

# Fenòmens col·lectius i transicions de fase

## Pràctica 1

Programació, generador de  
nombres pseudo-aleatoris i reticle  
de spins.

# Objectius

- Recordar:

  - Sistema operatiu (windows o Linux),

  - Editor (emacs, gedit, geany,. Notepad++ ...)

  - Llenguatge FORTRAN

  - Generadors de nombres pseudo-aleatoris

- Fer tres programes:

  - P1-exercici-1.f : genera nombres a l'atzar uniformes reals i discrets amb `mt19937`

  - P1-exercici-2.f: genera una matriu d'espins a l'atzar  $L \times L$  ( $L=96$ )

  - P1-exercici-3.f: genera una matriu d'espins a l'atzar i mesura la imantació

- Exercici preparatori P2: mesura de l'Energia

# Generadors de nombres pseudo-aleatoris

Usualment generen nombres pseudo-aleatoris  $U(0,1)$ , és a dir uniformement distribuïts entre 0 i 1. (Estrictament son sempre discrets i correlacionats)

Les simulacions MC consumeixen molts nombres aleatoris. Cal que tinguin una "qualitat" per sobre els generadors habituals (RAN, RAND, etc..).

Cal que el generador ens doni nombres molt descorrelacionats, que sigui molt ràpid, amb un període llarg i amb la màxima precisió (real\*8). La majoria de generadors basats en mètodes congruencials lineals senzills, no serveixen.

# Generador mt19937 (1)

Usarem el generador `mt19937` que genera un nombre uniforme cada vegada que se'l crida. Es basa en una tècnica anomenada Mersenne Twister de M. Matsumoto i T. Nishimura (1997).

<http://www.math.sci.hiroshima-u.ac.jp/~m-mat/MT/VERSIONS/FORTRAN/mt19937ar.f>

Es una mica antic, però és portable (independent de la màquina i del sistema operatiu), ràpid i de qualitat acceptable. Consisteix en un codi en f77 que s'anomena `mt19937ar.f` que cal baixar del campus.

Podem simplement copiar-lo sempre sota el codi que vulguem desenvolupar i compilar normalment amb `gfortran`, o compilar-lo primer creant `mt19937ar.o` i després recordar de linkar aquest objecte cada vegada.

# Generador mt19937 (2)

Al principi del programa és necessari inicialitzar els nombres aleatoris amb una llavor `integer*4`, fent servir `init_genrand(SEED)` i després ja es poden cridar els nombres un per un amb `genrand_real2()`

```
implicit none
..
integer SEED
real*8 x
real*8 genrand_real2
...
SEED= 123456
call init_genrand(SEED)

...
x = genrand_real2()
```



# P1-exercici-1.f (1)

Prepareu un programa que es digui `P1-exercici-1.f` que generi `NRAND=40000` nombres uniformes a partir d'una llavor `SEED` i els tregui per pantalla. Feu que el programa calculi també la mitjana i la desviació típica dels nombres generats. Compileu i correu el programa.

Recordeu les instruccions (si teniu el codi `mt19937ar.f` afegit a la part de sota del vostre codi) :

Per compilar:

```
gfortran -O3 P1-exercici-1.f -o P1-exercici-1.exe
```

Això crea l'executable `P1-exercici-1.exe` . Per executar feu:

```
./P1-exercici-1.exe
```

Canvieu la llavor, torneu a compilar i a executar per comprovar que dona una seqüència diferent

# P1-exercici-1.f (2)

Instruccions (si teniu el codi `mt19937ar.f` en un arxiu a part)

Primer per compilar el `mt19937ar.f` :

```
gfortran -c mt19937ar.f
```

Això crea un arxiu "objecte" `mt19937ar.o` que ja no cal que torneu a compilar més

Aleshores per compilar el programa `P1-exercici-1.f` feu:

```
gfortran -O3 mt19937ar.o P1-exercici-1.f -o P1-exercici-1.exe
```

Així li dieu al compilador que afegixi l'objecte `mt19937ar.o` en el moment de linkar.

