1, the critical exponent z_W calculated for our cluster algorithm is significantly smaller than z_M determined for the Metropolis algorithm.

The comment is also required on the negative values of the critical exponents $z_{W,(E_s)}$ and $z_{W,(M_s)}$ obtained in the penultimate paragraph of SubSection 5.3 when taking into account the ratio of the average cluster size to the size of the system using Eq. (17), which we do in order to compare the performance of both algorithms. The negative value of z means that less than an entire lattice update is sufficient to decorrelate $\langle E_s \rangle$ or $\langle M_s \rangle$. Similar effect was observed when the Wolff algorithm was applied to the Ising model [46].

Preliminary results obtained by us in the region with $K_4 < 0$ indicate similar conclusions, but the situation here is more complex due to the fact that the individual terms in Hamiltonian (1) describe ferro- and antiferromagnetic interactions. Therefore, the bibliographic results for this region of the phase diagram are modest.

Acknowledgments

Numerical computations were carried out on the computing platforms of the Poznań Supercomputing and Networking Center as well as of Faculty of Physics at Adam Mickiewicz University in Poznań.

References

- [1] J. Ashkin, E. Teller, Phys. Rev. 64 (1943) 178, <https://doi.org/10.1103/PhysRev.64.178>.
- [2] J.P. Santos, F.C. SáBarreto, J. Magn. Magn. Mater. 401 (2016) 724, <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2018.08.030> J.P. Santos, J.A.J. Avila, D.S. Rosa, R.M. Francisco, J. Magn. Magn. Mater. 35 (2019) 724. doi:10.1016/j.jmmm.2018.08.030.
- [3] Ü. Akinci, Physica A 469 (2017) 740, <https://doi.org/10.1016/j.physa.2016.11.064>.
- [4] J.P. Santos, D.S. Rosa, F.C. Sá Barreto, Phys. Lett. A 272 (2018) 382, <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2017.11.029>.
- [5] R.M. Francisco, J.P. Santos, Phys. Lett. A 383 (2019) 1092, <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2019.01.001>.
- [6] I. Dani, N. Tahiri, H. Ez-Zahraouy, A. Benyoussef, J. Magn. Magn. Mater. 394 (2015) 27, <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2015.06.029>.
- [7] S. Jang, J.S. Lee, S. Hwang, B. Kahng, Phys. Rev. E 92 (2015) 022110, <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.92.022110>.
- [8] C. Fan, Phys. Lett. 39A (1972) 136, [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(72\)91051-1](https://doi.org/10.1016/0375-9601(72)91051-1).
- [9] Z. Wojtkowiak, G. Musiał, Physica A 513 (2019) 104, <https://doi.org/10.1016/j.physa.2018.08.166>.
- [10] D. Jeziorek-Kniola, G. Musiał, Z. Wojtkowiak, Acta Phys. Polon. A 127 (2015) 327, <https://doi.org/10.12693/APhysPolA.127.327>.
- [11] D. Jeziorek-Kniola, G. Musiał, L. Debski, J. Rogiers, S. Dylak, Acta Phys. Polon. A 121 (2012) 1105, <https://doi.org/10.12693/APhysPolA.121.1105>.
- [12] G. Szukowski, G. Kamieniarz, G. Musiał, Phys. Rev. E 77 (2008) 031124, <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.77.031124>.
- [13] G. Musiał, Phys. Rev. B 69 (2004) 024407, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.024407>.
- [14] P. Arnold, Y. Zhang, Nucl. Phys. B 501 (1997) 803, [https://doi.org/10.1016/S0550-3213\(97\)00405-7](https://doi.org/10.1016/S0550-3213(97)00405-7).
- [15] S. Sinha, S.K. Roy, Phys. Rev. E 81 (2010) 022102, <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.81.022102>.
- [16] A.K. Murtazaev, A.B. Babaev, J. Magn. Magn. Mater. 324 (2012) 3870, <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2012.06.038> A.K. Murtazaev, A.B. Babaev, G.Y. Ataevad, J. Magn. Magn. Mater. 440 (2017) 101. doi:10.1016/j.jmmm.2016.12.044..
- [17] R.H. Swendsen, J.S. Wang, Phys. Rev. Lett. 58 (1987) 86, <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.58.86>.
- [18] U. Wolff, Phys. Rev. Lett. 62 (1989) 361, <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.62.361>.
- [19] S. Gündüç, M. Dilaver, M. Aydın, Y. Gündüç, Comp. Phys. Commun. 172 (2005) 214, <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2004.09.008>.
- [20] M.E.J. Newman, G.T. Barkema, Monte Carlo Methods in Statistical Physics, Oxford University Press, Oxford, 1999.
- [21] J. Salas, A.D. Sokal, J. Stat. Phys. 85 (1996) 297, <https://doi.org/10.1007/BF02174209>.
- [22] D. Kandel, E. Domany, Phys. Rev. B 43 (1991) 8539, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.43.8539>.
- [23] S. Wiseman, E. Domany, Phys. Rev. E 48 (1993) 4080, <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.48.4080>.
- [24] S. Wiseman, E. Domany, Phys. Rev. E 51 (1995) 3074, <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.51.3074>.
- [25] J. Lee, J.M. Kosterlitz, Phys. Rev. B 43 (1991) 3265, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.43.3265>.
- [26] D. Jeziorek-Kniola, Z. Wojtkowiak, G. Musiał, Acta Phys. Polon. A 133 (2018) 435, <https://doi.org/10.12693/APhysPolA.133.435>.
- [27] G. Musiał, Phys. Stat. Sol. B 236 (2003) 486, <https://doi.org/10.1002/pssb.200301710>.
- [28] G. Musiał, L. Debski, Lect. Notes Comput. Sci. 2328 (2002) 535, https://doi.org/10.1007/3-540-48086-2_59.
- [29] G. Musiał, L. Debski, D. Jeziorek-Kniola, K. Goła, Lect. Notes Comput. Sci. 4967 (2008) 429, https://doi.org/10.1007/978-3-540-68111-3_45.
- [30] T. Preisab, P. Virnau, W.P. Johannes, J. Schneider, J.L. Lebowitz, J. Comput. Phys. 228 (2009) 4468, <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2009.03.018>.
- [31] Y. Komura, Y. Okabe, J. Comput. Phys. 231 (2012) 1209, <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2011.09.029>.
- [32] T.A. Kampmann, Horst-Holger Boltz, J. Kierfel, J. Comput. Phys. 281 (2015) 864, <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2014.10.059>.
- [33] K. Binder, D.P. Landau, Phys. Rev. B 30 (1984) 1477, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.30.1477>.
- [34] G. Musiał, L. Debski, G. Kamieniarz, Phys. Rev. B 66 (2002) 012407, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.012407>.
- [35] W. Janke, Lect. Notes Phys. 739 (2008) 79, https://doi.org/10.1007/978-3-540-74686-7_4.
- [36] M.S.S. Challa, D.P. Landau, K. Binder, Phys. Rev. B 34 (1986) 1841, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.34.1841>.
- [37] J.-P. Lv, Y. Deng, J.L. Jacobsen, J. Salas, A.D. Sokal, Phys. Rev. E 97 (2018) 040104(R), <https://doi.org/10.1088/1751-8121/aad1fe>.
- [38] K. Oerding, H.K. Janssen, J. Phys. A 4271 (1995) 28, <https://doi.org/10.1088/0305-4470/28/15/008>.
- [39] P.D. Coddington, C.F. Baillie, Phys. Rev. Lett. 962 (1992) 68, <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.68.962>.
- [40] D. Ivaneykova, J. Ilnytskyib, B. Berchec, Yu. Holovatch, Physica A 370 (2006) 163, <https://doi.org/10.1016/j.physa.2006.03.010>.
- [41] R.V. Ditzian, J.R. Banavar, G.S. Grest, L.P. Kadanoff, Phys. Rev. B 22 (1980) 2542, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.22.2542> J.-P. Lv, Y. Deng, Q.-H. Chen. Phys. Rev. E 84 (2011) 021125. doi:10.1103/PhysRevE.84.021125; J.P. Santos, F.C. S Barreto, Physica A 421 (2015) 316. doi:10.1016/j.physa.2014.11.043.
- [42] W. Janke, Statistical analysis of simulations: data correlations and error estimation, in: J. Grotendorst, D. Marx, A. Muramatsu (Eds.), Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms, Lecture Notes, NIC Series, vol. 10, John von Neumann Institute for Computing, Julich, 2002, pp. 423–445.
- [43] A.M. Ferrenberg, J. Xu, D.P. Landau, Phys. Rev. E 97 (2018) 043301, <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.97.043301>.
- [44] P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche, W. Janke, Eur. Phys. J. B 38 (2004) 463, <https://doi.org/10.1140/epjb/e2004-00141-x>.
- [45] A. Billoire, R. Lacazem, A. Morel, S. Gupta, A. Irbäck, B. Petersson, Nucl. Phys. B 358 (1991) 231, [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(91\)90539-A](https://doi.org/10.1016/0550-3213(91)90539-A).
- [46] P. Tamayo, R.C. Brower, W. Klein, J. Stat. Phys. 58 (1990) 1083, <https://doi.org/10.1140/epjb/e2003-00076-8>.



Contents lists available at ScienceDirect

Physica A

journal homepage: www.elsevier.com/locate/physa

Wide crossover in the 3D Ashkin–Teller model

Z. Wojtkowiak*, G. Musiał

Faculty of Physics, A. Mickiewicz University, ul. Umultowska 85, 61-614 Poznań, Poland



H I G H L I G H T S

- The phase diagram region is explored for which non-universal behavior was signaled.
- Various well-established methods were used in large-scale computer experiments.
- A new tricritical point was found and determined on the phase diagram.
- Different phase transitions are observed on various order parameter components.
- Latent heat is non-zero along the whole line, but 0 is in the uncertainty interval.

A R T I C L E I N F O

Article history:

Received 4 February 2018

Received in revised form 22 July 2018

Available online 27 August 2018

Keywords:

The standard 3D Ashkin–Teller model

Temperature driven phase transitions

Tricritical points

Wide crossover

A B S T R A C T

The phase transition line, for which the possibility of the non-universal behavior studied by Monte Carlo (MC) simulations had been announced, in the standard 3D Ashkin–Teller (AT) model phase diagram is carefully investigated. The results of our MC experiments for transitions between paramagnetic, mixed, and Baxter phases for negative coupling between neighboring spin pairs, the most complex and least recognized region in the phase diagram, are presented. Binder, Challa, and also for the first time of Lee–Kosterlitz cumulants, the last two adapted to the AT model, are exploited. The uncommon coexistence of continuous and first order phase transitions along the same phase boundary on different components of the order parameter are reported. The paper is closed with the conclusion of a wide crossover effect that covers the whole line between tricritical points, where earlier papers indicate the possibility of non-universal behavior with the critical exponent values varying continuously.

© 2018 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

The Ashkin–Teller (AT) model is one of the most important in statistical physics and every year a dozen works are devoted to it (see e.g. [1–3] and the papers cited therein), as it is the non-trivial generalization of the widely exploited Ising model and it shows the complex phase diagram. Moreover, the Monte Carlo (MC) simulation results published so far suggest the possibility of the occurrence of the non-universal behavior here in both the 3D model [4–6] and the 2D one [7–10].

The 2D AT model violates the universality hypothesis, having exponents with values varying continuously with a change of values for $K_4 < 0$ [7]. The possibility of the analogous behavior in 3D system has been signaled [4,6]. The problem of how the crossover from universal to nonuniversal behavior is realized in the isotropic limit remains for years almost completely unsolved, even at a heuristic level [9]. Non-universal critical exponent values also occur in other systems, e.g. in different varieties of XY model [11–13], and apart from the Ising also the XY behavior has been indicated for transitions in this phase diagram region [4], however, usually the crossover effect is limited to the close neighborhood of a tricritical point.

* Corresponding author.

E-mail address: zbigniew.wojtkowiak@amu.edu.pl (Z. Wojtkowiak).

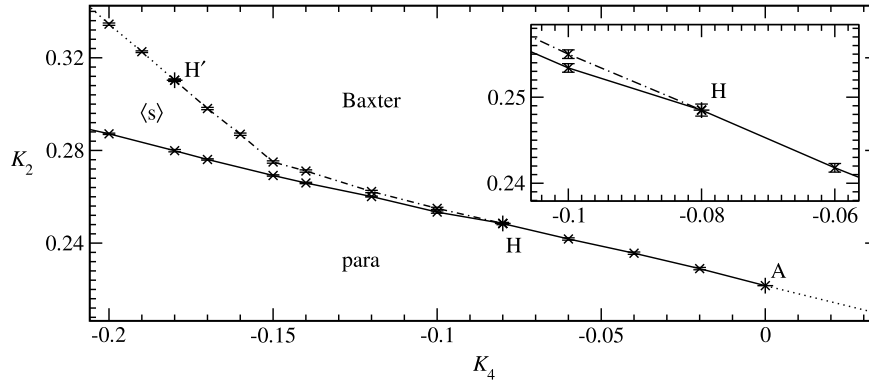


Fig. 1. The investigated region of the phase diagram of the standard 3D AT model on a cubic lattice. Our MC experiment results are marked by \times symbols whereas the tricritical points are denoted by $+$ ones. The dotted lines denote phase transitions of the 1st order, the solid lines stand for continuous transitions, and the dotted–dashed line indicates transitions of both types for different components of the order parameter. The phase labeled “Baxter” is ferromagnetically ordered with all $\langle s \rangle$, $\langle \sigma \rangle$ and $\langle s\sigma \rangle$ order parameter components non-zero, whereas in the phase “para” they are all zero. For the mixed phase region “ s ” $\langle s\sigma \rangle = 0$ and $\langle s \rangle$ or $\langle \sigma \rangle$ is ferromagnetically ordered but the other is not.

Our MC experiment results for large system sizes basically confirm the existence of the continuous phase transitions in this region. As to the nature of these transitions, we suggest the explanation of the previously observed [4–6] deviation from the universality hypothesis.

Our computer experiments exploit the properties of Binder [14] cumulant as well as, Challa [15], and Lee–Kosterlitz [16] like ones, adapted by us to compute the latent heat not only of the whole system, but also to calculate the contribution from each kind of degrees of freedom separately. This is clarified in Section 2.

Ashkin and Teller have proposed their lattice model for four component mixture [17], but the interest to it significantly increased after Fan’s work [18] expressing it in terms of two Ising models put on the same lattice with spins s_i and σ_i at each lattice site i . Only two-spin interactions of a constant magnitude J_2 between the nearest neighbors are taken into account here. These independent Ising models are coupled by the four-spin interaction of a constant magnitude J_4 , also only between couples of nearest-neighboring spins, leading to the effective Hamiltonian H

$$-\frac{H}{k_B T} = \sum_{[i,j]} \{K_2(s_i s_j + \sigma_i \sigma_j) + K_4 s_i \sigma_i s_j \sigma_j\}. \tag{1}$$

In Eq. (1) $K_i = -J_i/k_B T$, with $i = 2$ or 4 , $[i, j]$ denotes summation over nearest-neighboring lattice sites, T is the temperature of the system and k_B is the Boltzmann constant. We consider the standard 3D AT model put on the cubic lattice. It should be called the standard one as there are many extensions of the AT model.

The cause of the complex nature of the $K_2(K_4)$ phase diagram of this model is the fact that two components of the order parameter $\langle s \rangle$ and $\langle \sigma \rangle$ can order independently and the quantity $\langle s\sigma \rangle$ exhibits similar independent behavior where the symbol $\langle \dots \rangle$ denotes the thermal average. Thus, $\langle s \rangle$, $\langle \sigma \rangle$ and $\langle s\sigma \rangle$ can be considered also as separate order parameters. The current state of knowledge about the studied region of the phase diagram is completed in Fig. 1. The results of our MC experiments and marked by \times symbols, whereas the tricritical points are denoted by $+$ ones.

The aim of this paper is to exploit our large-scale MC computer experiments, explained in Section 2, to verify the basic assumption of continuous character of phase transitions made in the papers [4–6] when reporting the possibility of the non-universal behavior on the MC simulation basis. For this purpose we check carefully presence of the latent heat in the 3D AT model along the line AHH' .

This is the most complex region of the phase transition diagram in Fig. 1 as the terms in Hamiltonian (1) have comparable values and different signs. A, H and H' are the tricritical points. A is the continuous Ising phase transition point situated at $K_4 = 0$. We report that H is the point at which the latent heat becomes zero in the phase transitions only for the degrees of freedom s and σ within error bars when going towards the greater values of K_4 . We have discovered that similar situation is at H' which is a new tricritical point for the degrees of freedom $s\sigma$.

2. Our computer experiment

We consider sufficient finite-size cubic samples of the standard AT model to be able to compute the thermodynamic limit of the results and to obtain the results suitable for a macroscopic system. Performing our MC computer experiments, we compute not only the thermodynamic quantities but also determine their error bars. The considered sample sizes $16 \leq L \leq 53$ are much larger than taken before.

We perform our computer experiments to predict the equilibrium behavior of the standard AT model according to the statistical mechanics methodology [5,6,19,20]. The behavior of a system is fully determined by the Hamiltonian, here defined

by Eq. (1). Thus, we generate equilibrium configurations (often called microstates) of finite-size cubic spin samples $L \times L \times L$ for fixed values of the model parameters described above at Hamiltonian (1) using the Metropolis algorithm. The considered sample sizes $16 \leq L \leq 53$ are much larger than those taken before. As our final results are calculated in the thermodynamic limit, we assume convenient periodic boundary conditions. We first apply thermalization of the length of order of 10^6 Monte Carlo steps (MCS) to bring the system to the thermodynamic equilibrium. We define one MCS in our computer experiment when each of the lattice sites has been visited once. In the case that it is energetically beneficial, the spin-flip takes place automatically. Otherwise, the probability of the spin-flip is equal to $e^{-2(K_2+K_4)}$.

We split each MC run into k ($6 \leq k \leq 10$) segments called partial averages to determine uncertainties of the measured quantities. Such a partial average consists from 0.4×10^6 MCS for smallest L values up to 3.6×10^6 MCS for the largest L 's. Moreover, only every i th MCS contributed (with $8 \leq i \leq 10$) in the computation of the partial averages to avoid correlations between sampled microstates of spins and to sample microstates with the Gibbs probability distribution. In this way we ensure that our program spends most of time working with states giving the largest contribution to the computed quantities.

Our MC computer experiments take from 20 hours for smallest L 's up to a couple of weeks for the largest L values considered when applying sequential processing. To complete the results of this paper, hundreds of such runs have been executed.

To pre-locate a temperature-driven phase transition point, we fix the particular value of K_4 coupling and analyze the Binder cumulant $Q_{\alpha,L}(K_2)$ dependences (see e.g. [14,21,22])

$$Q_{\alpha,L} = \frac{\langle M_{\alpha}^2 \rangle_L^2}{\langle M_{\alpha}^4 \rangle_L}, \quad (2)$$

where $\langle M_{\alpha}^n \rangle_L$ denotes the n th power of the order parameter of α degrees of freedom, with $\alpha = s, \sigma$ or $s\sigma$, averaged over an ensemble of independent samples of the size $L \times L \times L$ in agreement with the statistical physics methodology. The dependences $Q_{\alpha,L}(K_2)$ for different L intersect mutually around the critical point $K_{2,c}$, because for $L_1 < L_2$ and at $K_2 < K_{2,c}$ we have $Q_{\alpha,L_1}(K_2) > Q_{\alpha,L_2}(K_2)$, while at $K_2 > K_{2,c}$ occurs $Q_{\alpha,L_1}(K_2) < Q_{\alpha,L_2}(K_2)$ [14,23]. This method of initial localization of the critical K_2 value is applicable for both, continuous and first order phase transition points.

For better estimation of a phase transition point position and to calculate the latent heat, we compute also the Challa [15]

$$V_{\alpha,L} = 1 - \frac{\langle E_{\alpha}^4 \rangle_L}{3\langle E_{\alpha}^2 \rangle_L^2} \quad (3)$$

and Lee–Kosterlitz [16]

$$U_{\alpha,L} = \frac{\langle E_{\alpha}^2 \rangle_L}{\langle E_{\alpha} \rangle_L^2} \quad (4)$$

like cumulants. In Eqs. (3) and (4) $\langle E_{\alpha}^n \rangle_L$ is the n th moment of the interaction energy of α -degrees of freedom ($\alpha = s, \sigma$ or $s\sigma$) in Hamiltonian (1) separately, which is averaged over an ensemble of independent samples of the size $L \times L \times L$. The Challa and Lee–Kosterlitz cumulants have been adapted [5,24] by taking also the individual terms in Hamiltonian (1) for E to be able to compute the latent heat for each component of the order parameter separately [5,19,20]. Of course we also take all terms in the Hamiltonian (1) for E as originally proposed by Challa et al. [15] and by Lee and Kosterlitz [16]. We expect that the latent heat l_H computed on the basis of the whole Hamiltonian (1) will be equal to the sum of the latent heats l_{α} ($\alpha = s, \sigma$ or $s\sigma$) coming from α degrees of freedom within their error bars.

