

Aprofundiment en les transicions de fase d'un sistema d'Ising 2D mitjançant simulacions de Montecarlo

Marc Parcerisa i Conesa

Gener 2023



Abstract

S'estudia el comportament del sistema d'Ising 2d finit, amb longitud del costat L , així com la seva evolució "temporal", a mida que l'algorisme de Metròpolis avança. S'observa l'evolució de les principals variables termodinàmiques del sistema variant la temperatura, així com la longitud característica d'aquest, i es demostra que totes elles concorden amb l'esperat. S'extrapolà la temperatura crítica en què apareix la transició de fase per al sistema infinit i s'hi troba un valor completament compatible amb el de la bibliografia ($T_c^{exp} = 2.27 \pm 0.01$ i $T_c^{teo} = 2.269$). A més, es calculen els exponents crítics de la simulació i la majoria d'ells resulten compatibles amb els valors de la teoria, tret d' α (veure la taula 1 a les conclusions). I, per acabar, es comprova la teoria del *Finite Size Scaling*, tot reescalant algunes de les gràfiques més representatives. Es conclou que l'algorisme de Metròpolis és un bon model de simulació de Montecarlo i és capaç de donar prediccions raonables pel sistema estudiat.

Paraules d'interès — Model d'Ising; Metròpolis; Montecarlo; Transició de Fase; Exponents Crítics; *Finite Size Scaling*

I. INTRODUCCIÓ

QUAN es fracciona un imant per la meitat, com és mundialment conegut, les dues parts resultants conserven la mateixa orientació magnètica que tenien quan eren junts. Aquest fenomen que a un infant podria semblar simplement interessant i dur a una estona de jocs, un físic es veu forçat a dur-lo a l'extrem: Quant es podria fraccionar? Quina és la unitat més petita que manté la imantació? Des de fa una eternitat que els imants (i la majoria de materials amb interacció magnètica) són estudiats pels físics com a sistemes de moltes partícules, cadascuna amb una unitat bàsica d'imantació, que ara associem a l'espí.

Quan se suposa que aquestes partícules poden presentar dos valors possibles d'espí, com per exemple, els electrons de les últimes capes d'un àtom, es poden postular models estadístics amb (alguns) solució que descriguin el sistema macroscòpic. Aquests models soLEN presentar interaccions dels àtoms amb els seus veïns, que normalment han de ser simplificades per a poder-se resoldre analíticament. Un d'aquests models és el model d'Ising, que proposa modelar-les restringint-se a interaccions per parelles, i només amb els primers veïns de cada partícula [1]:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - h \sum_{i=1}^N s_i \xrightarrow{h=0} H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j$$

On h és un terme degut a camps magnètics externs, que no considerarem en aquesta memòria. J és, doncs, el paràmetre d'acoblament, que prendrem positiu (per tal que el sistema presenti un comportament ferromagnètic [2], enllot d'antiferromagnètic). Noti's que en aquest sistema, la magnetització mitjana serà un bon paràmetre d'ordre (doncs sabem que a temperatures altes tendirà a zero, mentre que a temperatures baixes prenrà un valor proper a $\pm s = \pm 1$)

$$m = \frac{M}{N} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i$$

En les simulacions realitzades a les pràctiques s'ha estudiat un sistema de dues dimensions de mida finita (tot i que s'hi han aplicat condicions de periodicitat), representat en una matriu de dimensions $L \times L$, i d'espins estrictament uniaxials. Es veurà doncs, que apareixerà una transició de fase contínua a prop de certa temperatura que separarà un comportament fortament ferromagnètic d'un de paramagnètic. A més, caldrà estudiar-ne la dependència de la mida del sistema, doncs les correlacions a llargues distàncies es veuran fortament afectades per la seva mida finita.

Aquest document s'estructura de la següent manera: La secció II dona una breu explicació de l'algorísmia usada per a realitzar les simulacions necessàries, mentre que a la secció III s'exposen, també breument, les múltiples optimitzacions que s'han calgut implementar, doncs els sistemes més grans hagueren requerit d'un enorme temps de computació sense elles. Seguint amb l'algorísmia, la secció IV mostra la convergència dels mètodes usats per a diferents temperatures

i llavors inicials dels nombres aleatoris, així com alguns comportaments curiosos que emergiren durant algunes de les repeticions. Començant amb la termodinàmica, a la secció V s'estudia en detall l'evolució de les magnituds principals del sistema — l'energia, la magnetització, la capacitat calorífica i la susceptibilitat magnètica — en variar-ne la temperatura. Posteriorment, a la secció VI se'n parla de com varien els resultats en canviar la mida del sistema usat en les computacions, i, tot extrapolant-ho a un sistema de mida infinita, a la secció VII, s'avalua quina seria la temperatura crítica del material. Les seccions VIII i IX presenten un càlcul experimental dels exponents crítics pel sistema estudiat, i una breu comparació dels gràfics del paràmetre d'ordre i susceptibilitat amb els eixos adequadament reescalats per a comprovar la teoria de *Finite Size Scaling*, respectivament. Finalment, la secció X culmina amb les conclusions dels experiments.