# P1-exercici-1.f (3)

El programa quedarà  
aproximadament  
així:

A la part de sota hi  
haureu de tenir el  
codi `mt19937ar.f` ,  
o tenir l'objecte  
`mt19937ar.o` en el  
mateix directori

```
program p1
implicit none
integer*4 SEED, iRAND, NRAND
real*8 x, sum, sum2, sigma, genrand_real2
SEED=541766
NRAND=40000
open (unit=11,file='p1-ex1.dat', status = 'unknown')
call init_genrand(SEED)
sum=0.0d0
sum2=0.0d0
do iRAND=1,NRAND
  x=genrand_real2()
  write(11,*) iRAND,x
  write(*,*) iRAND,x
  sum = sum + x
  sum2=sum2+x*x
Enddo
close(11)
sum = sum/real(NRAND)
sum2=sum2/real(NRAND)
sigma = dsqrt(sum2-sum*sum)
write(*,*) sum, sigma
stop
end
```



## P1-exercici-1.f

Exemple sortida per pantalla:

```
39968 0.29927634052000940
39969 8.4582888754084706E-002
39970 0.72298080427572131
39971 0.97612574999220669
39972 0.31926823756657541
39973 0.96064286935143173
39974 0.99496153206564486
39975 0.35769390873610973
39976 0.56014761398546398
39977 6.0718942200765014E-002
39978 0.77447260566987097
39979 9.4961621100082994E-002
39980 0.69634983758442104
39981 0.74853946384973824
39982 0.84966650628484786
39983 0.11687804036773741
39984 7.6516683911904693E-002
39985 0.52156925480812788
39986 0.91755404556170106
39987 0.76605715439654887
39988 0.55308032850734890
39989 0.27363070799037814
39990 0.98618936026468873
39991 4.2920378735288978E-002
39992 0.11325025348924100
39993 0.18097336939536035
39994 0.12224724935367703
39995 0.91789229493588209
39996 0.74289377732202411
39997 0.66207375936210155
39998 0.35844469862058759
39999 0.48815323458984494
40000 0.47462705569341779
mean = 0.49849988834222314
sigm = 0.28853543051795189
```

# P1-exercici-1.f (4)

L'algoritme de Metropolis requereix seleccionar elements de la retícula aleatòriament. Primer verifiquem que som capaços de generar nombres discrets  $J$  uniformes en  $(1,L)$ , anant especialment en compte amb els extrems  $1, L$ .