We qualify a phase transition as continuous when $V_{\alpha,L} = 2/3$ and $U_{\alpha,L} = 1$ in their thermodynamic limits within the respective error bars [5,15,16,19], whereas for a first order phase transition the dependences $V_{\alpha,L}(K_2)$ have characteristic local minima [5,15,25] and $U_{\alpha,L}(K_2)$ have characteristic local maxima [16]. For better location these extrema are fitted by a polynomial of the third degree in a narrow range around. As the error bar values of the extrema of these cumulants, we assume the maximum deviation of the points determined in our MC experiments from the fitted curves [5]. Thus, we have the important criterion: when the thermodynamic limit $V_{\alpha,L}^{\min}$ value with its error bar remains different from $2/3$ and $U_{\alpha,L}^{\max}$ value with its error bar remains different from 1 , a phase transition is qualified to be of the first order [5,15,16,19,20]. As locations of minima $K_{2,\alpha}^{\min}$ and maxima $K_{2,\alpha}^{\max}$ also scale linearly versus L^{-3} [5,15,16,25], we extrapolate them to the thermodynamic limit. These limit values are the better estimations of the critical K_2 value than those obtained from the above mentioned intersection region of the Binder cumulant $Q_{\alpha,L}(K_2)$ dependences.

The partial latent heat l_{α} related to the above mentioned interaction energy E_{α} of α -degrees of freedom in the limit $L \rightarrow \infty$

$$l_{\alpha} = E_{\alpha,+} - E_{\alpha,-}, \quad (5)$$

where $E_{\alpha,\pm} = E_{\alpha}(K_2 \rightarrow K_{2,c}|\pm)$, is determined on the basis of the Lee–Kosterlitz formula [16,25,26]

$$V_{\alpha,L}^{\min} = \frac{2}{3} - \frac{1}{12} \left(\frac{E_{\alpha,+}}{E_{\alpha,-}} + \frac{E_{\alpha,-}}{E_{\alpha,+}} \right)^2 + \frac{A_V}{L^3} \quad (6)$$

and using the method proposed in [5]. In Eq. (6) A_V stands for L independent complicated expression [16]. Eq. (6) allows us to determine $V_{\alpha,\infty}^{\min}$ limit value using the linear regression to analyze our $V_{\alpha,\infty}^{\min}(L^{-3})$ computer experiment data. Similar

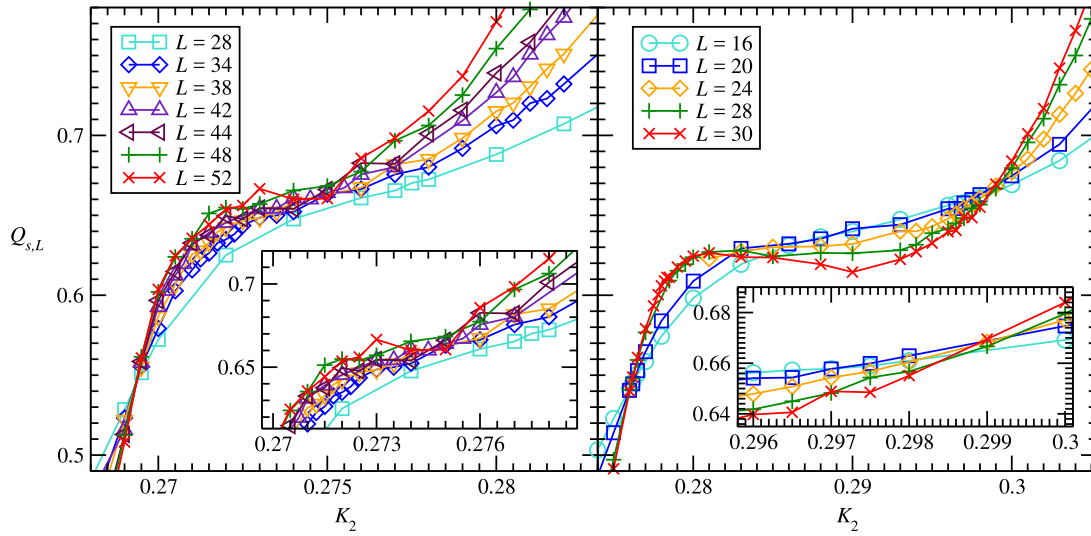


Fig. 2. The Binder cumulants $Q_{\alpha,L}(K_2)$ dependences for $\alpha = s$ and for the system size L values specified in the legend box at the fixed value $K_4 = -0.15$ (the graph on the left) and at $K_4 = -0.17$ (the graph on the right). The inset of the graph on the left shows that these curves intersect also in this region but for large enough $L > 40$ values, while this problem does not yet occur in the graph on the right for $K_4 = -0.17$.

analysis has been recently applied respectively to the first order phase transitions with an exponential low temperature phase degeneracy [27].

According to the method proposed in [5], we compute the value E_- by equating this $V_{\alpha,\infty}^{\min}$ value to the first term on the right hand side of Eq. (6) and using the value E_+ estimated from the $E_{\alpha,L}(K_2)$ energy plot for the finite-size samples. Having E_+ and E_- values, l_α is calculated from Eq. (5). Obviously, the latent heat of the whole system should be the sum of the partial ones within error bars. To calculate the latent heat l_α for weak phase transitions of the first order, we could use the approximation of Challa et al. [15,19], which is an alternative to Eq. (6). Although Eq. (6) has been derived for strong phase transitions, but our analyzes show that it gives correct results also for the weak ones.

Analogously we determine the latent heat l_α using our values of $U_{\alpha,L}$ cumulant maxima scaled to the thermodynamic limit for each component of the order parameter independently, as well as for the whole system, using the Lee–Kosterlitz formula

$$U_{\alpha,L}^{\max} = \frac{(E_{\alpha,+} + E_{\alpha,-})^2}{4E_{\alpha,+}E_{\alpha,-}} + \frac{A_U}{L^3}, \quad (7)$$

where A_U stands for L independent complicated expression [16]. It is worth noting that when the latent heat l_α tends to zero, $V_{\alpha,\infty}^{\min}$ approaches the value $2/3$ and $U_{\alpha,\infty}^{\max}$ approaches the value 1, as described above for continuous phase transitions.

For strong phase transitions of the first order, a characteristic histogram of the internal energy E distribution with two peaks in the critical area can be observed [16,24]. The maxima of these peaks appear at the energy value $E_{-,L}$ for the ordered state and at $E_{+,L}$ for the unordered one which are separated by the minimum of $E_{m,L}$ value. Technically, the histogram is computed by dividing the range of all internal energy E values (in units of $k_B T$) appearing in our computer experiments into small subintervals and the program counts the energy occurrence in the individual subintervals. Next, dividing the received individual values by their sum, we get the probability P of the energy E appearance in the individual subintervals in the system of the finite size L^d , with dimensionality $d = 3$ here. The $P_L(E_\alpha, \beta)$ values are calculated independently for each degree of freedom $\alpha = s, \sigma, s\sigma$, as well as for the whole Hamiltonian (1), at a critical value $K_{2,c}$ of the parameter K_2 determined from the above mentioned analyzes using cumulants Q_L [21,22], V_L [15] and U_L [16] at a fixed value of K_4 . Here $\beta = 1/k_B T$. However, for continuous phase transitions only a single peak is observed.

3. The results and conclusions

As explained in Section 2, the temperature-driven phase transition points at fixed values of the coupling K_4 have been pre-located from the intersection points [14,23] of the Binder cumulant curves $Q_{\alpha,L}(K_2)$ specified by Eq. (2) [5,22]. In the left hand side graph of Fig. 2 there appear two regions at $K_{2,c} = 0.2693(3)$ and $K_{2,c} = 0.275(5)$ where $Q_{\alpha,L}(K_2)$ curves intersect in such a way that for $L_1 < L_2$ and at $K_2 < K_{2,c}$ one has $Q_{\alpha,L_1}(K_2) > Q_{\alpha,L_2}(K_2)$, while at $K_2 > K_{2,c}$ there is $Q_{\alpha,L_1}(K_2) < Q_{\alpha,L_2}(K_2)$, as explained below Eq. (2). Similar situation appears on the right hand side graph of Fig. 2 at $K_{2,c} = 0.2761(3)$ and $K_{2,c} = 0.299(5)$. The analyses have been performed independently for $\langle \alpha \rangle$ components of the order parameter with $\alpha = s, \sigma$ and $s\sigma$ (see e.g. [5,21,22]) allowing us to estimate at least three decimal digits of the K_2 coupling critical value for the upper intersection region in Fig. 2 and four digits for the lower one. The lower intersection region should

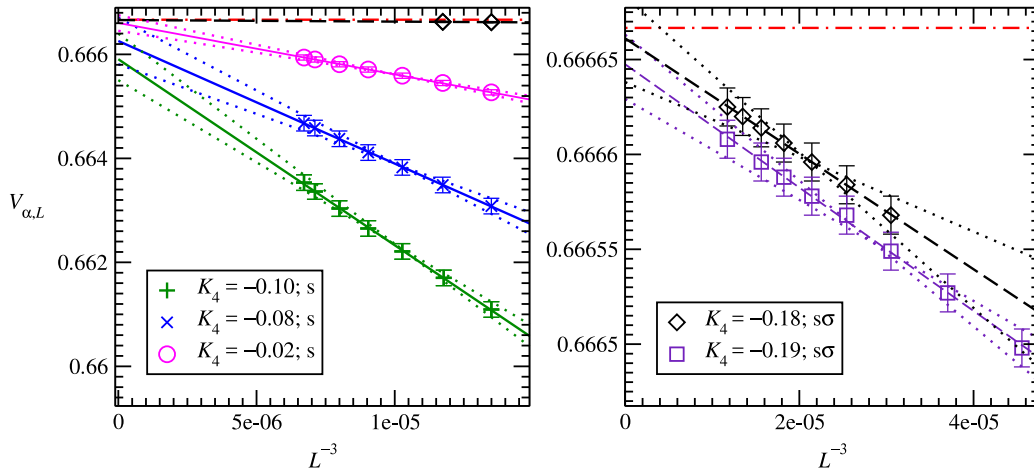


Fig. 3. The values of Challa-like cumulants $V_{\alpha,L}^{min}$ minima extrapolated to the thermodynamic limit for $\alpha = s$ (the solid line; the line for $\alpha = \sigma$ falls within the line thickness) and $\alpha = s\sigma$ (the dashed line) at the fixed values of the coupling K_4 and for degrees of freedom explained in the legend boxes. The dependences are fitted by straight solid and dashed lines using the linear regression. For clarity, the results for selected K_4 values are presented only. The dotted lines illustrate the ordinate $V_{\alpha,\infty}^{min}$ uncertainty estimation and are explained in the text. The dotted–dashed line marks $V = 2/3$ limit value.

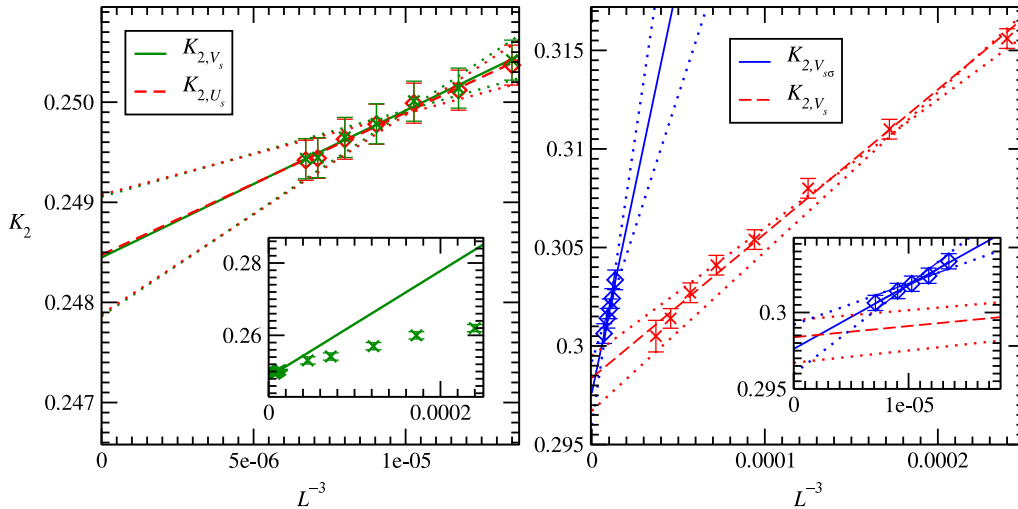


Fig. 4. The values of abscissas K_2^{min} (diamonds) and K_2^{max} (\times symbols) of the cumulant $V_{\alpha,L}$ minima and $U_{\alpha,L}$ maxima, respectively, extrapolated to the thermodynamic limit for $\alpha = s$ (the line for $\alpha = \sigma$ falls within the line thickness) at the fixed value $K_4 = -0.08$ (the graph on the left) and at $K_4 = -0.17$ for $\alpha = s$ and $s\sigma$ (the graph on the right). The dependences are fitted by straight solid and dashed lines, explained in the legend boxes, using the linear regression. The dotted lines illustrate the critical K_2 value uncertainty estimation.

be identified with the transition from the paramagnetic to $\langle s \rangle$ phase in Fig. 1, whereas the upper intersection region indicates the transition from $\langle s \rangle$ to the Baxter phase. Only for the large enough system size L one can see the upper intersection region when approaching the H point from the left hand side in Fig. 1 what is typical behavior in the vicinity of the bifurcation point. Therefore, we observe the intersections of the curves $Q_{\alpha,L}(K_2)$ in the inset of the left hand side graph in Fig. 2 only at $L > 40$ for the transition between the Baxter and the mixed $\langle s \rangle$ phases. One needs the greater L values the closer bifurcation and tricritical point H we are. For $-0.08 \leq K_4 \leq 0$ we observe only one intersection point region what means that H in Fig. 1 is the bifurcation point which should be pre-located in $-0.09 \leq K_4 \leq -0.07$ interval.

The essential element for this paper is to compute the latent heat of phase transitions along the line AHH' in Fig. 1. For this purpose we have analyzed $V_{\alpha,L}^{min}(L^{-3})$ dependences using linear regression as explained in Section 2 below Eq. (6). The examples of such analyses are shown in Fig. 3 for minima ordinates $V_{\alpha,L}^{min}$ and in Fig. 4 for minima abscissas $K_{2,L}^{min}$ at the fixed values of the coupling $K_4 = -0.1, -0.08,$ and -0.02 for degrees of freedom s and $s\sigma$ as explained in the legend box (the results for spins σ are similar because of the symmetry of the Hamiltonian (1)). For clarity we have plotted our results only for selected values of the system linear size L . It is natural that abscissas and ordinates of dependences $V_{\alpha,L}^{min}(K_2)$ deflect from the linearity for L less than some terminal value L_t [15]. We observe that the value of L_t increases as one approaches the bifurcation point. That is why $V_{s,L}^{min}$ data are linearly correlated versus L^{-3} only for the system size $L \geq 42$ as shown in the

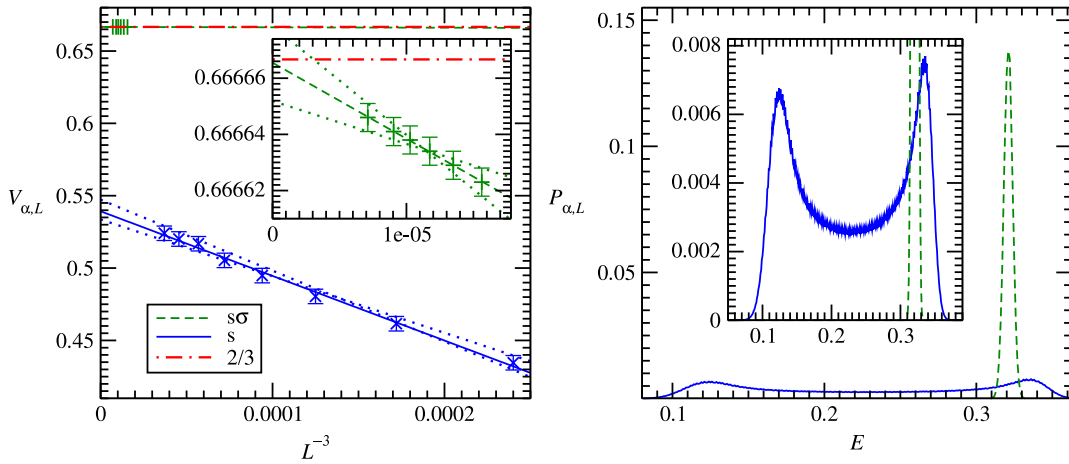


Fig. 5. The graph on the left hand side presents the values of Challa-like cumulants $V_{\alpha,L}^{min}$ minima extrapolated to the thermodynamic limit for $\alpha = s$ and $s\sigma$ explained in the legend box at the fixed values of the coupling $K_4 = -0.17$. The dependences are fitted by straight solid and dashed lines, explained in the legend box, using the linear regression. The dotted lines illustrate the ordinate $V_{\alpha,\infty}^{min}$ error bar estimation. The graph on the right hand side shows the internal energy E distribution histogram for the phase transition point with $K_4 = -0.17$ and $K_{2,c} = 0.298$ at $L = 28$. The solid line shows two probability $P_{\alpha,L}$ peaks for degrees of freedom $\alpha = s$, while the broken line presents only one peak for degrees of freedom $\alpha = s\sigma$, as described in the legend box of the left hand side graph.

Table 1

Latent heat l_α values for degrees of freedom α with $\alpha = s$ (the results for $\alpha = \sigma$ are similar because of the symmetry of the Hamiltonian (1)) and $\alpha = s\sigma$ at the coupling constant $K_4 < 0$. The bar means no characteristic extrema of cumulants V and U , which clearly indicates the continuous character of a phase transition. The results highlighted in bold type contain zero within the error bar.

K_4	$K_{2,c}$	l_s (or l_σ)	$l_{s\sigma}$
-0.19	-0.3226(4)	0.194(5)	0.0015(9)
-0.18	-0.3102(5)	0.1742(20)	0.0008(10)
-0.17	-0.2980(9)	0.1506(20)	0.0003(11)
-0.1	-0.2550(5)	0.011(5)	-
-0.08	-0.2485(7)	0.008(12)	-
-0.06	-0.2418(5)	0.006(7)	-
-0.04	-0.2357(5)	0.004(6)	-
-0.02	-0.2290(5)	0.003(5)	-
0	-0.221655(25)	-	-

inset of the left hand side graph of Fig. 4. We have observed such specific behavior of these curves also for weak first order phase transitions close to the Ising point A at $K_4 > 0$ [19]. Passing through error bars, the dotted lines in Figs. 3–5 are deflected to the maximum degree up and down from the solid and the dashed ones. Their intersection points with ordinate axis determine the respective $V_{s,\infty}^{min}$ and K_2 error bars.

To average the scatter of the results and to determine more precisely the ordinates $V_{\alpha,L}^{min}$ or $U_{\alpha,L}^{max}$ and the abscissas $K_{2,L}^{min}$ or $K_{2,L}^{max}$ of these extrema, our MC computer experiment $V_{\alpha,L}(K_2)$ and $U_{\alpha,L}(K_2)$ data were approximated by a polynomial of the third degree in the extrema regions. Nevertheless, the uncertainties of the ordinates and of the abscissas of these extrema fully take into account this scatter as explained below Eq. (6) in Section 2 because the uncertainties should always be rounded up.

The data presented in the left hand side graph of Fig. 3 and collected in Table 1 are important for location of the tricritical point H, as for $K_4 = -0.1$ we have $V_{s,\infty}^{min} = 0.6659(4)$ what gives the latent heat $l_s = 0.011(5)$, but for $K_4 = -0.08$ $V_{s,\infty}^{min} = 0.6663(5)$ and $l_s = 0.008(12)$, as explained in Section 2. The letter contains 0 within the error bar. Thus, according to the criterion specified in the paragraph next to Eq. (4) we locate the tricritical point H at $K_4 = -0.08$ and from analyses in the left hand side graph in Fig. 4 we have determined the critical value $K_2 = 0.2485(7)$ for spins s and σ .

Similar analyses for degrees of freedom $\alpha = s\sigma$ in the right hand side graph of Fig. 3 indicate that the latent heat drops to 0 within the error bar at $K_4 = -0.18$, as $V_{s\sigma,\infty}^{min} = 0.66661(23)$ and $l_{s\sigma} = 0.0008(10)$ here. On the other hand, for the point $K_4 = -0.19$ $V_{s\sigma,\infty}^{min} = 0.666647(17)$ which means that the latent heat value $l_{s\sigma} = 0.0015(9)$ does not contain 0 within the error bar, as explained in Section 2. In conclusion, we want to emphasize that phase transitions for degrees of freedom $s\sigma$ at $K_4 \geq -0.18$ should be classified as continuous. Abscissas of the $V_{s\sigma,L}^{min}$ minima extrapolated to the thermodynamic limit give the critical value $K_2 = 0.3102(5)$. Thus, the tricritical point H' for degrees of freedom $s\sigma$ is situated at the point $(-0.18, 0.3102)$ in the phase diagram in Fig. 1.

As we see in the left hand side graph of Fig. 4, the analyses for $U_{\alpha,L}$ cumulants give almost the same results as those for $V_{\alpha,L}$ cumulants. The results for $U_{\alpha,L}$ cumulants, which are applied by us for the first time to the AT model, also validate our computer experiments [5,19,20] based so far only on $V_{\alpha,L}$ cumulants.

The left hand side graph in Fig. 5 shows the scaling of the finite-size system cumulants $V_{\alpha,L}$ minima to the thermodynamic limit for degrees of freedom $\alpha = s$ and σ at $K_4 = -0.17$. In the thermodynamic limit their values $V_{s,\infty}^{min} = 0.539(5)$ and $V_{\sigma,\infty}^{min} = 0.66666(17)$, respectively. Thus, the latent heat $l_s = 0.1506(20)$ and $l_{\sigma} = 0.0003(11)$. On this basis, we find that we have here the phase transition of the first order for the degrees of freedom $\alpha = s$ and σ , and at the same time continuous for $\alpha = \sigma$ along the same line H'H in Fig. 1. Such coexistence of first order and continuous phase transitions for various components of the order parameter along the same boundary is uncommon.

Scaling the positions of extrema of $V_{\alpha,L}(K_2)$ and $U_{\alpha,L}(K_2)$ dependences to the thermodynamic limit allows us to precisely determine the location of a phase transition, i.e. the critical value of K_2 , as explained below Eqs. (3) and (4) in Section 2. The critical value of K_2 determined on the basis of intersections of the cumulant $Q_{s,L}$ dependencies shown in the right hand graph of Fig. 2 is $K_{2,s}^Q = 0.299(5)$. However, the values obtained by scaling the positions of minima of cumulants $V_{\alpha,L}$ in the right hand side graph of Fig. 4 at $K_4 = -0.17$ are more accurate and appropriately equal to $K_{2,s}^{min} = 0.2984(9)$ and $K_{2,\sigma}^{min} = 0.2976(6)$ and are consistent within the error bars. Hence, the phase transition point at $K_4 = -0.17$ was determined as the average value of these two results giving $K_2 = 0.2980(9)$ which is shown in Table 1.

For $K_4 = -0.17$ we have also analyzed the internal energy E distribution histogram shown in the right hand side graph of Fig. 5. For degrees of freedom $\alpha = s$ we see two distinct probability $P_{\alpha,L}$ peaks corresponding to the energies $E_{-,L}$ and $E_{+,L}$, while for degrees of freedom $\alpha = \sigma$ there is only one peak. As explained in the last paragraph of Section 2, it confirms the occurrence of the discontinuous and continuous phase transitions respectively for the order parameter components $\langle s \rangle$ and $\langle \sigma \rangle$ along the line H'H in Fig. 1.

Crucial for this paper is discovering that spins s and σ have non-zero value of the latent heat l_s at $-0.08 \geq K_4 \geq -0.02$ in Fig. 1 even though $l_s = 0$ value is within the error bars. E.g. for $K_4 = -0.06$ we have obtained $V_{s,\infty}^{min} = 0.66644(33)$, which gives $l_s = 0.006(7)$, for $K_4 = -0.04$ we have obtained $V_{s,\infty}^{min} = 0.66655(18)$, which gives $l_s = 0.004(5)$, and for $K_4 = -0.02$ we have obtained $V_{s,\infty}^{min} = 0.66660(15)$, which gives $l_s = 0.003(5)$. For clarity these data for latent heat are collected in Table 1. Usually, the gradual disappearance of the latent heat, i.e. the crossover, is limited to a narrow neighborhood of a tricritical point. The phase transitions along the line AH for degrees of freedom s and σ formally are classified as continuous, but we rather observe an extremely wide crossover than non-universal behavior previously indicated on the MC simulation basis [4–6]. It is worth noting that the results of this study have been verified using our cluster algorithm of the Wolff type which we constructed recently [28].

We plan to carry out a similar analysis for the 2D AT model, where the systematic deviation from the universal values of critical exponents for continuous phase transitions are described in the corresponding region of parameters (see e.g. [7–9] and the papers cited therein).

Acknowledgments

Numerical calculations were carried out on computing platforms of Poznań Supercomputing and Networking Center as well as of Faculty of Physics at Adam Mickiewicz University in Poznań. The authors wish to thank Professors H. T. Diep and J. Rogiers for valuable discussions.

References

- [1] Ü. Akinci, Physica A 469 (2017) 740.
- [2] J.P. Santos, D.S. Rosa, F.C. Sá Barreto, Phys. Lett. A 382 (2018) 272.
- [3] J.P. Santos, F.C. Sá Barreto, Braz. J. Phys. 46 (2016) 70.
- [4] R.V. Ditzian, J.R. Banavar, G.S. Grest, L.P. Kadanoff, Phys. Rev. B 22 (1980) 2542.
- [5] G. Musiał, Phys. Rev. B 69 (2004) 024407.
- [6] G. Musiał, J. Rogiers, Phys. Status Solidi b 243 (2006) 335.
- [7] R.J. Baxter, Exactly Solvable Models in Statistical Mechanics, Academic Press, London, 1982.
- [8] M.S. Grønleth, T.B. Nilssen, E.K. Dahl, E.B. Stiansen, C.M. Varma, A. Sudbo, Phys. Rev. B 79 (2009) 094506.
- [9] A. Giuliani, V. Mastropietro, Comm. Math. Phys. 256 (2005) 681;
V. Mastropietro, Non-Perturbative Renormalization, World Scientific, London, 2008.
- [10] S. Wiseman, E. Domany, Phys. Rev. E 51 (1995) 3074.
- [11] W. Janke, K. Nather, Phys. Rev. B 48 (1993) 15807.
- [12] P. Jakubczyk, A. Eberlein, Phys. Rev. E 93 (2016) 062145.
- [13] K. Binder, Rep. Progr. Phys. 60 (1997) 487.
- [14] K. Binder, D.P. Landau, Phys. Rev. B 30 (1984) 1477.
- [15] M.S.S. Challa, D.P. Landau, K. Binder, Phys. Rev. B 34 (1986) 1841.
- [16] J. Lee, J.M. Kosterlitz, Phys. Rev. B 43 (1991) 3265.
- [17] J. Ashkin, E. Teller, Phys. Rev. 64 (1943) 178.
- [18] C. Fan, Phys. Lett. A 39 (1972) 136.
- [19] D. Jeziorek-Knioła, G. Musiał, Z. Wojtkowiak, Acta Phys. Polon. A 127 (2015) 327.
- [20] D. Jeziorek-Knioła, G. Musiał, L. Dębski, J. Rogiers, S. Dylak, Acta Phys. Polon. A 121 (2012) 1105.
- [21] G. Szukowski, G. Kamieniarz, G. Musiał, Phys. Rev. E 77 (2008) 031124.
- [22] G. Musiał, L. Dębski, G. Kamieniarz, Phys. Rev. B 66 (2002) 012407.

- [23] W. Janke, *Lecture Notes in Phys.* 739 (2008) 79.
- [24] D. Jeziorek-Kniola, Z. Wojtkowiak, G. Musiał, *Acta Phys. Polon. A* 133 (2018) 435.
- [25] W. Janke, in: B. Dünweg, D.P. Landau, A.I. Milchev (Eds.), *Computer Simulations of Surfaces and Interfaces*, in: NATO Science Series, II Math. Phys. Chem., vol. 114, 2003, pp. 111–136.
- [26] K. Binder, *Rep. Progr. Phys.* 60 (1997) 487.
- [27] M. Mueller, W. Janke, D.A. Johnston, *Phys. Rev. Lett.* 112 (2014) 200601.
- [28] Z. Wojtkowiak, G. Musiał, publication in preparation.

The Monte Carlo Computer Experiment to Study the Order and Phase Transitions in the Mixed Phase Region Based on the Example of the 3D Ashkin-Teller Model

Z. Wojtkowiak, G. Musiał*

*Adam Mickiewicz University
Faculty of Physics
ul. Uniwersytetu Poznańskiego 2
61-614 Poznań, Poland
E-mail: gmusial@amu.edu.pl

Received: 21 June 2021; accepted: 19 September 2021; published online: 28 September 2021

Abstract: In this paper, we demonstrate a new way of performing Monte Carlo (MC) simulations in a mixed phase region that is difficult to study, where with certain probabilities there are different ordering ways. That results in a large oscillation of the values of the computed thermodynamic quantities, which makes their interpretation very problematic. Our results are presented on the example of the 3D Ashkin-Teller (AT) model, where within a certain range of parameters with equal probabilities there are two different, but equivalent, ways of ordering two of the three order parameters showing independent behavior. The use of our new approach in an MC computer experiment allowed us to use Binder cumulant as well as Challa- and the Lee-Kosterlitz-like cumulants. This made it possible to locate phase transitions precisely enough to be able to use the energy distribution histogram method. According to the most effective strategy in the critical region we use our recently proposed cluster MC algorithm and the Metropolis algorithm beyond it, which are suitable for both the first-order and the continuous phase transitions in the 3D AT model. The new approach was demonstrated by determining smooth curves of magnetization and internal energy, and as a consequence by determining the location and character of the phase transition on the line between the mixed phase region and the paramagnetic phase.

Key words: mixed phase region, Monte Carlo computer experiment, phase transitions, lattice spin systems, 3D Ashkin-Teller model

I. INTRODUCTION

For several decades, the Ashkin-Teller (AT) model [1] has been one of the important points of reference in statistical physics, as it is a non-trivial generalization of the intensively used Ising model. After Fan [2] we express the AT model in terms of two standard Ising models put on the same lattice with spins s_i and σ_i at each lattice site i . Thus, we take into account only two spin interactions of a constant magnitude J_2 between the nearest neighbors. These two independent Ising models are coupled here by the four-spin interaction of a constant magnitude J_4 , also only between couples of nearest neighboring spins. This leads to the effective Hamiltonian H

$$-\frac{H}{k_B T} = \sum_{[i,j]} \{K_2(s_i s_j + \sigma_i \sigma_j) + K_4 s_i \sigma_i s_j \sigma_j\}. \quad (1)$$

where $K_n = -J_n/k_B T$, with $n = 2$ or 4 , $[i, j]$ denotes the summation over the nearest neighboring lattice sites. Moreover, k_B is the Boltzmann constant, and T is the temperature of the system. We consider here the symmetric 3D AT model, i.e., the one with the same interactions between s and σ spins, distributed in the cubic lattice.

Every year a dozen of works are devoted to it (see, e.g., the recent papers [3–7] and the ones cited therein), and it still finds new interesting applications, like recently for the modeling of the crystalline order in VO₂ [8], machine learning [9], the gapless Coulomb state [10], nanodomain patterns

in ultratetragonal PbTiO_3 [11], magnetic properties of nanotubes [12], and the elastic response of the DNA molecule to external force and torque [13]. This model is also very important from a theoretical point of view as there are some mappings between the AT model and other physical models [14].

The AT model is so attractive in terms of cognition and application as it is characterized by the $K_2(K_4)$ rich and complex phase diagram because not only two order parameters $\langle s \rangle$ and $\langle \sigma \rangle$ induce ordering, but also the product $\langle s\sigma \rangle$ exhibits independent ordering, where the symbol $\langle \dots \rangle$ denotes the thermal average. The research done for this model and its applications can be found in many papers, e.g., [15–23].

A fragment of the phase diagram to which the results of our work relate is shown in Fig. 1. The first systematic study of the phase diagram of the 3D AT model on a cubic lattice was done by Ditzian et al. [24]. They exploited short series expansion and Monte Carlo (MC) simulations with very small samples, but they sketched the approximate phase diagram which is an important point of reference. For this reason, their results are ambiguous, mainly in the mixed phase region marked as “ $\langle \sigma \rangle$ ” in Fig. 1. In the “ $\langle \sigma \rangle$ ” region, either $\langle s \rangle$ or $\langle \sigma \rangle$ is ferromagnetically ordered but the other is not while $\langle s\sigma \rangle = 0$. Although few papers that relate to the “ $\langle \sigma \rangle$ ” region have been published [20, 25, 26], their results are preliminary and this region still constitutes a real challenge.

In the phase diagram in Fig. 1 there are also the Baxter and paramagnetic (marked as “para”) phases for which all order parameters, $\langle s \rangle$, $\langle \sigma \rangle$, and $\langle s\sigma \rangle$, are ferromagnetically ordered and are zero, respectively. For the phase marked as “ $\langle s\sigma \rangle_{AF}$ ” $\langle s \rangle = \langle \sigma \rangle = 0$ and only the parameter $\langle s\sigma \rangle$ is antiferromagnetically ordered. The first-order phase transitions are denoted by the dotted curves, whereas the continuous ones are denoted by the solid curves. The labeled point positions are marked by + and A, H, H', K, K' are the tricritical points. Arnold and Zhang [23] using MC simulations obtained the first more precise results along the line AP. Ising phase transitions occur along the continuous curve ending at the tricritical point K [21, 22, 27].

The 2D AT model shows the interesting line of continuously varying phase transitions at $K_4 \leq K_2$ first shown in the paper [28] and MC simulation results suggest the possibility of occurrence of nonuniversal behavior also in the 3D AT model [18, 20, 22, 24–26] but our recent results indicate only a wide crossover along the AH line and the rare coexistence of continuous and first-order phase transitions along the HH' line [18] shown in Fig. 1. It is noteworthy that the character of continuous phase transitions along the HK' line is still an open question.

The aim of our paper is to present a new method of performing an MC computer experiment to study the order and phase transitions between the mixed phase region “ $\langle \sigma \rangle$ ” and the “para” phase on the example of the standard 3D AT model shown in Fig. 1. The “ $\langle \sigma \rangle$ ” phase occurs only in the

symmetric AT model in 3D. Due to the difficulty of obtaining unambiguous results and their interpretation, the “ $\langle \sigma \rangle$ ” region is often omitted, as it is the most complex and the least recognized region of the 3D AT model phase diagram. To solve this problem, we have developed an appropriate strategy, precise tools such as three types of cumulants, and the energy distribution histogram, which enable a detailed analysis of this region. We have recently used these tools with success to analyze the first-order of phase transitions to the right of point A shown in Fig. 1 [15]. Due to the recently announced presence of metastable and unstable states [4], we use our cluster algorithm of the Wolff type [29] in the critical region and the Metropolis one beyond.

To illustrate the use of our method, we precisely determined the location of the phase transition and we determined its character for the point on the HK' line between the mixed phase region “ $\langle \sigma \rangle$ ” and the paramagnetic phase shown in Fig. 1. These problems are important, topical and have not yet been solved in the bibliography of the subject.

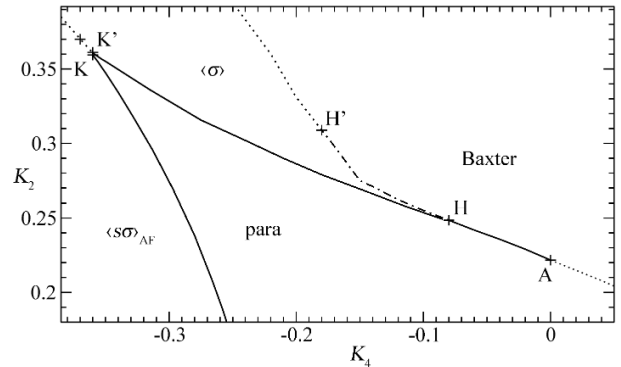


Fig. 1. A fragment of the phase diagram of the 3D AT model on a cubic lattice to which the results of our paper relate. The dotted curves denote the first order phase transitions, the solid ones stand for continuous transitions and the dotted-broken one indicates transitions of both types for different order parameters. In the phase labeled “Baxter” the system is ferromagnetically ordered with all order parameters $\langle s \rangle$, $\langle \sigma \rangle$ and $\langle s\sigma \rangle$ nonzero, whereas in the phase labeled “para” they all are zero. In the phase “ $\langle s\sigma \rangle_{AF}$ ” there is $\langle s \rangle = \langle \sigma \rangle = 0$ and only the $\langle s\sigma \rangle$ is antiferromagnetically ordered. For the phase “ $\langle \sigma \rangle$ ” called the mixed phase region $\langle s\sigma \rangle = 0$ and either $\langle s \rangle$ or $\langle \sigma \rangle$ is ferromagnetically ordered but the other is not. The positions of labeled points inside the phase diagram are marked by + and A, H, H', K, K' are the tricritical points

II. THE APPLIED METHOD

To study the subject mixed phase region, we exploit the MC computer experiment with importance sampling of states and we consider the finite-size cubic samples of the lattice symmetric AT model, the behavior of which is fully determined by the Hamiltonian (1). These samples of size L^3 with periodic boundary conditions are sufficiently large to be able to compute the thermodynamic limit of our re-

sults. We perform our computer experiments to predict the equilibrium behavior of the 3D AT model according to the statistical mechanics methodology.

The detailed description of the MC computer experiment constructed by us for the 3D AT model based on the analysis of the dependencies of thermal averages of such thermodynamic variables as magnetization or internal energy, and three different cumulants on the coupling constant, and on the dependencies of the internal energy distribution histogram on energy can be found in our recent paper [15]. In this Section, apart from the computational aspects, we present only its key elements and we will focus primarily on explaining how to conduct it in the mixed phase region “ $\langle\sigma\rangle$ ”.

The specificity of such computer experiments of phase transitions in spin lattice systems with Ising’s degrees of freedom is the necessity to execute hundreds, often even thousands of runs of programs, with the execution time ranging from several hours to many weeks for the systems with the largest size L^3 limited by the processing capabilities of the high-performance computers used [18, 22]. First, we bring our system to a state of thermodynamic equilibrium using the appropriate number of MC steps that we analyzed in our paper [29]. Moreover, in our MC computer experiments, in contrast to simple MC simulations, we not only compute thermodynamic quantities, but also carefully determine their error bars. For this purpose, one program run consists of the computation of 6 to 24 partial averages, each independently calculated from approximately 10^7 MC steps, but only every k th step contributes to the thermodynamic calculations ($6 < k < 10$), which is enough to avoid correlations between sampled configurations of our system using the Metropolis algorithm [29]. The problem of these correlations is radically smaller in the case of the cluster algorithm [30], which is also the case in our version of this algorithm [29].

Obviously, we get a true picture of the phase transition only in the thermodynamic limit. To obtain reliable extrapolations of our results to the thermodynamic limit, we perform computations in systems with the largest possible size L , which take many weeks at sequential processing. In order to get the results in a reasonable time using the MPI library, we have parallelized the processing in our computer experiments obtaining almost perfect speedup on symmetric multicomputers [31]. This is because communication between concurrently executing processes occurs only a few times: when broadcasting the original data by the master process, and when sending partial averages from slave processes to the master process. In the bibliography, there are other methods of parallelization of processing in cluster algorithms for models with degrees of freedom of the Ising type [32, 33], which rely on concurrent computations for newly added spins in a growing cluster performed on the GPU. As a result, the computing speed of the GPU for the 2D Ising model in the critical region is faster than the computing speed of the current processor core. However, conduct-

ing parallel calculations for newly added spins will not be optimal anymore [34], contrary to the parallelization of calculations of individual partial averages [31].

The presence of metastable and unstable states in the 3D AT model was recently signalized using the mean field method [4]. It is well known that the mean field theory is a solid tool, especially suitable for the first view of the problem, and it does not provide quantitative consistence with the precise results. Nevertheless, it gives a good qualitative insight into the problem [35]. So we generate equilibrium configurations of finite-size cubic spin samples for fixed values of our model parameters described above in the Hamiltonian (1) using our recently constructed cluster algorithm of the Wolff type [29] in the critical region and the Metropolis one beyond. This is the best strategy, also to optimize the time to obtain results with comparable uncertainties.

To prelocate a temperature-driven phase transition point, we fix a particular value of K_4 coupling and analyze Binder cumulant $Q_{\alpha,L}(K_2) = \langle M_\alpha^2 \rangle_L^2 / \langle M_\alpha^4 \rangle_L$ dependences (see, e.g., [18, 21, 27, 36]), where $\langle M_\alpha^n \rangle_L$ denotes the n^{th} power of the order parameter α component, with $\alpha = s, \sigma$ or their product $s\sigma$, which are averaged over an ensemble of independent samples of the size L^3 . The lack of characteristic minima in the course of the $Q_{\alpha,L}(K_2)$ dependences indicates that the phase transition can be continuous [20, 36].