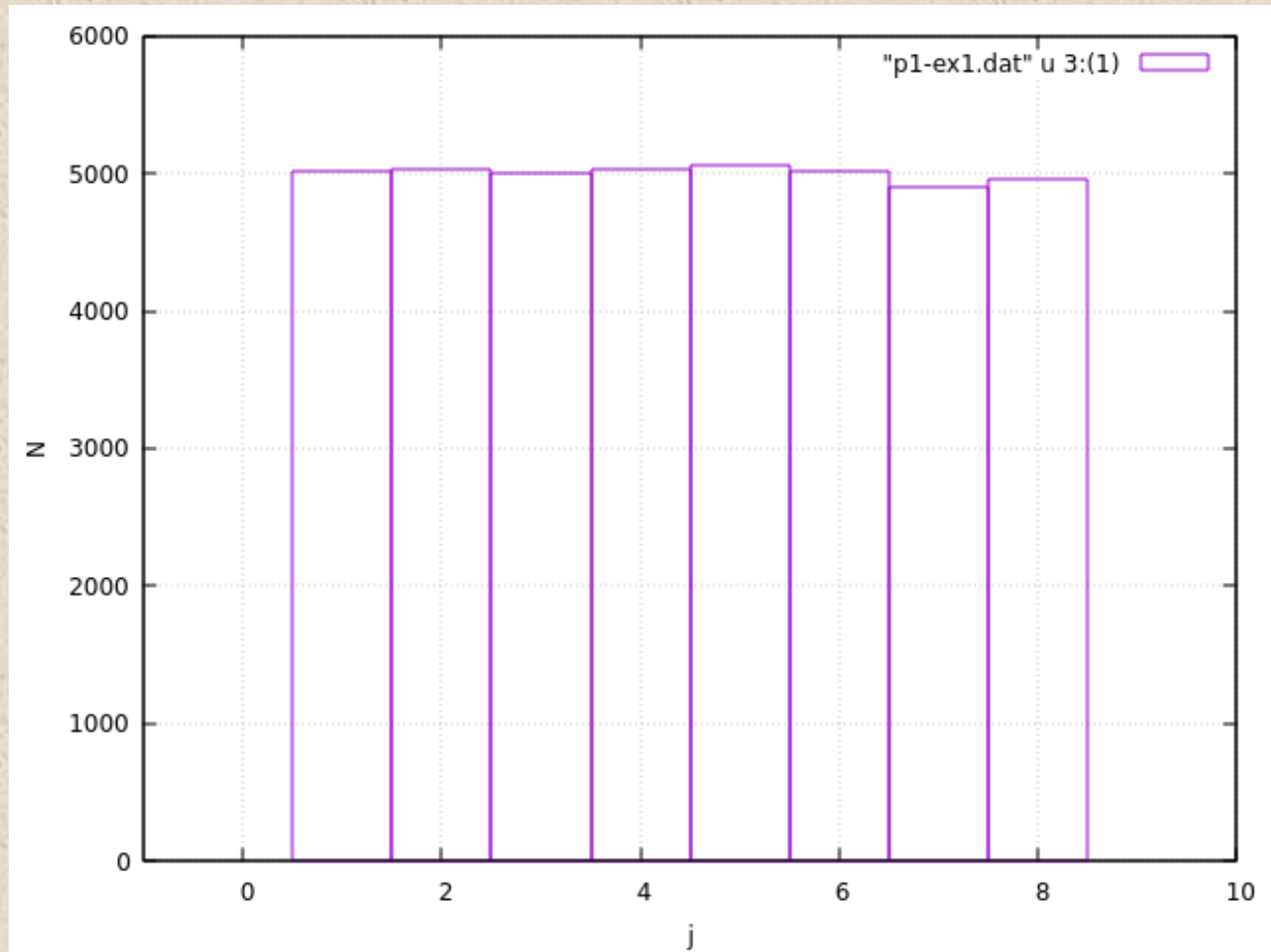
- Modifica el programa P1-exercici-1.f perquè assigni un valor enter entre 1 i 8 a cadascun dels valors.

```
L=8
do iRAND=1,NRAND
  x=genrand_real2()
  jLATTICE =floor(x*L)+1 !valor enter entre 1 i L (el recorregut del
  genrand_real2() es tancat en 0 i obert en 1)
  write(11,*) iRAND,x,jLATTICE
  sum = sum + x
  sum2=sum2+x*x
Enddo
```

- Representa l'histograma de valors emprant la funció smooth de gnuplot. Assegura't que cada caixa tingui al voltant de 5000 valors

```
set term png
set out "ex1.png"
set boxwidth 1
set xrange [-1:10]
plot "p1-ex1.dat" u 3:(1) smooth freq w boxes
```

# Exemple resultats



# Generar una matriu d'espins a l'atzar (1)

Crearem una matriu  $S$  que contindrà els valors de la configuració d'espins. En principi la recorrerem amb dos índex  $I$  i  $J$  que vagin cadascun de 1 a  $L$ , on  $L$  indica la mida de la xarxa quadrada ( $N=L \times L$ )

Anem a dimensionar el programa pensant que la mida serà ajustable. Arribarem com a màxim a  $L=96$ , encara que usualment treballarem amb  $L$ 's inferiors

```
INTEGER*4  L
PARAMETER (L=96)
INTEGER*2  S(1:L,1:L)
```

Per inicialitzar la xarxa, volem transformar els nombres uniformes  $U(0,1)$  i obtenir un conjunt de valors 1 o -1 a l'atzar (50% probabilitat) per tal d'omplir la matriu  $S(1:L,1:L)$ .