To check if there occurs the latent heat during a phase transition, i.e., to unambiguously determine the character of a phase transition and to more accurately determine the location of this transition point, we compute also the Challa [37]

$$V_{\alpha,L} = 1 - \frac{\langle E_\alpha^4 \rangle_L}{3\langle E_\alpha^2 \rangle_L^2} \quad (2)$$

and the Lee-Kosterlitz [38]

$$U_{\alpha,L} = \frac{\langle E_\alpha^2 \rangle_L}{\langle E_\alpha \rangle_L^2} \quad (3)$$

like cumulants. Here $\langle E_\alpha^n \rangle_L$ is the n^{th} moment of the whole Hamiltonian ($\alpha = H$) or the interaction energy of α -degrees of freedom ($\alpha = s, \sigma$, or their product $s\sigma$) separately, which is averaged over an ensemble of independent samples of the size L^3 . Thus, we are able to compute the latent heat l_α coming from each order parameter $\langle\alpha\rangle$ with $\alpha = s, \sigma$, or $s\sigma$ separately [18, 19, 22].

We analyze the dependences $V_{\alpha,L}(K_2)$ which show characteristic local minima $V_{\alpha,L}^{\text{min}}$ [37] and $U_{\alpha,L}(K_2)$ characteristic local maxima $U_{\alpha,L}^{\text{max}}$ [38] at a fixed value of K_4 coupling in the close critical region. When the thermodynamic limit $V_{\alpha,L}^{\text{min}}$ value with its error bar remains different from 2/3 and the $U_{\alpha,L}^{\text{max}}$ value with its error bar remains different from 1, we conclude that a phase transition is qualified to be of the first-order, otherwise we assume that the phase transition is continuous [18, 22, 37, 38]. The latent heat l_α coming from the whole Hamiltonian ($\alpha = H$) or the interac-

tion energy E_α of α order parameter in the thermodynamic limit

$$l_\alpha = E_{\alpha,+} - E_{\alpha,-}, \quad (4)$$

where $E_{\alpha,\pm} = E_\alpha(K_2 \rightarrow K_{2,c}|\pm)$, are determined on the basis of the Lee-Kosterlitz formula [38, 39]

$$V_{\alpha,L}^{\min} = \frac{2}{3} - \frac{1}{12} \left(\frac{E_{\alpha,+}}{E_{\alpha,-}} - \frac{E_{\alpha,-}}{E_{\alpha,+}} \right)^2 + \frac{A_V}{L^3} \quad (5)$$

and using the method proposed in [22]. Eq. (5) was also obtained independently by Borgs, Kotecky, and Miracle-Sole [40] from a more rigorous point of view. $K_{2,c}$ in Eq. (5) is the critical value of K_2 coupling with the fixed value of K_4 and the quantity A_V stands for L independent expression of the complicated form [38]. Analogously, we can determine the latent heat l_α on the basis of the $U_{\alpha,L}$ cumulant maxima values scaled to the thermodynamic limit for each of the three α order parameters with $\alpha = s, \sigma$, or $s\sigma$ independently, as well as for the whole system ($\alpha = H$), using the Lee-Kosterlitz formula [38]

$$U_{\alpha,L}^{\max} = \frac{(E_{\alpha,+} + E_{\alpha,-})^2}{4E_{\alpha,+}E_{\alpha,-}} + \frac{A_U}{L^3}, \quad (6)$$

where A_U stands for L independent complicated expression.

We conclude from Eqs. (5) and (6) that values and locations of cumulant $V_{\alpha,L}$ minima and of cumulant $U_{\alpha,L}$ maxima scale linearly versus L^{-3} . Using Eqs. (5) and (6) and the method proposed in [22] we can calculate the values of $E_{\alpha,+}$ and $E_{\alpha,-}$ and estimate the latent heat from Eq. (4). Moreover, the thermodynamic limit $K_{2,\alpha}^{\min}$ values of minima and $K_{2,\alpha}^{\max}$ values of maxima are far better estimations of the critical K_2 values than the preliminary ones obtained on the basis of the Binder cumulant $Q_{\alpha,L}(K_2)$ dependences.

Our method presented above [15] gives good results when the system has unambiguously determined equilibrium configurations of finite-size cubic spin samples for fixed values of our model parameters described above in the Hamiltonian (1).

However, in the mixed phase region, marked as “ $\langle\sigma\rangle$ ” in Fig. 1, the situation is different: $\langle s\sigma \rangle = 0$ and there are two equally probable phases in which either $\langle s \rangle$ or $\langle \sigma \rangle$ is ferromagnetically ordered but the other is not in the thermodynamic limit. This causes the values of the computed thermodynamic quantities to oscillate as during sufficiently long simulations both phases will appear with approximately equal probability. Therefore, to obtain clear results we have worked out a new solution. We propose a conventional division of our system into two sublattices: the ordered one which will be marked with a capital letter Σ and the unordered one marked with a capital letter S . It is important that the decision to allocate the real spins σ and s to these conventional sublattices is decided only after each MCS is

performed and the results from the spins with greater magnetization are systematically added to the results of the conventional sublattice Σ while the results from the second spins are added to the results of conventional sublattice S . The number of MCS must be large enough to compensate the separation of our system into these two artificial sublattices Σ and S in the paramagnetic region. Computations for the product of spins $s\sigma$ do not need to be changed.

We bear in mind that in the mixed phase region “ $\langle\sigma\rangle$ ”, two phases are equally probable in which either $\langle s \rangle$ or $\langle \sigma \rangle$ is ferromagnetically ordered but the other is not. In this situation, we introduce the conventional division into two sublattices, the first one with greater magnetization of Σ spins, and the second one with smaller magnetization of S spins. Thanks to this division, we get smooth dependences of thermodynamic quantities and of cumulant values on the coupling K_2 with a fixed value of the coupling K_4 for the analysis.

We have located phase transition point precisely enough to be able to use another independent method of checking for the presence of the latent heat during a phase transition with greater accuracy. We compute the probability $P_{\alpha,L}$ of the internal energy $E_{\alpha,L}$ appearance in the samples of finite size L^3 . As in the case of cumulants, the $P_{\alpha,L}(E_{\alpha,L})$ values are computed independently for each degree of freedom $\alpha = s, \sigma$, or their product $s\sigma$, and also for the whole Hamiltonian (1) denoted by $\alpha = H$, at a critical value $K_{2,c}$. A characteristic histogram of the this energy E_α distribution with two peaks in the close critical region for first-order phase transitions can be observed [38, 41, 42]. The maxima of these peaks appear at the energy value $E_{\alpha,-,L}$ for the ordered state and at $E_{\alpha,+,L}$ for the unordered one for the samples of finite-size L . It is important that for continuous phase transitions only a single peak of the probability $P_{\alpha,L}(E_{\alpha,L})$ dependence appears in the thermodynamic limit. This is an additional clue for determining the character of a phase transition.

III. RESULTS AND CONCLUSIONS

We demonstrate our new way of performing MC computer experiments in the mixed phase region “ $\langle\sigma\rangle$ ” shown in Fig. 1, where with equal probabilities there appear two different, but equivalent, ways of ordering two of the three order parameters: $\langle s\sigma \rangle = 0$ and either $\langle s \rangle$ or $\langle \sigma \rangle$ is ferromagnetically ordered but the other is not. To illustrate our method, we examine the phase transition for the point with $K_4 = -0.3$ lying on the HK’ line, which is the boundary of the “ $\langle\sigma\rangle$ ” region and the paramagnetic phase “para” shown in Fig. 2.

As we show below, we observe here that the values of characteristic local minima of the dependences $V_{\alpha,L}(K_2)$ and the values of characteristic local maxima of the dependences $U_{\alpha,L}(K_2)$ for $\alpha = \Sigma, S, s\sigma$, and H in the thermodynamic limit scale accordingly to the value $2/3$ for minima

and to 1 for maxima. This means that the transitions are continuous. Fig. 2 shows the dependence of the thermal average values of the square of magnetization $\langle M_\alpha^2 \rangle_L$ for cubic samples of the finite size L^3 for all three order parameters with $\alpha = \Sigma, S$, and $s\sigma$ indicated in the legend. The vertical dotted line indicates the position of the phase transition point $K_{2,c} = 32905(30)$ estimated below. This figure also explains the reason for the occurrence of the minima of the cumulant $V_{\alpha,L}(K_2)$ dependences and of the maxima of the cumulant $U_{\alpha,L}(K_2)$ dependences also for $\alpha = S$ and $s\sigma$ for which we have a paramagnetic phase on both sides of the HK' line. The cumulant extremes for $\alpha = S$ and $s\sigma$ appear because in the critical region we observe non-zero magnetization, which, however, disappears as the size L increases, also shown in the legend, which is in line with expectations.

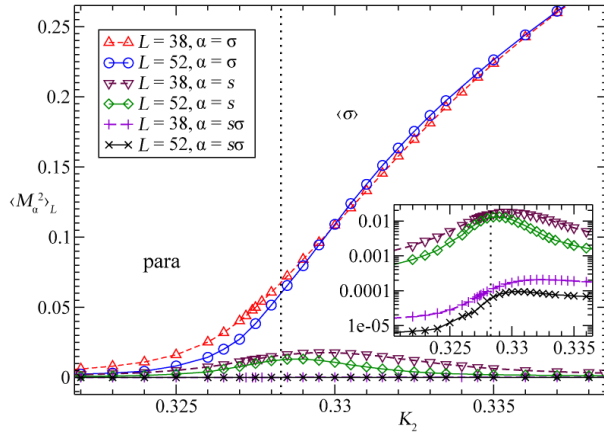


Fig. 2. The dependence of the thermal average values of the square of magnetization $\langle M_\alpha^2 \rangle_L$ on the coupling K_2 for the fixed value of the four-spin interaction $K_4 = -0.3$. The inset shows the $\langle M_\alpha^2 \rangle_L$ results for the order parameters $\langle \alpha \rangle$ with $\alpha = S$ and $s\sigma$, where the scale of the magnetization values is logarithmic. The values of the size L and items for α are explained in the legend. The vertical dotted line indicates the position of the phase transition point $K_{2,c} = 32905(30)$. The error bars are of the order of magnitude of symbols. Lines connecting the points have been drawn to guide the eye

From this introduction we can also see that at the beginning of the research it is necessary to determine the place of the phase transition marked with the vertical dotted line in Fig. 2. We obtain a preliminary estimation of the phase transition point from the intersections of the Binder cumulant [18, 21, 27, 36] curves $Q_{\alpha,L}(K_2)$ at the fixed value of the coupling $K_4 = -0.3$ presented in Fig. 3. This analysis has been performed for $\langle \Sigma \rangle$ order parameter, allowing us to estimate three to four decimal digits of the K_2 coupling critical value $K_{2,c} = 0.3274(18)$. Here $Q_{\Sigma,L}(K_2)$ curves intersect in such a way that for $L_1 < L_2$ at $K_2 < K_{2,c}$ one has $Q_{\Sigma,L_1} > Q_{\Sigma,L_2}$, while at $K_2 > K_{2,c}$ there appears $Q_{\Sigma,L_1} < Q_{\Sigma,L_2}$. The error bar should be estimated carefully here, as it is only an approximate indication of the critical region.

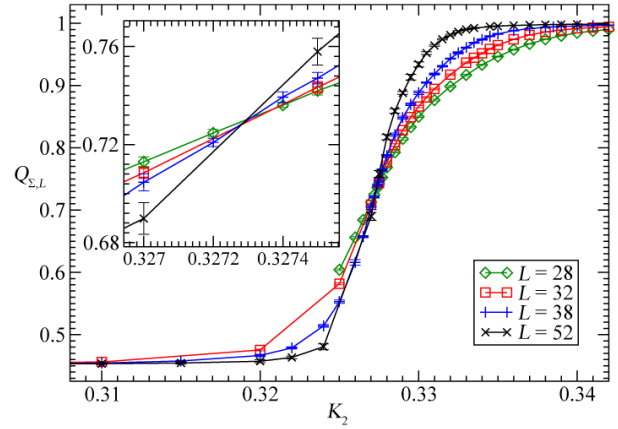


Fig. 3. The Binder cumulant $Q_{\Sigma,L}(K_2)$ dependences for the system size L values specified in the legend at the fixed value $K_4 = -0.3$. The inset shows the region in which these curves intersect. For clarity, the results for selected L values are presented. Lines connecting the points have been drawn to guide the eye

To check if there appears the latent heat during the phase transition and to improve the location of this transition point, we estimate the values and positions of cumulants $V_{\alpha,L}$ minima shown in Fig. 4 and of cumulants $U_{\alpha,L}$ maxima illustrated in Fig. 5 for degrees of freedom Σ ($\alpha = \Sigma$) or for the whole system ($\alpha = H$). To average the scatter of the results and to determine more precisely the ordinates of extrema $V_{\alpha,L}^{\min}$ and $U_{\alpha,L}^{\max}$ as well as their abscissas $K_{2,\alpha,L}^{\min}$ and $K_{2,\alpha,L}^{\max}$, our MC data were approximated by a polynomial of the third degree and marked by solid lines in Figs 4 and 5.

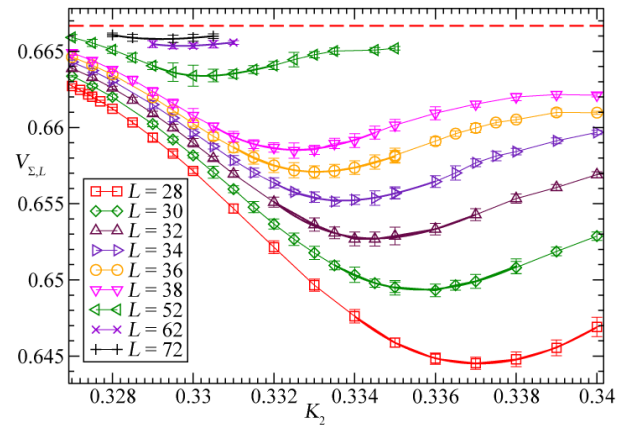


Fig. 4. The dependences $V_{\Sigma,L}(K_2)$ with characteristic local minima for system sizes L listed in the legend at the fixed value $K_4 = -0.3$. For clarity, the results for selected L values are presented. The horizontal dashed line indicates the limit $2/3$ value. Lines connecting the points have been drawn to guide the eye

To estimate the value of the latent heat, we have exploited the Challa-like $V_{\alpha,L}$ and the Lee-Kosterlitz-like $U_{\alpha,L}$ cumulant properties explained in the previous section.

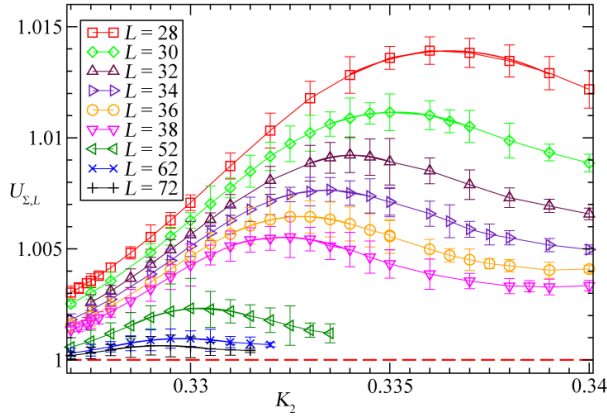


Fig. 5. The dependences $U_{\Sigma,L}(K_2)$ with characteristic local maxima for system sizes L listed in the legend at the fixed value $K_4 = -0.3$. For clarity, the results for selected L values are presented. The horizontal dashed line indicates the limit 1 value. Lines connecting the points have been drawn to guide the eye

We have first calculated the values of the cumulant $V_{\alpha,L}$ minima and of the cumulant $U_{\alpha,L}$ maxima in the thermodynamic limit using linear regression for $V_{\alpha,L}^{\min}(L^{-3})$ and for $U_{\alpha,L}^{\max}(L^{-3})$ dependences with $\alpha = \Sigma$ and H , which follow from Eqs. (5) and (6), respectively. The analysis is illustrated in Fig. 6 for the Challa-like $V_{\alpha,L}$ cumulant and in Fig. 7 for the Lee-Kosterlitz-like $U_{\alpha,L}$ cumulant at the fixed value of the coupling $K_4 = -0.3$ for $\alpha = \Sigma$ and H indicated in the legend. The results of this extrapolation are $V_{\Sigma,\infty}^{\min} = 0.6673(8)$ and $V_{H,\infty}^{\min} = 0.663(5)$ as well as $U_{\Sigma,\infty}^{\max} = 0.9999(4)$ and $U_{H,\infty}^{\max} = 1.0017(24)$. One can see the clear linear character of our MC computer experiment data. There is the limit value $2/3$ within the cumulant $V_{\alpha,\infty}^{\min}$ values with their error bars and the limit value 1 within the cumulant $U_{\alpha,\infty}^{\max}$ values with their error bars in the thermodynamic limit for $\alpha = \Sigma$ and H . This means that the value of the latent heat here is zero.

Since for the conventional degrees of freedom Σ and S we have gathered contributions from both equally probable phases: this with $\langle\sigma\rangle$ nonzero and $\langle s\rangle = 0$ as well as with $\langle\sigma\rangle = 0$ and $\langle s\rangle$ nonzero, thus we have shown that the phase transition at the point with $K_4 = -0.3$ and $K_2 = 0.32905(30)$ is continuous.

Fig. 8 shows that the abscissas of the cumulant $V_{\Sigma,L}(K_2)$ dependences minima and the abscissas of the cumulant $U_{\Sigma,L}(K_2)$ dependences maxima within the limits of error bars in the thermodynamic limit scale to the same critical value $K_{2,c} = 0.32905(30)$. As the value of $K_{2,c}$, we have assumed the mean value of the Challa-like cumulant $K_{2,\Sigma,\infty,V} = 0.3290(3)$, and of the Lee-Kosterlitz-like cumulant $K_{2,\Sigma,\infty,U} = 0.3291(3)$. As shown in Fig. 8, these results are consistent with the preliminary estimation of $K_{2,\Sigma,\infty,Q} = 0.3274(18)$ obtained above using the Binder cumulant. Since we have obtained this $K_{2,c}$ value for the conventional degrees of freedom Σ and S , we conclude that

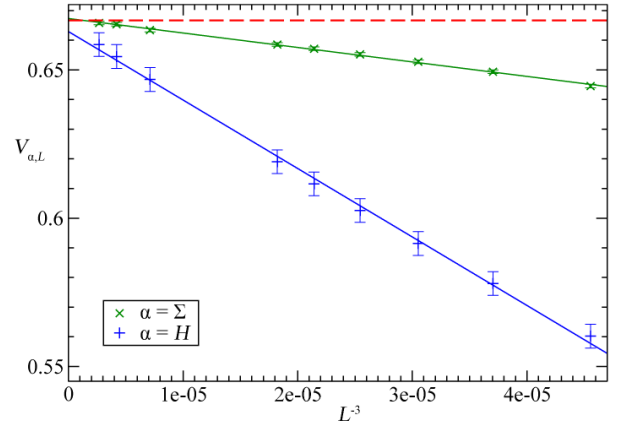


Fig. 6. The values of Challa-like cumulants minima $V_{\alpha,L}^{\min}$ for $\alpha = \Sigma$ and H extrapolated to the thermodynamic limit at the fixed value of the coupling $K_4 = -0.3$. The items α and symbols are explained in the legend. The dependences are fitted by straight solid lines using linear regression. The horizontal dashed line indicates the limit $2/3$ value

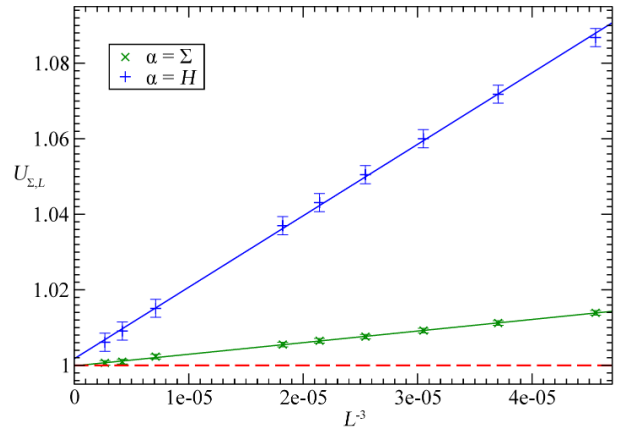


Fig. 7. The values of Lee-Kosterlitz-like cumulants maxima $U_{\alpha,L}^{\max}$ for $\alpha = \Sigma$ and H extrapolated to the thermodynamic limit at the fixed value of the coupling $K_4 = -0.3$. The items α and symbols are explained in the legend. The dependences are fitted by straight solid lines using linear regression. The horizontal dashed line indicates the limit 1 value

this is the phase transition point for both equally probable phases: the one with $\langle\sigma\rangle$ nonzero and $\langle s\rangle = 0$ as well as the second with $\langle\sigma\rangle = 0$ and $\langle s\rangle$ nonzero. We observe similar behavior along the entire HK'.

We have also computed the probability $P_{\alpha,L}$ of the internal energy $E_{\alpha,L}$ appearance in the samples of finite size L^3 . As for cumulants, the $P_{\alpha,L}(E_{\alpha,L})$ values are computed independently for degrees of freedom $\alpha = \Sigma$, and also for the whole Hamiltonian (1) denoted by $\alpha = H$, at the calculated precisely enough critical value $K_{2,c} = 0.32905(30)$. The histogram of the this energy E_{α} distribution contains only one peak in the close critical region for $\alpha = \Sigma$ and H .

This is the independent confirmation that the phase transition is continuous.

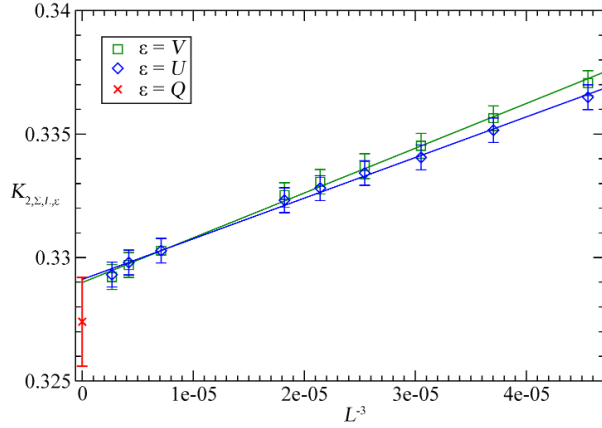


Fig. 8. Abscissas $K_{2,\Sigma,L,V}^{\min}$ of cumulants $V_{\Sigma,L}$ minima and $K_{2,\Sigma,L,U}^{\max}$ of cumulants $U_{\Sigma,L}$ maxima extrapolated to the thermodynamic limit at the fixed value of the coupling $K_4 = -0.3$. The symbols are explained in the legend. The dependences are fitted by straight solid lines using linear regression

In summary, we have demonstrated the way of performing our recently published MC experiments [15] in a mixed phase region that is difficult to study, as with certain probabilities there appear different ordering ways, which results in a large oscillation of the values of the computed thermodynamic quantities, which makes their interpretation very difficult. We have presented our method on the example of the point with $K_4 = -0.3$ on the boundary between the mixed phase region “ $\langle\sigma\rangle$ ” and the paramagnetic one in the phase diagram of 3D AT model shown in Fig. 1. However, this method can be successfully applied to other spin lattice models whose phase diagram contains a mixed phase region. In the “ $\langle\sigma\rangle$ ” region with equal probabilities there appear two different equivalent ways of ordering two of the three order parameters: $\langle s\sigma\rangle = 0$ and either $\langle s\rangle$ or $\langle\sigma\rangle$ is ferromagnetically ordered but the other is not.

Our concept to obtain clear results is based on that, there is a conventional division of our system into two sublattices. The ordered one which is marked with a capital Σ and the unordered one marked with a capital S . The decision to allocate the real spins σ and s to these conventional sublattices is decided only after each MCS is performed and the results from the spins with greater magnetization are systematically added to the results of conventional sublattice Σ while the results from the second kind of spins are added to the results of conventional sublattice S . We have controlled that the number of MCS is large enough to compensate the separation of our system into these two artificial sublattices Σ and S in the paramagnetic region.

Since for the conventional degrees of freedom Σ and S we have gathered contributions from both equally probable phases: this with $\langle\sigma\rangle$ nonzero and $\langle s\rangle = 0$ as well

as with $\langle\sigma\rangle = 0$ and $\langle s\rangle$ nonzero, thus we have shown that the phase transition at the point with $K_4 = -0.3$ and $K_2 = 0.32905(30)$ is continuous.

In contrast to the results published so far in the bibliography, the implementation of our new approach in our MC experiment allowed us to use Binder cumulant, the Challa-like and the Lee-Kosterlitz-like cumulants, as well as the internal energy distribution histogram to obtain clear results a mixed phase region. According to the most effective strategy, in the critical region we have used our recently proposed cluster MC algorithm [29] and the Metropolis algorithm beyond the critical region, which are suitable for both, the first-order and continuous phase transitions in the 3D AT model.

Acknowledgment

Numerical calculations were carried out on the computing platforms of Poznań Supercomputing and Networking Center as well as the Faculty of Physics at Adam Mickiewicz University in Poznań.

References

- [1] J. Ashkin, E. Teller, *Statistics of Two-Dimensional Lattices with Four Components*, Phys. Rev. **64**, 178 (1943).
- [2] C. Fan, *On critical properties of the Ashkin-Teller model*, Phys. Lett. **39A**, 136 (1972).
- [3] S.-P. Li, Z.-H. Sun, *Local and intrinsic quantum coherence in critical systems*, Phys. Rev. A **98**, 022317 (2018).
- [4] J.P. Santos, J.A.J. Avila, D.S. Rosa, R.M. Francisco, *Multicritical phase diagram of the three-dimensional Ashkin-Teller model including metastable and unstable phases*, J. Magn. Magn. Mater. **469**, 35–39 (2019).
- [5] G. Delfino, N. Lamsen, *Critical points of coupled vector-Ising systems. Exact results*, J. Phys. A: Math. Theor. **52**, 35LT02 (2019).
- [6] P. Patil, A.W. Sandvik, *Hilbert space fragmentation and Ashkin-Teller criticality in fluctuation coupled Ising models*, Phys. Rev. B **101**, 014453 (2020).
- [7] A. Benmansour, S. Bekhechi, B.N. Brahmī, N. Moussa, H. Ez-Zahraouy, *Monte Carlo study of thin magnetic Ashkin Teller films at the special point*, J. Magn. Magn. Mater. **511**, 166944 (2020).
- [8] T. Lovorn, S.K. Sarker, *Complex Quasi-Two-Dimensional Crystalline Order Embedded in VO₂ and Other Crystals*, Phys. Rev. Lett. **119**, 045501 (2017).
- [9] S.S. Lee, B.J. Kim, *Confusion scheme in machine learning detects double phase transitions and quasi-long-range order*, Phys. Rev. E **99**, 043308 (2019).
- [10] G.-Y. Zhu, G.-M. Zhang, *Gapless Coulomb State Emerging from a Self-Dual Topological Tensor-Network State*, Phys. Rev. Lett. **122**, 176401 (2019).
- [11] A. Kumar, J.G.M. Guy, L. Zhang, J. Chen, J.M. Gregg, J.F. Scott, *Nanodomain patterns in ultra-tetragonal lead titanate (PbTiO₃)*, Appl. Phys. Lett. **116**, 182903 (2020).
- [12] R.M. Francisco, J.P. Santos, *Magnetic properties of the Ashkin-Teller model on a hexagonal nanotube*, Phys. Lett. A **383**, 1092–1098 (2019).
- [13] C. Zhe, W. Ping, Z. Ying-Hong, *Ashkin-Teller Formalism for Elastic Response of DNA Molecule to External Force and Torque*, Commun. Theor. Phys. **49**, 525 (2008).
- [14] M.E.J. Newman, G.T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Oxford University Press, Oxford (1999).

- [15] G. Musiał, D. Jeziorek-Knioła, Z. Wojtkowiak, *Monte Carlo examination of first-order phase transitions in a system with many independent order parameters: Three-dimensional Ashkin-Teller model*, Phys. Rev. E **103**, 062124 (2021).
- [16] J.P. Santos, F.C. Sá Barreto, *Upper Bounds on the Critical Temperature of the Ashkin-Teller Model*, Braz. J. Phys. **46**, 70–77 (2016).
- [17] Ü. Akıncı, *Nonequilibrium phase transitions in isotropic Ashkin-Teller model*, Physica A **469**, 740–749 (2017).
- [18] Z. Wojtkowiak, G. Musiał, *Wide crossover in the 3D Ashkin-Teller model*, Physica A **513**, 104–111 (2019).
- [19] D. Jeziorek-Knioła, G. Musiał, Z. Wojtkowiak, *Arbitrarily Weak First Order Phase Transitions in the 3D Standard Ashkin-Teller Model by MC Computer Experiments*, Acta Phys. Polon. A **127**, 327 (2015).
- [20] D. Jeziorek-Knioła, G. Musiał, L. Dębski, J. Rogiers, S. Dylak, *On Non-Ising Phase Transitions in the 3D Standard Ashkin-Teller Model*, Acta Phys. Polon. A **121**, 1105 (2012).
- [21] G. Szukowski, G. Kamieniarz, G. Musiał, *Verification of Ising phase transitions in the three-dimensional Ashkin-Teller model using Monte Carlo simulations*, Phys. Rev. E **77**, 031124 (2008).
- [22] G. Musiał, *Monte Carlo analysis of the tricritical behavior in a three-dimensional system with a multicomponent order parameter: The Ashkin-Teller model*, Phys. Rev. B **69**, 024407 (2004).
- [23] P. Arnold, Y. Zhang, *Monte Carlo study of very weakly first-order transitions in the three-dimensional Ashkin-Teller model*, Nuclear Phys. B **501**, 803–837 (1997).
- [24] R.V. Ditzian, J.R. Banavar, G.S. Grest, L.P. Kadanoff, *Phase diagram for the Ashkin-Teller model in three dimensions*, Phys. Rev. B **22**, 2542 (1980).
- [25] G. Musiał, *A Monte Carlo study of the mixed phase region in the 3D Ashkin-Teller model*, Phys. Status Solidi B **236**, 486–489 (2003).
- [26] G. Musiał, J. Rogiers, *On the possibility of nonuniversal behavior in the 3D Ashkin-Teller model*, Phys. Status Solidi B **243**, 335–338 (2006).
- [27] G. Musiał, L. Dębski, G. Kamieniarz, *Monte Carlo simulations of Ising-like phase transitions in the three-dimensional Ashkin-Teller model*, Phys. Rev. B **66**, 012407 (2002).
- [28] C. Fan, F.Y. Wu, *General Lattice Model of Phase Transitions*, Phys. Rev. B **2**, 723 (1970).
- [29] Z. Wojtkowiak, G. Musiał, *Cluster Monte Carlo method for the 3D Ashkin-Teller model*, J. Magn. Magn. Mater. **500**, 166365 (2020).
- [30] U. Wolff, *Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems*, Phys. Rev. Lett. **62**, 361 (1989).
- [31] G. Musiał, L. Dębski, *Monte Carlo Method with Parallel Computation of Phase Transitions in the Three-Dimensional Ashkin-Teller Model*, Lect. Notes in Comp. Sci. **2328**, 535–543 (2002).
- [32] T. Preis, P. Virnau, W. Paul, J.J. Schneider, *GPU accelerated Monte Carlo simulation of the 2D and 3D Ising model*, J. Comput. Phys. **228**, 4468–4477 (2009).
- [33] Y. Komura, Y. Okabe, *GPU-based single-cluster algorithm for the simulation of the Ising model*, J. Comput. Phys. **231**, 1209–1215 (2012).
- [34] T.A. Kampmann, H.-H. Boltz, J. Kierfeld, *Parallelized event chain algorithm for dense hard sphere and polymer systems*, J. Comput. Phys. **281**, 864–875 (2015).
- [35] G. Kamieniarz, R. Dekeyser, G. Musiał, L. Dębski, M. Bieliński, *Modified effective-field approach to low-dimensional spin-1/2 systems*, Phys. Rev. E **56**, 144 (1997).
- [36] K. Binder, D.P. Landau, *Finite-size scaling at first-order phase transitions*, Phys. Rev. B **30**, 1477 (1984).
- [37] M.S.S. Challa, D.P. Landau, K. Binder, *Finite-size effects at temperature-driven first-order transitions*, Phys. Rev. B **34**, 1841 (1986).
- [38] J. Lee, J.M. Kosterlitz, *Finite-size scaling and Monte Carlo simulations of first-order phase transitions*, Phys. Rev. B **43**, 3265 (1991).
- [39] K. Binder, *Applications of Monte Carlo methods to statistical physics*, Rep. Prog. Phys. **60**, 487 (1997).
- [40] C. Borgs, R. Kotecky, S. Miracle-Sole, *Finite-size scaling for Potts models*, J. Stat. Phys. **62**, 529–551 (1991).
- [41] D. Jeziorek-Knioła, Z. Wojtkowiak, G. Musiał, *Computation of Latent Heat based on the Energy Distribution Histogram in the 3D Ashkin-Teller Model*, Acta Phys. Polon. A **133**, 435–437 (2018).
- [42] A. Billoire, T. Neuhaus, B.A. Berg, *A determination of interface free energies*, Nuclear Phys. B **413**, 795–812 (1994).



Zbigniew Wojtkowiak was born in 1989 in Śrem, Poland. He received his Master of Science degree in Biophysics in 2013 at the Adam Mickiewicz University in Poznań. From then on a PhD student at the same university in the Computational Physics Division. In his research he concentrates on numerical simulations and parallel Monte Carlo algorithms for classical spin systems. Together with Grzegorz Musiał, he applied the Wolff type cluster algorithm to the 3D Ashkin-Teller model for the first time. Moreover, he actively participates in the popularization of science during festivals and by conducting lessons in academic classes. He is author of 6 published scientific papers. Outside of science, he uses his analytical skills in various branches of business and industry.



Grzegorz Musiał was born in 1955 in Białozewin, Poland. He has got the Professor position at the Faculty of Physics, Adam Mickiewicz University in Poznań, Poland. In his research he joins physics and computing. Recently, his research work in physics has been concentrated mainly on many aspects of statistical physics in classical and quantum spin-lattice systems using numerical simulations. The computing research mainly concerns operating systems of the UNIX type and parallel computing in distributed environment, also with high heterogeneity. He is author of 70 published scientific papers and 5 books.



The Behavior of the Three-Dimensional Askin–Teller Model at the Mixed Phase Region by a New Monte Carlo Approach

Zbigniew Wojtkowiak¹ · Grzegorz Musiał¹

Received: 9 March 2022 / Accepted: 3 July 2022 / Published online: 28 July 2022
© The Author(s) 2022

Abstract

The new approach of performing Monte Carlo (MC) simulations, which eliminates large oscillations of the values of the thermodynamic quantities computed for a mixed phase region, is demonstrated. The results are presented on the example of the mixed phase region in the 3D Askin–Teller (AT) model, where within a certain range of parameters with equal probabilities there appear two different, but equivalent, ways of ordering two of the three order parameters showing independent behavior. This new approach allowed us to exploit magnetization and internal energy curves, Binder cumulant, Challa- and the Lee-Kosterlitz-like cumulants as well as the internal energy distribution histogram. According to the most effective strategy, in the critical region, we use our recently proposed cluster MC algorithm and the Metropolis algorithm beyond it wherever it is applicable. The existence of two tricritical points and the bifurcation point in this area of the phase diagram is confirmed, and their locations are determined. It is explained that although the system as a whole does not show the presence of latent heat at the boundary of the mixed phase region and the antiferromagnetic phase, it does occur for various order parameters. Specifically, the increase in the energy of the degrees of freedom of one kind is accompanied by an equal decrease in the energy of the degrees of freedom of the other kind.

Keywords Spin lattice systems · Phase transitions · The mixed phase region · 3D Ashkin–Teller model · The Monte Carlo computer experiment

Communicated by Ludovic Berthier.

Zbigniew Wojtkowiak and Grzegorz Musiał have contributed equally to this work.

✉ Zbigniew Wojtkowiak
zbigniew.wojtkowiak@amu.edu.pl

Grzegorz Musiał
gmusial@amu.edu.pl

¹ Faculty of Physics, Adam Mickiewicz University in Poznań, Poznań, Poland

1 Introduction

For many decades, the Ashkin–Teller (AT) model [1] is one of the important points of reference in statistical physics, as it is a nontrivial generalization of the intensively used Ising model. After Fan [2] we express the AT model in terms of two standard Ising models put on the same lattice with spins s_i and σ_i residing at each lattice site i , i.e., s_i and σ_i are the variables that can take values $+1$ or -1 . This means that we take into account only two spin interactions of constant magnitude J_2 between the nearest neighbors. These two independent Ising models are coupled by the four-spin interaction of a constant magnitude J_4 , also only between couples of nearest neighboring spins. Thus, the effective Hamiltonian H is of the form

$$-\frac{H}{k_B T} = \sum_{[i,j]} \{K_2(s_i s_j + \sigma_i \sigma_j) + K_4 s_i \sigma_i s_j \sigma_j\}, \quad (1)$$

where $K_n = -J_n/k_B T$, with $n = 2$ or 4 , $[i, j]$ denotes the summation over the nearest neighboring lattice sites. Moreover, k_B is the Boltzmann constant, and T is the temperature of the system. We consider the symmetric 3D AT model, i.e., the one with the same interactions between s and σ spins, distributed in the cubic lattice.

A dozen of works are devoted to it every year (see, e.g., the recent papers [3–7] and the ones cited therein), and it still finds new interesting applications for specific physical models, like recently for modeling of the crystalline order in VO_2 [8], machine learning [9], the gapless Coulomb state [10], nanodomain patterns in ultratetragonal PbTiO_3 [11], magnetic properties of nanotubes [12]. The AT model is very important also from the theoretical point of view as there are some mappings between the AT model and other physical models [13].

The AT model is so attractive in terms of cognition and application as it is characterized by the $K_2(K_4)$ rich and complex phase diagram because not only two order parameters, $\langle s \rangle$ and $\langle \sigma \rangle$, induce ordering, but also their product $\langle s\sigma \rangle$ exhibits independent ordering. Here, the symbol $\langle \dots \rangle$ denotes the thermal average. The research done for this model and its applications can be found in many papers, e.g., [14–22]. The standard AT model has recently also been the subject of many interesting extensions, e.g., the spin-1/2 AT model with RKKY interaction [23], the mixed spin-1/2 and spin-1 AT model [24], the spin-1 AT model ferromagnetic thin films in the presence of a crystal field [25], the AT model within the effect of crystal field and quantum transverse field [26], the anisotropic AT model in a transverse field [27], and thin magnetic AT films at the special point [28].

The phase diagram area to which the results of our work relate is shown in Fig. 1, which occurs with the antiferromagnetic four-spin interaction, i.e., for negative K_4 parameter values. The first systematic study of the phase diagram of the 3D AT model on a cubic lattice was carried out by Ditzian et al. [29]. In their paper, a phase diagram in the MFA approximation was presented, in which the mixed phase region in question appeared for the first time in the bibliography concerning this model and was marked as “ $\langle \sigma \rangle$ ”. They exploited short series expansion and Monte Carlo (MC) simulations with very small samples, but they sketched the approximate phase diagram which is an important point of reference. Consequently, their results are ambiguous, mainly in the mixed phase region labeled “ $\langle \sigma \rangle$ ” in Fig. 1. In this region, either $\langle s \rangle$ or $\langle \sigma \rangle$ is ferromagnetically ordered but the other is not while $\langle s\sigma \rangle = 0$. Although few papers have been published [19, 21, 30, 31] that report the MC results which relate to the “ $\langle \sigma \rangle$ ” region, their results are preliminary and this region still remains a real challenge.

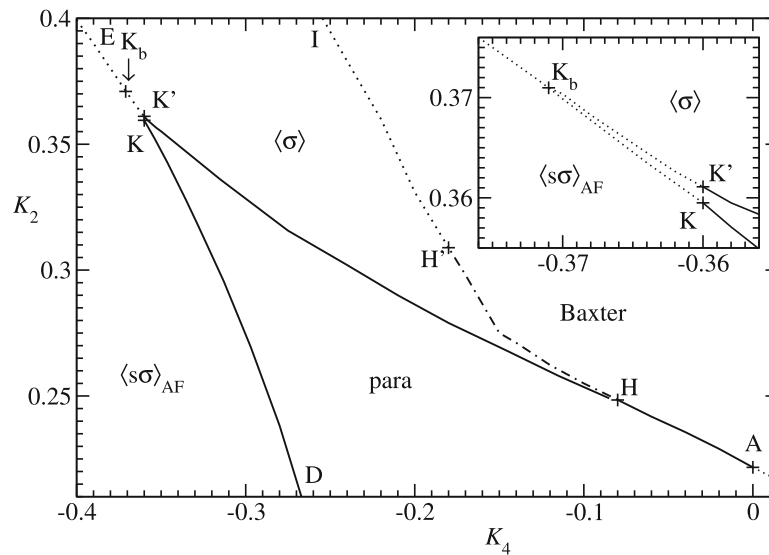


Fig. 1 The investigated phase diagram area of the symmetric 3D AT model on a cubic lattice. The dotted curves denote the first-order phase transitions, the solid ones stand for continuous transitions, and the dotted-broken one indicates transitions of both types for different order parameters. In the phase labeled “Baxter” the system is ferromagnetically ordered with all order parameters $\langle s \rangle$, $\langle \sigma \rangle$ and $\langle s \sigma \rangle$ nonzero, whereas in the phase labeled “para” they all are zero. In the phase “ $\langle s \sigma \rangle_{AF}$ ” there is $\langle s \rangle = \langle \sigma \rangle = 0$ and only the product $\langle s \sigma \rangle$ is antiferromagnetically ordered. In the phase “ $\langle \sigma \rangle$ ” called the mixed phase region $\langle s \sigma \rangle = 0$ and either $\langle s \rangle$ or $\langle \sigma \rangle$ is ferromagnetically ordered, but the other is not. The positions of labeled points inside the phase diagram are marked by + and A, H, H', K, K' are the tricritical points

In the phase diagram in Fig. 1 there are also the Baxter and paramagnetic (labeled as “para”) phases for which all order parameters, $\langle s \rangle$, $\langle \sigma \rangle$, and $\langle s \sigma \rangle$, are ferromagnetically ordered and are zero, respectively. For the phase labeled as “ $\langle s \sigma \rangle_{AF}$ ” $\langle s \rangle = \langle \sigma \rangle = 0$ and only the product $\langle s \sigma \rangle$ is antiferromagnetically ordered. First-order phase transitions are denoted by the dotted curves, whereas the continuous ones are represented by the solid curves. The labeled point positions are marked by + and A, H, H', K, and K' are the tricritical points. Arnold and Zhang [22] using MC simulations obtained the first more precise results along the line AP which occurs for the ferromagnetic four-spin interaction, i.e., for positive K_4 parameter values, and is only partially seen in Fig. 1 in the lower right corner. More accurate results for this area of the phase diagram are the subject of our recent paper [14]. Ising phase transitions occur along the continuous curve ending at the tricritical point K [20, 21, 32].