Per fer-ho usarem els nombres uniformes que generarem amb `genrand_real2()`

Si `genrand_real2()` < 0.5 assignarem  $S=+1$

Si `genrand_real2()`  $\geq 0.5$  assignarem  $S=-1$



# Generar una matriu d'espins a l'atzar(2)

El programa quedarà alguna cosa així

```
implicit none
integer*4 SEED, i, j, L
PARAMETER (L=96)
integer*2 S(1:L,1:L)
real*8 genrand_real2
SEED=23456
call init_genrand(SEED)
do i=1,L
  do j=1,L
    if (genrand_real2().lt.0.5D0) then
      S(i,j)=1
    else
      S(i,j)=-1
    endif
  enddo
enddo
```



# P1-exercici-2.f

Prepareu un programa que es digui `P1-exercici-2.f`

El programa ha de generar una matriu de mida  $N=L \times L=96 \times 96$  amb spins a l'atzar i escriure-la en un arxiu de sortida

Creeu un arxiu `"P1-configuration.conf"` i escriviu tots els valors  $S(I, J)$  de la columna  $J$  per a cada fila  $I$ , emprant la instrucció `write(unit, *) S(I, :)`.

Creeu un script de gnuplot que dibuixi per la pantalla i en un arxiu `.jpeg` la configuració que hi ha guardada a l'arxiu `"P1-configuration.conf"`

Utilitzeu la instrucció:

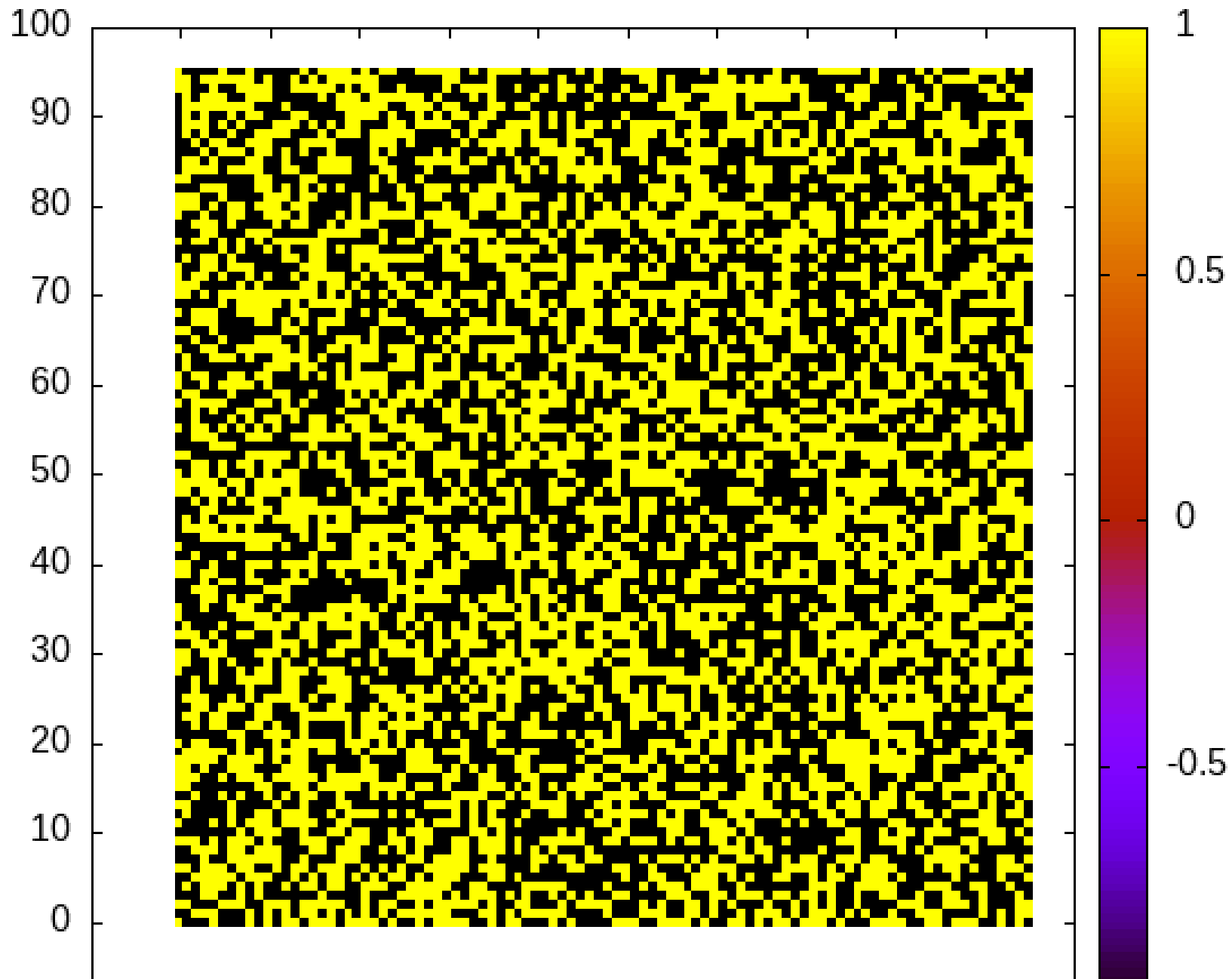
```
plot "P1-configuration.conf" matrix w image not
```