The 2D AT model shows the line of continuously varying phase transitions at $K_4 \leq K_2$ first shown in the paper [33] which is still of current interest [34]. The MC simulation results suggest the possibility of occurrence of nonuniversal behavior also in the 3D AT model [17, 19, 21, 29–31] but our recent results indicate only a wide crossover along the AH line and the rare coexistence of continuous and first-order phase transitions along the HH' line [17] shown in Fig. 1. It is noteworthy that the character of continuous phase transitions along the HK' line is still an open question [31].

The first aim of this paper is to present our new approach of performing a MC computer experiment to study the order and phase transitions between the mixed phase region “ $\langle \sigma \rangle$ ” and the “para” phase on the example of the standard 3D AT model shown in Fig. 1. The “ $\langle \sigma \rangle$ ” phase occurs only in the symmetric AT model in 3D. Due to the difficulty in obtaining unambiguous results and their interpretation, the “ $\langle \sigma \rangle$ ” region is often omitted, as it is the most complex and the least recognized region of the 3D AT model phase diagram. To solve this problem, we have developed an appropriate strategy, precise tools such as three types of cumulants, and the energy distribution histogram, which enable a detailed analysis of

this region. We have recently used these tools with success to analyze the first-order phase transitions to the right of point A shown in Fig. 1 [14]. The idea behind our method was recently explained in [35] on the example of a phase transition at $K_4 = -0.3$. Due to the recently announced presence of metastable and unstable states [4], we use our Wolff type cluster algorithm [36] in the critical region wherever it is applicable (i.e., for $|K_4| < K_2$) and the Metropolis one beyond.

Using our method, we have examined the phase transitions along the HK_bK_b line between the mixed phase region “ $\langle\sigma\rangle$ ” and the paramagnetic phase labeled “para” in Fig. 1. Moreover, we have investigated the phase transitions along the KK_b line between the antiferromagnetic phase “ $\langle s\sigma\rangle_{AF}$ ” and the “para” one, as well as along the K_bE line between the “ $\langle s\sigma\rangle_{AF}$ ” phase and the “ $\langle\sigma\rangle$ ” region. This is the fragment of the phase diagram that is difficult to analyze and where there were only a few preliminary bibliography results [21, 29]. These problems are important and topical, and have not yet been solved in the bibliography of the subject.

2 The Applied Method

To study the mixed phase region of the subject, we exploit the MC computer experiment with importance sampling of states and consider the finite-size cubic samples of the symmetric spin lattice AT model, the behavior of which is fully determined by the Hamiltonian (1). These samples of size L^3 with periodic boundary conditions are large enough to be able to compute the thermodynamic limit of our results. We perform our computer experiments to predict the equilibrium behavior of the 3D AT model according to the statistical mechanics methodology.

The detailed description of the MC computer experiment constructed by us for the 3D AT model based on the analysis of the dependencies of thermal averages of such thermodynamic variables as magnetization or internal energy, and three different cumulants on the coupling constant, and on the dependencies of the internal energy distribution histogram on energy can be found in our recent papers [14, 37]. In this Section, apart from the computational aspects, we present only its key elements and we focus primarily on explaining how to realize it in the mixed phase region “ $\langle\sigma\rangle$ ”.

First, we bring our system to the state of thermodynamic equilibrium using the appropriate number of MC steps that we have analyzed in our paper [36]. Moreover, in our MC computer experiments, in contrast to simple MC simulations, we not only compute thermodynamic quantities but also carefully determine their error bars. For this purpose, one program run consists of the computation of 6 to 24 partial averages, each independently calculated from approximately 10^7 MC steps. However, only every k th step contributes to the thermodynamic calculations ($6 < k < 10$), which is enough to avoid correlations between sampled configurations of our system using the Metropolis algorithm [36]. The problem of these correlations is radically smaller in the case of the cluster algorithm [38], which is also the case in our version of this algorithm [36].

Of course, we get a true picture of the phase transition only in the thermodynamic limit. To obtain reliable extrapolations of our results to the thermodynamic limit, we perform computations in our system also with the largest possible size L , which take many weeks at sequential processing. In order to get the results in a reasonable time using the MPI library, we have parallelized the processing in our computer experiments, obtaining almost perfect speedup on symmetric multicomputers [39].

The presence of metastable and unstable states in the 3D AT model was recently signaled using the mean field method [4]. It is well known that the mean field theory is a solid tool, especially suitable for the first view of the problem, and it does not provide quantitative consistence with the precise results. Nevertheless, it gives good qualitative insight into the problem (see, e.g., [40]). So, we generate equilibrium configurations of finite-size cubic spin samples for fixed values of our model parameters described above in the Hamiltonian (1) using our recently constructed cluster algorithm of the Wolff type [36] in the critical region wherever it is applicable (i.e., for $|K_4| < K_2$, see also [41, 42]) and the Metropolis one beyond. This is the best strategy, also to optimize the time to obtain results with comparable error bars.

To prelocate a temperature-driven phase transition point, we fix a particular value of K_4 coupling and analyze Binder cumulant $Q_{\alpha,L}(K_2) = \langle M_\alpha^2 \rangle_L^2 / \langle M_\alpha^4 \rangle_L$ dependences (see, e.g., [17, 20, 32, 43]), where $\langle M_\alpha^n \rangle_L$ denotes the n -th power of the order parameter α component, with $\alpha = s, \sigma$ or their product $s\sigma$, which are averaged over an ensemble of independent samples of the size L^3 . The lack of characteristic minima in the course of the $Q_{\alpha,L}(K_2)$ dependences indicates that the phase transition can be continuous [19, 21, 43].

To check if there occurs the latent heat during a phase transition, that is, to unambiguously determine the character of a phase transition and to more accurately determine the location of this transition point, we also compute the Challa [44]

$$V_{\alpha,L} = 1 - \frac{\langle E_\alpha^4 \rangle_L}{3 \langle E_\alpha^2 \rangle_L^2} \tag{2}$$

and the Lee-Kosterlitz [45]

$$U_{\alpha,L} = \frac{\langle E_\alpha^2 \rangle_L}{\langle E_\alpha \rangle_L^2} \tag{3}$$

like cumulants. Here $\langle E_\alpha^n \rangle_L$ is the n -th moment of the entire Hamiltonian ($\alpha = H$) or the interaction energy of α -degrees of freedom ($\alpha = s, \sigma$, or their product $s\sigma$) separately, which is averaged over an ensemble of independent samples of the size L^3 . Thus, we can compute the latent heat l_α coming also from each kind of degrees of freedom α with $\alpha = s, \sigma$, or their product $s\sigma$ separately [17, 18, 21].

We analyze the dependences $V_{\alpha,L}(K_2)$ which show characteristic local minima $V_{\alpha,L}^{\min}$ [44] and $U_{\alpha,L}(K_2)$ with characteristic local maxima $U_{\alpha,L}^{\max}$ [45] at a fixed value of K_4 coupling in the close critical region. When the thermodynamic limit $V_{\alpha,L}^{\min}$ value with its error bar is different from $2/3$ and the $U_{\alpha,L}^{\max}$ value with its error bar is different from 1 , we conclude that a phase transition is qualified to be of the first order; otherwise we assume that the phase transition is continuous [14, 17, 21, 44, 45]. The latent heat l_α coming from the whole Hamiltonian ($\alpha = H$) or from the interaction energy E_α of α degrees of freedom with $\alpha = s, \sigma$, or their product $s\sigma$, in the thermodynamic limit

$$l_\alpha = E_{\alpha,+} - E_{\alpha,-}, \tag{4}$$

where $E_{\alpha,\pm} = E_\alpha(K_2 \rightarrow K_{2,c}|\pm)$, are determined on the basis of the Lee-Kosterlitz formula [45, 46]

$$V_{\alpha,L \rightarrow \infty}^{\min} = \frac{2}{3} - \frac{1}{12} \left(\frac{E_{\alpha,+}}{E_{\alpha,-}} - \frac{E_{\alpha,-}}{E_{\alpha,+}} \right)^2 + \frac{A_V}{L^3} \tag{5}$$

and using the method proposed in [21]. Equation (5) was also independently obtained by Borgs et al. [47] from a more rigorous point of view. $K_{2,c}$ in Eq. (4) is the critical value of

K_2 coupling with the fixed value of K_4 . The quantity A_V in Eq. (5) stands for L independent expression of the complicated form [45]. Analogously, one can determine the latent heat l_α on the basis of the $U_{\alpha,L}$ cumulant maxima values scaled to the thermodynamic limit using the Lee-Kosterlitz formula [45]

$$U_{\alpha,L \rightarrow \infty}^{\max} = \frac{(E_{\alpha,+} + E_{\alpha,-})^2}{4E_{\alpha,+}E_{\alpha,-}} + \frac{A_U}{L^3}, \quad (6)$$

where $\alpha = s, \sigma, s\sigma$, or H , and A_U stands for L independent complicated expression.

We conclude from Eqs. (5) and (6) that values and locations of cumulant $V_{\alpha,L}$ minima and of cumulant $U_{\alpha,L}$ maxima scale linearly versus L^{-3} . Using Eqs. (5) and (6) and the method proposed in [21] one can calculate the values of $E_{\alpha,+}$ and $E_{\alpha,-}$ and estimate the latent heat from Eq. (4). Moreover, the thermodynamic limit $K_{2,\alpha}^{\min}$ values of minima and $K_{2,\alpha}^{\max}$ values of maxima are far better estimates of the critical K_2 values than the preliminary ones obtained on the basis of the Binder cumulant $Q_{\alpha,L}(K_2)$ dependences mentioned above.

This method [14] gives good results when the system has unambiguously determined equilibrium configurations of finite-size cubic spin samples for fixed values of our model parameters described above in the Hamiltonian (1).

However, in the mixed phase region, marked as “ $\langle\sigma\rangle$ ” in Fig. 1, the situation is more complicated: $\langle s\sigma \rangle = 0$ and there are two equally probable phases in which either $\langle s \rangle$ or $\langle \sigma \rangle$ is ferromagnetically ordered, but the other is not in the thermodynamic limit. This causes the values of the computed thermodynamic quantities to oscillate [21, 30] as during sufficiently long simulations both phases will appear with approximately equal probability. Therefore, to obtain clear results, we have developed a new approach, the idea of which was presented in our recent paper [35] on the example of the phase transition at $K_4 = -0.3$. We propose a conventional division of our system into two sublattices: the ordered one which will be marked with a capital letter Σ and the unordered one marked with a capital letter S . Importantly, the decision to allocate the real spins σ and s to these conventional sublattices is decided only after each MCS is performed and the results from the spins with greater magnetization are systematically added to the results of the conventional sublattice Σ while the results from the second spins are added to the results of the conventional sublattice S . The number of MCS must be large enough to compensate for the separation of our system into these two artificial sublattices Σ and S in the paramagnetic region. Computations for the product of spins $s\sigma$ do not need to be changed.

Thus, bearing in mind that in the mixed phase region “ $\langle\sigma\rangle$ ”, two phases are equally probable in which either $\langle s \rangle$ or $\langle \sigma \rangle$ is ferromagnetically ordered but the other is not, thanks to the conventional division into two sublattices, the first one with greater magnetization of Σ spins, and the second one with smaller magnetization of S spins, for the analysis we get smooth dependences of thermodynamic quantities and of cumulant values on the coupling K_2 with a fixed value of the coupling K_4 .

We have located phase transition points precisely enough to be able to use another independent method to check for the presence of the latent heat during a phase transition with greater accuracy. We compute the probability $P_{\alpha,L}$ of the internal energy $E_{\alpha,L}$ appearance in the samples of finite size L^3 . As in the case of cumulants, the $P_{\alpha,L}(E_{\alpha,L})$ values are computed independently for each degree of freedom $\alpha = S, \Sigma$, or their product $s\sigma$, and also for the whole Hamiltonian (1) denoted by $\alpha = H$, at a critical value $K_{2,c}$. A characteristic histogram of the distribution of this energy E_α with two peaks in the close critical region for first-order phase transitions can be observed [14, 45, 48, 49]. The maxima of these peaks appear at the energy value $E_{\alpha,-,L}$ for the ordered state and at $E_{\alpha,+,L}$ for the unordered one

for the samples of finite-size L . In contrast, for continuous phase transitions, only a single peak of the probability dependence $P_{\alpha,L}(E_{\alpha,L})$ appears in the thermodynamic limit. This is an important clue for determining the character of a phase transition.

3 Results

We demonstrate our new way of performing MC computer experiments at the mixed phase region “ $\langle\sigma\rangle$ ” boundaries $\text{HK}'\text{K}_b$ with paramagnetic and K_bE with antiferromagnetic phases shown in Fig. 1. In the “ $\langle\sigma\rangle$ ” region with equal probabilities there appear two different, but equivalent, ways of ordering two of the three order parameters: $\langle s\sigma\rangle = 0$ and either $\langle s\rangle$ or $\langle\sigma\rangle$ is ferromagnetically ordered but the other is not. Moreover, we have investigated the phase transitions along the adjacent KK_b line between the antiferromagnetic phase “ $\langle s\sigma\rangle_{AF}$ ” and the paramagnetic one.

For the point with $K_4 = -0.358$ on two boundaries between the mixed phase region “ $\langle\sigma\rangle$ ” and the paramagnetic phase “para” as well as between the phase “para” and the antiferromagnetic phase “ $\langle s\sigma\rangle_{AF}$ ” shown in Fig. 1 we observe that the values of the cumulant $V_{\alpha,L}(K_2)$ minima and the cumulant $U_{\alpha,L}(K_2)$ maxima for $\alpha = S, \Sigma, s\sigma$, or H in the thermodynamic limit scale to $2/3$ and 1 , respectively, in terms of their error bars. This means that the phase transitions for all three order parameters $\langle\Sigma\rangle$, $\langle S\rangle$, and $\langle s\sigma\rangle$ are continuous.

To understand the situation, in Fig. 2 one can see the magnetization per site $\langle M_{\alpha}^2 \rangle_L$ value changes for all three order parameters, $\langle\Sigma\rangle$, $\langle S\rangle$ and $\langle s\sigma\rangle$. The latter two show no order in the paramagnetic phase, nor in the mixed phase region, as well as $\langle\Sigma\rangle$ and $\langle S\rangle$ show no order in the “ $\langle s\sigma\rangle_{AF}$ ” phase, in the thermodynamic limit. However, nonzero magnetization values result in the appearance of cumulant V minima and cumulant U maxima for all three order parameters. Therefore, in the lower graph of Fig. 2 for the order parameter $\langle S\rangle$ we observe a decrease in the magnetization value per node with an increase in the system size L , as opposed to the increase in magnetization for the order parameter $\langle\Sigma\rangle$ labeled with $\alpha = \Sigma$ in the “ $\langle\sigma\rangle$ ” region and for the order parameter $\langle s\sigma\rangle$ labeled with $\alpha = s\sigma_{AT}$ computed from the one of two sublattices in the antiferromagnetic phase “ $\langle s\sigma\rangle_{AF}$ ”. A similar decrease in the magnetization value per node for the order parameter $\langle s\sigma\rangle$ with an increase in L can be observed for the curves labeled with $\alpha = s\sigma$ in Fig. 2 computed for the entire lattice which indicates that there is the antiferromagnetic order in the phase “ $\langle s\sigma\rangle_{AF}$ ”. Moreover, for large samples with $L \geq 72$ the dependences $V_{S,L}(K_2)$ minima and the dependences $U_{S,L}(K_2)$ maxima disappear, as expected [14, 21, 35, 44, 45].

The abscissa $K_{2,\alpha,\infty}^{\min}$ of the minima positions of the dependences $V_{\alpha,L}(K_2)$ and the abscissa $K_{2,\alpha,\infty}^{\max}$ of the maxima positions of the dependences $U_{\alpha,L}(K_2)$ for $\alpha = \Sigma$, or $s\sigma$ as well as the respective extremes computed using the energy of the whole Hamiltonian with $\alpha = H$ are consistent in the thermodynamic limit in terms of their error bars for each phase transition. The abscissa of these extremes for phase transition on the upper line HK' scale to $K_{2,c} = 0.35983(12)$ and on the lower line DK scale to $K_{2,c} = 0.35716(16)$ which are the average values calculated from the respective critical values of $K_{2,\alpha,\infty}^{\min}$ and $K_{2,\alpha,\infty}^{\max}$ at a fixed value $K_4 = -0.358$. The method of determining the error bars of the quantities extrapolated to the thermodynamic limit is explained below in Figs. 4 and 5. These are the more precise values than the preliminary estimates of $K_{2,c} = 0.3605(8)$ and $0.3566(7)$ obtained from the analysis of the cumulant dependences $Q_{\alpha,L}(K_2)$ (for the details, see [21, 32, 43]). We observe a similar behavior along the entire phase transition HK' line (see also [35]) and along the line DK .

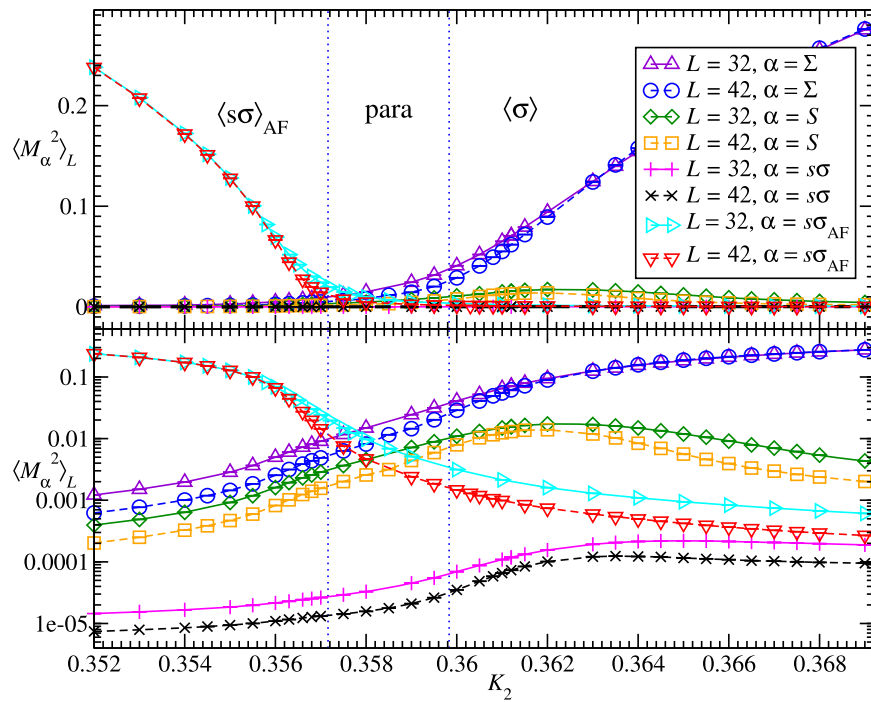


Fig. 2 The dependence of the thermal average of the magnetization square per site $\langle M_\alpha^2 \rangle_L$ on the coupling constant K_2 at the fixed value of the coupling $K_4 = -0.358$ for the values L and α explained in the legend. Here, $\alpha = s\sigma$ represents the magnetization of the product $s\sigma$ computed for the entire lattice, while $\alpha = s\sigma_{AF}$ denotes this magnetization computed for one of the two sublattices. To show the different scales of changes in the values along the individual curves, the lower graph has a logarithmic scale on the ordinate axis. Vertical dotted lines indicate the critical values of $K_{2,c} = 0.35983(12)$ and $0.35716(15)$, while “ $\langle s\sigma \rangle_{AF}$ ”, “para” and “ $\langle \sigma \rangle$ ” indicate the ranges of K_2 values in which the antiferromagnetic and paramagnetic phases and the mixed phase region occur, respectively, as explained in Fig. 1. For the readability of the graphs, the dependencies are shown only for selected L values. The error bars are of the order of magnitude of symbols

We have divided our further analyzes into three subsections. In the first we examine the behavior of our system in the vicinity of the tricritical points K and K' , in the second subsection we focus on the bifurcation point K_b region, and in the third we analyze the behavior of the system along the K_bE line, which are shown in Fig. 1.

3.1 The Vicinity of Tricritical Points K and K'

With the value of the coupling constant $K_4 = -0.366$ (see Fig. 3) for $L = 28$, we observe two clear minima of the dependence of the cumulant $V_{H,L}$ on the coupling constant K_2 . The index $\alpha = H$ represents the results obtained using the energy of the entire Hamiltonian and each minimum is the result of a different phase transition. The abscissa of the positions of these minima in the thermodynamic limit given in the third and fifth columns of Table 1 scale to different critical values of K_2 taking into account their error bars. The minimum on the left hand side for $\alpha = H$ in Fig. 3 corresponds to the transition between the antiferromagnetic and paramagnetic phases denoted respectively as “ $\langle s\sigma \rangle_{AF}$ ” and “para” in Fig. 1. The abscissa of these minima in the thermodynamic limit scale to the critical value of $K_{2,H,\infty}^{min,l} = 0.36592(14)$ given in the fifth column of Table 1. The same phase transition corresponds to the upper left minimum in Fig. 3 for $\alpha = s\sigma$ and the abscissa of these minima in the thermodynamic limit scale to the critical value $K_{2,s\sigma,\infty}^{min,l} = 0.36582(12)$ provided in the fourth column of Table 1. These two values agree within the limits of their error bars.

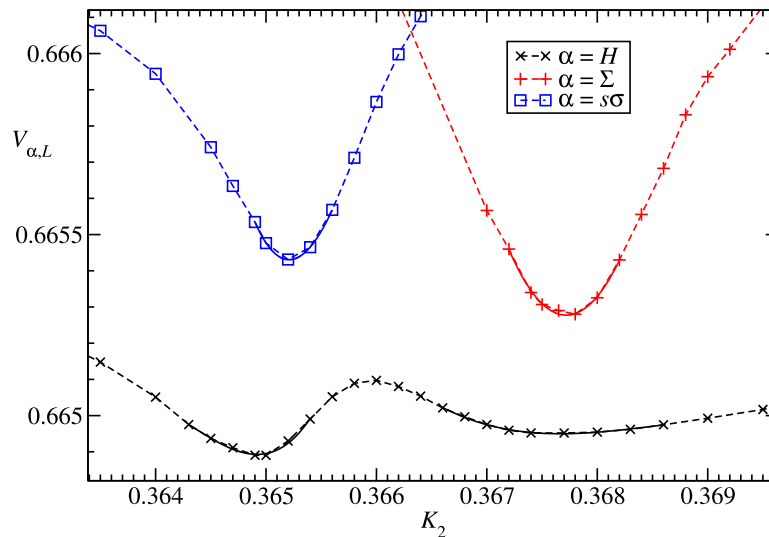


Fig. 3 Dependence of the cumulant values of $V_{\alpha,L}$ on the coupling constant K_2 for the fixed values of the coupling constant $K_4 = -0.366$ and for the size of the system $L = 28$. The subscript $\alpha = H$ indicates the results obtained using the energy of the entire Hamiltonian H , the results with the subscript $\alpha = \Sigma$ were obtained using the energy of the first term of this Hamiltonian determining the behavior of the order parameters $\langle \Sigma \rangle$ and $\langle S \rangle$, while the subscript $\alpha = s\sigma$ indicates the results obtained using the energy of the second term of this Hamiltonian determining the behavior of the order parameter $\langle s\sigma \rangle$. The point with $K_4 = -0.366$ and $L = 28$ was chosen so that the cumulant values presented were comparable for $\alpha = \Sigma, s\sigma$, and H . The error bars are of the order of magnitude of symbols

Table 1 Values of the positions of cumulants minima $V_{\alpha,\infty}^{min}$ determined in the thermodynamic limit on the upper line of phase transitions HK_bK_bE (results with the superscript u , where the order parameter $\langle \Sigma \rangle$ exhibits critical behavior, as indicated by the subscript $\alpha = \Sigma$) and on the bottom line DKK_bE (results with the superscript l , where the order parameter $\langle s\sigma \rangle$ exhibits critical behavior, as indicated by the subscript $\alpha = s\sigma$)

K_4	$K_{2,\Sigma,\infty}^{min,u}$	$K_{2,H,\infty}^{min,u}$	$K_{2,s\sigma,\infty}^{min,l}$	$K_{2,H,\infty}^{min,l}$
-0.358	0.35988(12)	0.35978(9)	0.35716(12)	0.35716(15)
-0.360	0.36112(12)	0.36108(8)	0.35956(11)	0.35946(9)
-0.362	0.36260(12)	0.36268(14)	0.36154(15)	0.36146(14)
-0.366	0.36645(12)	0.36639(14)	0.36582(12)	0.36592(14)
-0.370	0.37031(14)	0.37043(18)	0.36992(12)	0.36982(15)
-0.371	0.37104(12)	0.37120(18)	0.37097(6)	0.37092(12)
-0.372	0.37198(8)	0.37220(24)	0.37196(5)	0.37189(12)
-0.376	0.375986(26)	0.375998(60)	0.376006(9)	0.376006(29)

The index $\alpha = H$ represents the results obtained using the energy of the entire Hamiltonian. The fixed values of the coupling constant K_4 are in the first column

On the other hand, the abscissa of the minima on the right-hand side in Fig. 3 scaled to the thermodynamic limit give respectively the critical values $K_{2,H,\infty}^{min,u} = 0.36639(14)$ and $K_{2,\Sigma,\infty}^{min,u} = 0.36645(12)$ given in the third and second columns of Table 1. These K_2 values correspond to the phase transition between the mixed phase region marked as “ $\langle \sigma \rangle$ ” and the paramagnetic phase marked as “ $para$ ” in Fig. 1. These two values also agree within the limits of their error bars.

We have determined the presence and amount of the latent heat during both phase transitions by rescaling according to Eq. (5) to the thermodynamic limit of the values of cumulant $V_{\alpha,L}$ minima with $\alpha = s\sigma, \Sigma$ and H for different system sizes L . The results of these ana-

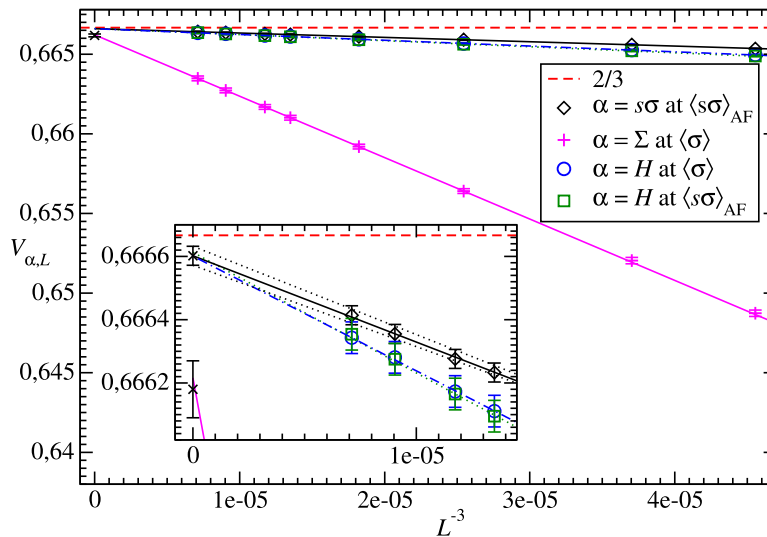


Fig. 4 The values of the minima of cumulants $V_{\alpha,L}$ for $K_4 = -0.366$ with $\alpha = s\sigma, \Sigma,$ and H explained in the legend for different sizes of the system sizes L scaled to the thermodynamic limit according to the relation (5). Moreover, the symbols \times mark the scaled values of the position $K_{2,c}$ for individual phase transitions along with their error bars. The dependences are fitted by straight lines using linear regression. The inset shows the region of the extrapolated values. The dashed line marks the $2/3$ limit value. The role of the dotted lines is explained in the text

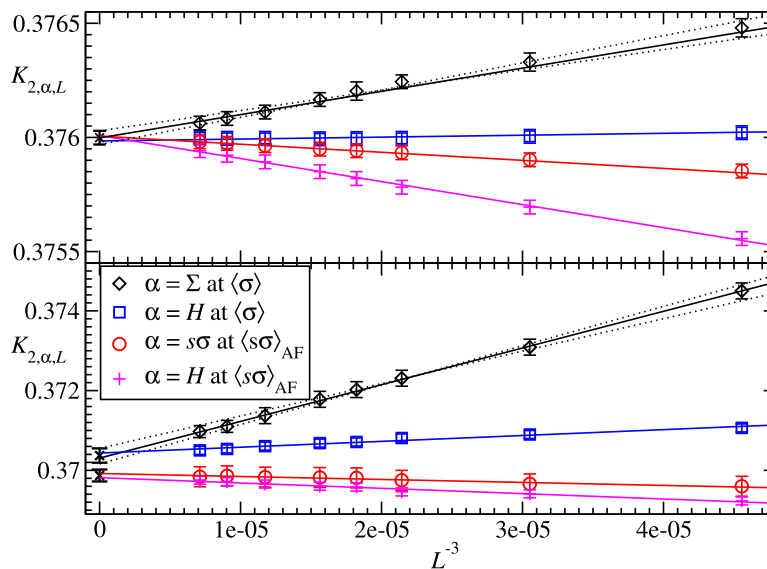


Fig. 5 Abscissas $K_{2,\alpha,L}^{\min}$ of minima of cumulants $V_{\alpha,L}$ with $\alpha = s\sigma, \Sigma$ and H explained in the legend extrapolated to the thermodynamic limit at the fixed value of the coupling $K_4 = -0.37$ (the lower graph) and at $K_4 = -0.376$ (the upper graph). The symbols are explained in the legend. In addition, the symbols \times mark the scaled values of the position of $K_{2,c}$ for individual phase transitions along with their error bars. The legend also indicates the areas of the phase diagram (antiferromagnetic phase “ $\langle s\sigma \rangle_{AF}$ ” or the mixed phase region “ $\langle \sigma \rangle$ ”) on which these results were obtained. The dependences are fitted by straight solid lines using linear regression. The role of the dotted lines is explained in the text

lyzes with the coupling constant $K_4 = -0.366$ are presented in Fig. 4. Passing through error bars, the dotted lines in Figs. 4 and 5 are deflected to the maximum degree up and down from the solid lines. Their intersection points with ordinate axis determine $V_{\alpha,\infty}^{\min}$ error bars. For clarity, dotted lines are shown only for $\alpha = s\sigma$. All rescaled values together with their error bars are different from $2/3$, so these are the first-order phase transitions, and their summary

Table 2 Values of cumulants minima $V_{\alpha,\infty}^{min}$ determined in the thermodynamic limit on the upper line of phase transitions HK’K_bE (results with the superscript *u*, where the order parameter $\langle \Sigma \rangle$ exhibits critical behavior, as indicated by the subscript $\alpha = \Sigma$) and on the bottom line DKK_bE (results with the superscript *l*, where the order parameter $\langle s\sigma \rangle$ exhibits critical behavior, as indicated by the subscript $\alpha = s\sigma$)

K_4	$V_{\Sigma,\infty}^{min,u}$	$V_{H,\infty}^{min,u}$	$V_{s\sigma,\infty}^{min,l}$	$V_{H,\infty}^{min,l}$
−0.358	0.66646(39)	0.66665(4)	0.66665(3)	0.66656(32)
−0.360	0.66635(39)	0.66664(5)	0.66664(4)	0.66645(31)
−0.362	0.66624(22)	0.666634(18)	0.66625(19)	0.666634(16)
−0.366	0.66618(9)	0.666601(21)	0.666602(30)	0.666613(24)
−0.370	0.66612(26)	0.666629(16)	0.66635(12)	0.666631(16)
−0.371	0.66616(16)	0.66665(2)	0.66617(24)	0.66665(3)
−0.372	0.66316(38)	0.66663(5)	0.66588(24)	0.66663(4)
−0.376	0.6522(18)	0.66664(3)	0.6643(5)	0.66665(4)

The index $\alpha = H$ represents the results obtained using the energy of the entire Hamiltonian. The fixed values of the coupling constant K_4 are in the first column. The bold values of the cumulant minima $V_{\alpha,\infty}^{min}$ within the error bars are consistent with the limit value $2/3$

is presented in Table 2. Similar conclusions can be drawn from the results of analyzes for $K_4 = -0.362$, one row higher.

The situation is different for phase transitions with $K_4 = -0.358$ and $K_4 = -0.36$, for which the results are presented in the first two rows of Table 2. Here, all the values of the cumulant $V_{\alpha,L}$ minima rescaled to the thermodynamic limit, taking into account their error bars, are not different from the limit value $2/3$, which have been marked in bold. Therefore, these are continuous phase transitions.

The results of these analyzes allowed us to determine the position of the tricritical point K at $(-0.360(1), 0.35951(11))$ on the phase diagram in Fig. 1, i.e., with greater precision than in the paper [21]. Moreover, thanks to the proposed method of separating the system into two sublattices, depending on the magnetization value, we have determined the position of the tricritical point K’ at $(-0.360(1), 0.36110(12))$ on the phase diagram for the first time in the bibliography. In earlier papers, the possibility of the existence of the tricritical point K’ was signaled, but its location was not determined due to large oscillations of the values of the thermodynamic quantities computed for a mixed phase region using MC experiments [21].

Analysis of the behavior of analogous cumulant U maxima with the use of the scaling relation Eq. (6) has led to the same conclusions.

3.2 The Bifurcation Point K_b Region

Figure 5 presents abscissas $K_{2,\alpha,L}^{min}$ of minima of cumulants $V_{\alpha,L}$ with $\alpha = s\sigma, \Sigma$ and H explained in the legend which are extrapolated to the thermodynamic limit at the fixed value of the coupling $K_4 = -0.37$ (the lower graph) and at $K_4 = -0.376$ (the upper graph). The legend also indicates the areas of the phase diagram (antiferromagnetic phase “ $\langle s\sigma \rangle_{AF}$ ” or the mixed phase region “ $\langle \sigma \rangle$ ”) on which these results were obtained. The dependences are fitted by straight solid lines using linear regression, according to the scaling relation (5). We have marked the scaled position values with the symbols \times , which constitute the critical value of the coupling constant $K_{2,c}$ for individual phase transitions together with their error bars.

For $K_4 = -0.37$ (the lower graph in Fig. 5) we observe two critical values $K_{2,s\sigma\infty}^{min,l} = 0.36992(12)$ and $K_{2,H,\infty}^{min,l} = 0.36982(15)$ consistent within the error bars on the lower line KK_b and two matching values $K_{2,\Sigma\infty}^{min,u} = 0.37031(14)$ and $K_{2,H,\infty}^{min,u} = 0.37043(18)$ on the upper line $K'K_b$. However, the values for these two pairs are significantly different, taking into account their error bars. Thus, our results confirm that here the phase transitions for the order parameters $\langle s\sigma \rangle$ and $\langle \Sigma \rangle$ still occur along different lines in the phase diagram in Fig. 1.

One can observe a different situation in the upper graph in Fig. 5 for $K_4 = -0.376$. Here, the four critical values $K_{2,s\sigma\infty}^{min,l} = 0.376006(9)$, $K_{2,H,\infty}^{min,l} = 0.376006(29)$, $K_{2,\Sigma\infty}^{min,u} = 0.375986(26)$, and $K_{2,H,\infty}^{min,u} = 0.375998(60)$ resulting from the extrapolations are consistent within their error bars. Thus, the phase transitions for the order parameters $\langle s\sigma \rangle$ and $\langle \Sigma \rangle$ occur along the same line K_bE in the phase diagram in Fig. 1.

The selected values of our analyzes for this part of the phase diagram are presented in rows 4 to 9 of Table 1. The first value of the coupling constant K_4 , for which the abscissa of the four studied minima scale to compatible values within their error bars, is $K_4 = -0.371$. On this basis, we have assumed the position of the bifurcation point K_b as $(-0.371(1), 0.37103(12))$. For the ordinate, we have assumed here the mean value of all four values of the K_2 coupling constant given in the seventh row of Table 1. Our result is in line with the preliminary results from the previous papers [21, 29] determining the position of the K_bE line satisfying the asymptotic relationship $K_2 = -K_4$.

Analysis of the behavior of analogous U cumulant maxima with the use of the scaling relation Eq. (6) leads to the same conclusions.

3.3 The K_bE Line

Along the line K_bE , shown in the phase diagram in Fig. 1, i.e., for the coupling constant value $K_4 \leq -0.371$, the parameter describing four-spin interactions, rescaled cumulant $V_{\Sigma,\infty}^{min}$ and $V_{s\sigma,\infty}^{min}$ minima in the thermodynamic limit, taking into account their error bars, are significantly different from the limit value $2/3$. This means that the phase transitions for the order parameters $\langle s\sigma \rangle$ and $\langle \Sigma \rangle$ along the K_bE line are of first order.

Important information is provided here by the values of the cumulant minima $V_{H,\infty}^{min,\sigma}$ and $V_{H,\infty}^{min,s\sigma}$, which in the thermodynamic limit within the error bars are in line with $2/3$. These values are shown in bold on the last three lines of Table 2. Thus, the system as a whole shows no latent heat in the transition from the antiferromagnetic phase “ $\langle s\sigma \rangle_{AF}$ ” to the mixed phase region “ $\langle \sigma \rangle$ ”. This is due to the fact that when going from the “ $\langle s\sigma \rangle_{AF}$ ” phase to the “ $\langle \sigma \rangle$ ” region, the product $s\sigma$ undergoes the phase transition from order to disorder, increasing the associated internal energy, while for the same transition, the internal energy related to the degrees of freedom Σ is reduced by the same amount, because it is a transition from disorder to order. Thus, the internal energy of the system as a whole does not change within its error bar.

These energy changes are plotted on the left-hand side of Fig. 6 at $K_4 = -0.376$ and for $L = 40$. As we have explained in the last paragraph of Sect. 2, at the critical point, one can compute the latent heat value with good precision using the energy distribution histogram method. The energy distribution histograms for the system size $L = 40$ for the critical point $K_{2,c} = 0.375999(31)$ (the average value of the critical values $K_{2,c}$ provided in the last row of Table 1) and for the fixed value $K_4 = -0.376$ are shown in the graphs on the right hand side of Fig. 6.

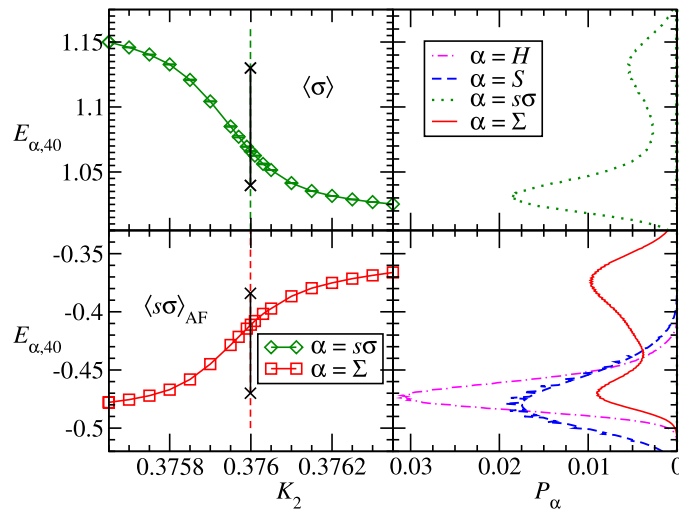


Fig. 6 The energy dependences of the $E_{\alpha,L}$ distribution histogram $P_{\alpha,L}(E_{\alpha,L})$ shown on the graphs on the right-hand side for the 3D AT model for degrees of freedom specified in the legend at $K_4 = -0.376$ and for $L = 40$. The left-hand side graphs present internal energy dependences $E_{\alpha,L}(K_2)$ with $\alpha = H, S, s\sigma, \Sigma$ also at $K_4 = -0.376$ and for $L = 40$. The critical coupling value $K_{2,c} = 0.375999(31)$ is marked with a vertical dashed line. Labels “ $\langle s\sigma \rangle_{AF}$ ” and “ $\langle \sigma \rangle$ ” inform about the type of order in the system in a given interval of K_2 coupling values. For clarity only selected points are shown, and error bars are omitted, as they are less than magnitudes of symbols

Using this method, one can more accurately determine the latent heat l_α as the change of internal energy $l_\alpha = E_{\alpha,+L} - E_{\alpha,-L}$ for individual degrees of freedom $\alpha = \Sigma, s\sigma$, as well as for the entire system $\alpha = H$. From our analyzes, we have $l_{s\sigma} = 0.090(10)$, $l_\Sigma = 0.086(5)$ and both of these values agree within their error bars. Due to the opposite direction of change of the internal energy of the product $s\sigma$ and of degrees of freedom Σ during this phase transition, a decrease in the value of the former is accompanied by an increase in the value of the latter, and the total energy change of the system as a whole is $0.004(15)$, which within the error bar is consistent with 0. Therefore, we have observed no latent heat not only for the S degrees of freedom but also for the system as a whole l_H , as one can see in Fig. 6, where for $\alpha = S$ and H the single probability peaks P_α are observed. The presence of single probability peaks of the energy occurrence indicates the absence of latent heat during a phase transition as mentioned in the last paragraph of Sect. 2.