# Generar una matriu d'espins a l'atzar(3)

El programa quedarà alguna cosa així

```
implicit none
integer*4 SEED, i, j, L
PARAMETER (L=96)
integer*2 S(1:L,1:L)
real*8 genrand_real2
SEED=23456
open (12, file="P1-configuration.conf")
call init_genrand(SEED)
do i=1,L
  do j=1,L
    if (genrand_real2().lt.0.5D0) then
      S(i,j)=1
    else
      S(i,j)=-1
    endif
  enddo
  write(12,*) S(I,:)
enddo
```

# Exemple resultats



# Mesurar la imantació

Entre d'altres mesures que haurem de fer, caldrà mesurar en algun moment de la simulació, la imantació instantània de la matriu d'espins  $S(I, J)$ .

Per a fer-ho construirem una FUNCTION que anomenarem MAGNE, a la qual passarem la matriu  $S$  i la mida  $L$  i ens retornarà la imantació.

```
real*8 FUNCTION MAGNE(S,L)
```

Aquesta FUNCTION podria ser perfectament un INTEGER, però donat que el valor de la magnetització el mesurarem moltes vegades i el promitjarem (dividint per un nombre gran), i també el dividirem per la mida del sistema per obtenir la imantació per partícula, es convenient definir ja la funció MAGNE com un REAL\*8

# Exemple MAGNE

```
REAL*8 FUNCTION MAGNE(S,L)
INTEGER*2 S(1:L,1:L)
INTEGER*4 I,J,L
REAL*8 MAG
MAG=0.0D0
DO I =1,L
    DO J=1,L
        MAG=MAG+S(i,j)
    ENDDO
ENDDO
MAGNE=MAG
RETURN
END
```

Aquesta function la crideu al programa principal, per exemple, fent:

```
MAG=MAGNE (S,L)
```

on MAG és una variable REAL\*8 que heu definit abans



# P1-exercici-3.f

Prepareu un programa que es digui `P1-exercici-3.f`, afegint la funció `MAGNE` al programa anterior.

Un cop generada la matriu inicial `S` amb spins a l'atzar, que el programa principal cridi la funció `MAGNE` i ens retorni per pantalla la imantació de la matriu generada a l'atzar.

Hauria de ser un valor petit comparat amb  $N=L \times L$

# Unitats reduïdes

$$H(S_1, S_2, \dots, S_N) = -J \sum_{ij} S_i S_j - B \sum_i S_i$$

Definim:  $H^* = H/J$ ,  $B^* = B/J$  de forma que:

$$H^*(S_1, S_2, \dots, S_N) = - \sum_{ij} S_i S_j - B^* \sum_i S_i$$

La probabilitat d'acceptació que apareix en l'algorisme serà:

$$e^{-\frac{DH}{k_B T}} = e^{-\frac{DH}{k_B T} \frac{J}{J}} = e^{-\frac{DH^*}{T^*}}$$

- Temperatura reduïda  $T^* = k_B T / J$

# Exercici de preparació a P2

Prepareu una subrutina `ENERG` que mesuri l'energia de la configuració d'espins

Recordeu que l'energia és

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j}^{n.n.} S_i S_j$$

Quin problema trobeu? El resoldrem a P2.