The results obtained by the method of the internal energy distribution histogram are consistent within their error bars with the results determined with the use of the cumulant V and U properties.

4 Conclusions

We conclude that our MC computer experiment and the method explained in our recent paper [14] have been successfully extended to investigate the mixed phase region. The results of our computer experiments clearly confirm that in the mixed phase region “ $\langle \sigma \rangle$ ” of the 3D AT model there are two equally probable phases in which either $\langle s \rangle$ or $\langle \sigma \rangle$ is ferromagnetically ordered but the other is not in the thermodynamic limit. As a consequence, the values of the computed thermodynamic quantities oscillate when we apply our method presented in [14] in its original form, since during sufficiently long simulations both phases appear with approximately equal probability [21, 30]. These oscillations of the values of the computed

thermodynamic quantities make their interpretation very difficult. Therefore, to obtain clear results, we have demonstrated and carefully checked our new approach, the idea of which was presented in our recent paper [35] on the example of the phase transition at $K_4 = -0.3$. We have used a conventional division of our system into two sublattices: the ordered one and the unordered one and the decision to allocate the real spins σ and s to these conventional sublattices Σ and S is decided only after each MCS is performed and the results from the spins with greater magnetization are systematically added to the results of the conventional sublattice Σ while the results from the second spins are added to the results of conventional sublattice S .

In contrast to the results published so far in the bibliography, the implementation of our new approach in the MC experiment allowed us to use Binder cumulant, the Challa-like and the Lee-Kosterlitz-like cumulants, as well as the internal energy distribution histogram to obtain clear results for a mixed phase region. Along the line $HK'K_bE$ (see Fig. 1), according to the most effective strategy, in the critical region we have used our recently proposed cluster MC algorithm [36] and the Metropolis algorithm beyond the critical region, which are suitable for both the first-order and continuous phase transitions in the 3D AT model. The KK_b line is outside the applicability range of our cluster algorithm of the Wolff-type $|K_4| < K_2$ [36, 41, 42].

We have demonstrated our method on the mixed phase region “ $\langle\sigma\rangle$ ” boundary where there are only a few preliminary bibliography results [21, 29], i.e., along the line $HK'K_bE$. Moreover, to complete our study of this area of the 3D AT model phase diagram, we have examined the behavior of the system along the adjacent line KK_b . It is worth mentioning here that the AT model is an important reference point in statistical physics. However, this method can be successfully applied to other spin lattice models whose phase diagram contains a mixed phase region.

Since for the conventional degrees of freedom Σ and S we have gathered contributions from both equally probable phases: this with $\langle\sigma\rangle$ nonzero and $\langle s\rangle = 0$ as well as with $\langle\sigma\rangle = 0$ and $\langle s\rangle$ nonzero, thus we have shown that the phase transitions for $K_4 \leq -0.36$ are continuous. These continuous phase transitions end at the tricritical points K with the (K_4, K_2) coordinates $(-0.360(1), 0.35951(11))$ and K' with $(-0.360(1), 0.36110(12))$. These values are in line with those obtained earlier [21] and are more accurate. We have unequivocally shown that for $K_4 < 0.36$ the first-order phase transitions take place.

The preliminary results of Ditzian et al. [29] indicate the existence of the single K point from which the boundary between the antiferromagnetic phase $\langle s\sigma\rangle_{AF}$ and the mixed phase region $\langle\sigma\rangle$ begins. In turn, the results of Musiał et al. [21] already have indicated the existence of two different tricritical points K and K' with the lines of phase transitions KE and $K'E$ asymptotically approaching each other on both sides of the relation $K_2 = K_4$. However, the results of this paper clearly indicate the existence of the bifurcation point K_b , and its location is $(-0.371(1), 0.37103(12))$. For $K_4 < -0.371$, the “ $\langle s\sigma\rangle_{AF}$ ” phase and the “ $\langle\sigma\rangle$ ” region are separated by the line K_bE .

The results presented show that to explain the complex behavior of the 3D AT model, it is not enough to compute the latent heat of the entire system, but to fully understand the behavior of the system, it is necessary to consider individual contributions to the latent heat from different degrees of freedom, which was originally proposed in the paper [21]. We have discovered and explained that although the system as a whole does not show the presence of the latent heat at the boundary F_bE between the mixed phase region “ $\langle\sigma\rangle$ ” and the antiferromagnetic phase “ $\langle s\sigma\rangle_{AF}$ ”, this heat does occur for various order parameters. Specifically, the increase in the energy of the degrees of freedom Σ is accompanied by an equal decrease in energy for the product $s\sigma$.

Acknowledgements Numerical calculations were carried out on the computing platforms of Poznań Supercomputing and Networking Center as well as the Faculty of Physics at Adam Mickiewicz University in Poznań.

Data Availability The authors declare that the data supporting the findings of this study are available within the article. Raw data that support the findings of this study are available from the corresponding author, upon a reasonable request.

Open Access This article is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License, which permits use, sharing, adaptation, distribution and reproduction in any medium or format, as long as you give appropriate credit to the original author(s) and the source, provide a link to the Creative Commons licence, and indicate if changes were made. The images or other third party material in this article are included in the article's Creative Commons licence, unless indicated otherwise in a credit line to the material. If material is not included in the article's Creative Commons licence and your intended use is not permitted by statutory regulation or exceeds the permitted use, you will need to obtain permission directly from the copyright holder. To view a copy of this licence, visit <http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>.

References

1. Ashkin, J., Teller, E.: Statistics of two-dimensional lattices with four components. *Phys. Rev.* **64**(5–6), 178 (1943). <https://doi.org/10.1103/PhysRev.64.178>
2. Fan, C.: On critical properties of the Ashkin-Teller model. *Phys. Lett.* **39**(2), 136 (1972). [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(72\)91051-1](https://doi.org/10.1016/0375-9601(72)91051-1)
3. Li, S.-P., Sun, Z.-H.: Local and intrinsic quantum coherence in critical systems. *Phys. Rev. A* **98**(2), 022317 (2018). <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.98.022317>
4. Santos, J.P., Avila, J.A.J., Rosa, D.S., Francisco, R.M.: Multicritical phase diagram of the three-dimensional Ashkin-Teller model including metastable and unstable phases. *J. Magn. Magn. Mater.* **469**, 35–39 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2018.08.030>
5. Delfino, G., Lamsen, N.: Critical points of coupled vector-Ising systems. Exact results. *J. Phys. A* **52**(35), 35LT02 (2019). <https://doi.org/10.1088/1751-8121/ab3055>
6. Patil, P., Sandvik, A.W.: Hilbert space fragmentation and Ashkin-Teller criticality in fluctuation coupled Ising models. *Phys. Rev. B* **101**(1), 014453 (2020). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.014453>
7. Benmansour, A., Bekhechi, S., Brahmi, B.N., Moussa, N., Ez-Zahraouy, H.: Monte Carlo study of thin magnetic Ashkin Teller films at the special point. *J. Magn. Magn. Mater.* **511**, 166944 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2020.166944>
8. Lovorn, T., Sarker, S.K.: Monte Carlo study of thin magnetic Ashkin Teller films at the special point. *Phys. Rev. Lett.* (2017). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.119.045501>
9. Lee, S.S., Kim, B.J.: Confusion scheme in machine learning detects double phase transitions and quasi-long-range order. *Phys. Rev. E* **99**(4), 043308 (2019). <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.99.043308>
10. Zhu, G.-Y., Zhang, G.-Y.: Gapless coulomb state emerging from a self-dual topological tensor-network state. *Phys. Rev. Lett.* **122**(17), 176401 (2019). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.122.176401>
11. Kumar, A., Guy, J.G.M., Zhang, L., Chen, J., Gregg, J.M., Scott, J.F.: Nanodomain patterns in ultratetragonal lead titanate (PbTiO₃). *Appl. Phys. Lett.* **116**(18), 182903 (2020). <https://doi.org/10.1063/5.0007148>
12. Francisco, R.M., Santos, J.P.: Magnetic properties of the Ashkin-Teller model on a hexagonal nanotube. *Phys. Lett. A* **383**(11), 1092–1098 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2019.01.001>
13. Newman, M.E.J., Barkema, G.T.: *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Oxford University Press, Oxford (1999)
14. Musiał, G., Jeziorek-Knioła, D., Wojtkowiak, Z.: Monte Carlo examination of first-order phase transitions in a system with many independent order parameters: Three-dimensional Ashkin-Teller model. *Phys. Rev. E* **103**(6), 062124 (2021). <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.103.062124>
15. Santos, J.P., Sá Barreto, F.C.: Upper bounds on the critical temperature of the Ashkin-Teller model. *Braz. J. Phys.* **46**(1), 70–77 (2016). <https://doi.org/10.1007/s13538-015-0385-0>
16. Akıncı, Ü.: Nonequilibrium phase transitions in isotropic Ashkin-Teller model. *Physica A* **469**, 740–749 (2017). <https://doi.org/10.1016/j.physa.2016.11.064>
17. Wojtkowiak, Z., Musiał, G.: Wide crossover in the 3D Ashkin-Teller model. *Physica A* **513**, 104–111 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.physa.2018.08.166>

18. Jeziorek-Knioła, D., Musiał, G., Wojtkowiak, Z.: Arbitrarily weak first order phase transitions in the 3D standard Ashkin-Teller model by MC computer experiments. *Acta Phys. Polon. A* **127**, 327 (2015). <https://doi.org/10.12693/APhysPolA.127.327>
19. Jeziorek-Knioła, D., Musiał, G., Dębski, L., Rogiers, J., Dylak, S.: On non-Ising phase transitions in the 3D standard Ashkin-Teller model. *Acta Phys. Polon. A* (2012). <https://doi.org/10.12693/APhysPolA.121.1105>
20. Szukowski, G., Kamieniarz, G., Musiał, G.: Verification of Ising phase transitions in the three-dimensional Ashkin-Teller model using Monte Carlo simulations. *Phys. Rev. E* **77**(3), 031124 (2008). <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.77.031124>
21. Musiał, G.: Monte Carlo analysis of the tricritical behavior in a three-dimensional system with a multicomponent order parameter: the Ashkin-Teller model. *Phys. Rev. B* **69**(2), 024407 (2004). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.024407>
22. Arnold, P., Zhang, Y.: Monte Carlo study of very weakly first-order transitions in the three-dimensional Ashkin-Teller model. *Nucl. Phys. B* **501**(3), 803–837 (1997). [https://doi.org/10.1016/S0550-3213\(97\)00405-7](https://doi.org/10.1016/S0550-3213(97)00405-7)
23. Benmansour, A., Bekhechi, S., Brahmi, B.E.N., Rachadi, A., Hamid Ez-Zahraouy, H.: Multi-layer transition and the magnetic properties of a spin-1/2 Ashkin Teller model with RKKY interaction: a Monte Carlo study. *Phys. Lett. A* **398**, 127289 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2021.127289>
24. Santos, J.P., Nascimento, G.B.B., Resende, K.L.A., Francisco, R.M.: Phase diagrams and magnetization curves of the mixed Ashkin-Teller model including metastable and unstable states. *Eur. Phys. J. B* **94**(7), 1–8 (2021). <https://doi.org/10.1140/epjb/s10051-021-00143-6>
25. Benmansour, A., Bekhechi, S., Brahmi, B.E.N., Moussa, N., Hamid Ez-Zahraouy, H.: Magnetic properties and phase diagrams of the spin-1 Ashkin-Teller model ferromagnetic thin films in the presence of a crystal field. *Chin. J. Phys.* **74**, 82–95 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.cjph.2021.08.025>
26. Dani, I., Tahiri, N., Ez-Zahraouy, H., Benyoussef, A.: Phase diagrams of 2D Ashkin-Teller model within the effect of crystal field and quantum transverse field. *Physica A* **492**, 2310–2315 (2018). <https://doi.org/10.1016/j.physa.2017.11.149>
27. Bahmad, L., Benyoussef, A., Ez-Zahraouy, H.: Anisotropic Ashkin-Teller model in a transverse field. *Phys. Status Solidi B* **226**(2), 403–411 (2001). [https://doi.org/10.1002/1521-3951\(200108\)226:2](https://doi.org/10.1002/1521-3951(200108)226:2)
28. Benmansour, A., Bekhechi, S., Brahmi, B.E.N., Moussa, N.: Monte Carlo study of thin magnetic Ashkin Teller films at the special point. *J. Magn. Magn. Mater.* **511**, 166944 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2020.166944>
29. Ditzian, R.V., Banavar, J.R., Grest, G.S., Kadanoff, L.P.: Phase diagram for the Ashkin-Teller model in three dimensions. *Phys. Rev. B* **22**(5), 2542 (1980). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.22.2542>
30. Musiał, G.: A Monte Carlo study of the mixed phase region in the 3D Ashkin-Teller model. *Phys. Status Solidi B* **236**(2), 486–489 (2003). <https://doi.org/10.1002/pssb.200301710>
31. Musiał, G., Rogiers, J.: On the possibility of non-universal behavior in the 3D Ashkin-Teller model. *Phys. Status Solidi B* **243**(1), 335–338 (2006). <https://doi.org/10.1002/pssb.200562438>
32. Musiał, G., Dębski, L., Kamieniarz, G.: Monte Carlo simulations of Ising-like phase transitions in the three-dimensional Ashkin-Teller model. *Phys. Rev. B* **66**(1), 012407 (2002). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.012407>
33. Fan, C., Wu, F.Y.: General lattice model of phase transitions. *Phys. Rev. B* **2**(3), 723 (1970). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.2.723>
34. Giuliani, A., Mastropietro, V.: Anomalous Universality in the anisotropic Ashkin-Teller model. *Commun. Math. Phys.* **256**(3), 681–735 (2005). <https://doi.org/10.1007/s00220-004-1224-2>
35. Wojtkowiak, Z., Musiał, G.: The Monte Carlo computer experiment to study the order and phase transitions in the mixed phase region based on the example of the 3D Ashkin-Teller model. *Comput. Methods Sci. Technol.* **27**(3), 129–136 (2021). <https://doi.org/10.12921/cmst.2021.0000019>
36. Wojtkowiak, Z., Musiał, G.: Cluster Monte Carlo method for the 3D Ashkin-Teller model. *J. Magn. Magn. Mater.* **500**, 166365 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2019.166365>
37. Jeziorek-Knioła, D., Wojtkowiak, Z., Musiał, G.: Computation of latent heat in the system of multi-component order parameter: 3D Ashkin-Teller model. *Comput. Methods Sci. Technol.* **25**(1), 547–548 (2019). <https://doi.org/10.12921/cmst.2018.0000053>
38. Wolff, U.: Collective Monte Carlo updating for spin systems. *Phys. Rev. Lett.* **62**(4), 362 (1989). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.62.361>
39. Musiał, G., Dębski, L.: Monte Carlo method with parallel computation of phase transitions in the three-dimensional Ashkin-Teller model. *Lect. Notes in Comp. Sci.* (2002). https://doi.org/10.1007/3-540-48086-2_59

40. Kamieniarz, G., Dekeyser, R., Musiał, G., Dębski, L., Bieliński, M.: Modified effective-field approach to low-dimensional spin-1/2 systems. *Phys. Rev. E* **56**(1), 144 (1997). <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.56.144>
41. Salas, J., Sokal, A.D.: Dynamic critical behavior of a Swendsen-Wang-Type algorithm for the Ashkin-Teller model. *J. Stat. Phys.* **85**(3), 297–361 (1996). <https://doi.org/10.1007/BF02174209>
42. Wiseman, S., Domany, E.: Critical behavior of the random-bond Ashkin-Teller model: a Monte Carlo study. *Phys. Rev. E* **51**(4), 3074 (1995). <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.51.3074>
43. Binder, K., Landau, D.P.: Finite-size scaling at first-order phase transitions. *Phys. Rev. B* **30**(3), 1477 (1984). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.30.1477>
44. Challa, M.S.S., Landau, D.P., Binder, K.: Finite-size effects at temperature-driven first-order transitions. *Phys. Rev. B* **34**(3), 1841 (1986). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.34.1841>
45. Lee, J., Kosterlitz, J.M.: Finite-size scaling and Monte Carlo simulations of first-order phase transitions. *Phys. Rev. B* **43**(4), 3265 (1991). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.43.3265>
46. Binder, K.: Applications of Monte Carlo methods to statistical physics. *Rep. Prog. Phys.* **60**(5), 487 (1997). <https://doi.org/10.1088/0034-4885/60/5/001>
47. Borgs, C., Kotecky, R., Miracle-Sole, S.: Finite-size scaling for Potts models. *J. Stat. Phys.* **62**(3), 529–551 (1991). <https://doi.org/10.1007/BF01017971>
48. Jeziorek-Knioła, D., Wojtkowiak, Z., Musiał, G.: Computation of Latent Heat based on the Energy Distribution Histogram in the 3D Ashkin-Teller Model. *Acta Phys. Polon. A* **133**(3), 435–437 (2018). <https://doi.org/10.12693/APhysPolA.133.435>
49. Billoire, A., Neuhaus, T., Berg, B.A.: A determination of interface free energies. *Nucl. Phys. B* **413**(3), 795–812 (1994). [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(94\)90013-2](https://doi.org/10.1016/0550-3213(94)90013-2)

Publisher's Note Springer Nature remains neutral with regard to jurisdictional claims in published maps and institutional affiliations.

Oświadczenia współautora prac

prof. UAM dr hab. Grzegorz Musiał
Zakład Fizyki Materiałów Funkcjonalnych
Wydział Fizyki UAM
ul. Uniwersytetu Poznańskiego 2, 61-614 Poznań

Oświadczenie współautora

Oświadczam, że w pracy:

Zbigniew Wojtkowiak, Grzegorz Musiał (2020).
Cluster Monte Carlo method for the 3D Ashkin–Teller model.
Journal of Magnetism and Magnetic Materials 500, 166365.
DOI: doi.org/10.1016/j.jmmm.2019.166365
która została włączona do rozprawy doktorskiej mgr. Zbigniewa Wojtkowiaka
oraz której jestem współautorem przyczyniłem się do:

nadzorowałem wszystkie wykonywane prace,
uczestniczyłem w dyskusji uzyskanych wyników,
pomagałem w zredagowaniu wysłanej i ostatecznej wersji pracy.

Oświadczam, że w pracy:

Zbigniew Wojtkowiak, Grzegorz Musiał (2019).
Wide crossover in the 3D Ashkin–Teller model.
Physica A: Statistical Mechanics and its Applications 513, 104.
DOI: doi.org/10.1016/j.physa.2018.08.166
która została włączona do rozprawy doktorskiej mgr. Zbigniewa Wojtkowiaka
oraz której jestem współautorem przyczyniłem się do:

nadzorowałem wszystkie wykonywane prace,
uczestniczyłem w dyskusji uzyskanych wyników,
pomagałem w zredagowaniu wysłanej i ostatecznej wersji pracy.

Oświadczam, że w pracy:

Zbigniew Wojtkowiak, Grzegorz Musiał (2021).
The Monte Carlo Computer Experiment to Study the Order and Phase Transitions in the Mixed Phase Region Based on the Example of the 3D Ashkin-Teller Model.
Computational Methods in Science and Technology 7(3), 129.
DOI: doi.org/10.12921/cmst.2021.0000019

która została włączona do rozprawy doktorskiej mgr. Zbigniewa Wojtkowiaka
oraz której jestem współautorem przyczyniłem się do:

nadzorowałem wszystkie wykonywane prace,
uczestniczyłem w dyskusji uzyskanych wyników,
pomagałem w zredagowaniu wysłanej i ostatecznej wersji pracy.

Oświadczam, że w pracy:

Zbigniew Wojtkowiak, Grzegorz Musiał (2022).
Experiment The Behavior of the Three-Dimensional Askin–Teller Model at the Mixed Phase Region by a New Monte Carlo Approach,
Journal of Statistical Physics 189, 3.
DOI:doi.org/10.1007/s10955-022-02964-w

która została włączona do rozprawy doktorskiej mgr. Zbigniewa Wojtkowiaka
oraz której jestem współautorem przyczyniłem się do:

nadzorowałem wszystkie wykonywane prace,
uczestniczyłem w dyskusji uzyskanych wyników,
pomagałem w zredagowaniu wysłanej i ostatecznej wersji pracy.



Poznań, 15.01.2023