II. ALGORÍSMIA

L'algoritme de Metròpolis és el mètode de Montecarlo més usat per a calcular estimacions en el model d'Ising [3]. Consisteix a: partint d'un estat de configuració incial μ , s'escull aleatoriament un nou estat ν , segons una distribució de probabilitat $g(\mu, \nu)$. Tot seguit es decideix aleatoriament quin dels dos estats hauria de prevaldre, segons una altra "funció d'acceptació" $A(\mu, \nu)$, i només en cas que aquesta última doni favorable, s'accepta el canvi i es repeteix el procediment partint de l'estat μ . Per al model d'Ising, se sol usar una funció $g(\mu, \nu)$ que consisteix en escollir un sol espí de la matriu i canviar-lo de signe, i una funció de distribució de l'estil $A(\mu, \nu) = \exp -\beta \Delta E$ pel cas en que $\Delta E > 0$, i $A(\mu, \nu) = 1$ del contrari (essent ΔE l'increment d'energia del sistema rere el canvi de l'espí) [3].

Donat que aquest algorisme es pot interpretar com a un sistema que va fent salts entre estats diferents, la probabilitat dels quals només depèn de l'estat actual μ , se sol dir que aquest model es pot comprendre com a una cadena de *Markov*, que és un model estocàstic per a descriure seqüències d'esdeveniments possibles que compleixen la condició mencionada [4] [5] [6].

Cal tenir en compte d'aquest model que, degut a que només es bescanvia un sol espí de la matriu a cada iteració de Metròpolis, les configuracions successives presenten una enorme correlació (tot i que direm que només hem complert una passa de l'algorisme cada L^2 intents de gir d'un espí). Per això, en calcular les mitjanes es tindrà la precaució d'obviar algunes de les configuracions que puguin presentar molta correlació (saltant de 20 en 20 passos i repetint els càlculs amb 200 condicions inicials diferents).

III. OPTIMITZACIONS

Durant la realització d'aquest estudi es realitzaren exactament 60.000 simulacions diferents, cadascuna d'elles amb una

certa quantitat de passos depenen dels seus paràmetres. Es poden desglossar de la següent manera:

- 1) Se simularen sistemes amb $L = 12, 24, 36, 48, 60, 72$
- 2) Per a cadascun dels sistemes, es calcularen 50 temperatures diferents (generades per un script de *Python* amb una distribució no aleatòria aproximadament gaussiana centrada a $T=2.3$, on hauria d'aparèixer el punt crític, com es veurà posteriorment)
- 3) Per a cadascuna de les temperatures, s'escollien 200 llavors diferents per al generador de nombres aleatoris i es repetiren tots els càlculs
- 4) Amb cada llavor, es generà una matriu aleatòria d'espins (condició inicial) $[O(L^2)$, negligible] i posteriorment es feren 80000 passes de l'algorisme de Montecarlo.
- 5) Cada passa de Montecarlo consistí en L^2 iteracions de l'algorisme de Metròpolis

Es pot calcular de forma aproximada el temps que hauria de trigar la simulació: Per a una sola "simulació":

$$t \propto \#Temp \cdot \#Llavors \cdot \#Montecarlo \cdot L^2$$

Per al programa d'aquest informe:

$$t \propto 50_T \cdot 200_S \cdot 80,000_{MC} \cdot (12^2 + 24^2 + 36^2 + 48^2 + 60^2 + 72^2)_L$$

Doncs, és obvi que s'hagueren d'implementar algunes optimitzacions:

- 1) Per començar, en canviar l'espí en una posició, ΔE només pot prendre 16 valors diferents, que poden ser precalculats per a no haver de repetir una exponencial a cada pas de la simulació.
- 2) La generació de nombres aleatoris és molt costosa, així que enllloc de generar dos nombres diferents (entre 0 i L) per a escollir un punt qualsevol a la matriu d'espins, es pot generar un entre 0 i L^2 i d'ell extreure'n dos nombres independents utilitzant una divisió entera entre L i el seu residu, usats com a coordenades x i y .
- 3) I el més important, donat que totes i cadascuna de les simulacions són independents entre elles, es poden paral·lelitzar completament, permetent aprofitar tots els nuclis de càlcul de l'ordinador.

Amb totes aquestes optimitzacions, el programa final trigà aproximadament 29 hores i mitja en executar més de 10^{13} operacions, en un dispositiu Intel i7 d'onzena generació @3.3GHz amb 8 nuclis de processos lògics, i va generar aproximadament 196GB de dades¹.

IV. EVOLUCIÓ TEMPORAL

Anomenem "evolució temporal" als canvis que experimenta el sistema a mida que es realitzen més i més passos de Montecarlo successius. Es pot demostrar que la cadena de

¹Per a evitar haver de repetir càlculs, primer es van generar totes les dades de les simulacions per a posteriorment ser tractades.

Markov corresponent a l'algorisme proposat a l'apartat II presentarà una certa convergència en un valor de l'energia concret per a tots els sistemes, que només dependrà de la temperatura. A més, presentarà també una convergència del paràmetre d'ordre (magnetització absoluta) en un valor entre 0 i 1, a mida que es disminueix la temperatura. Atenció, d'ara endavant s'usaran les variables reduïdes $H^* = H/J$ i $T^* = K_B T/J$.

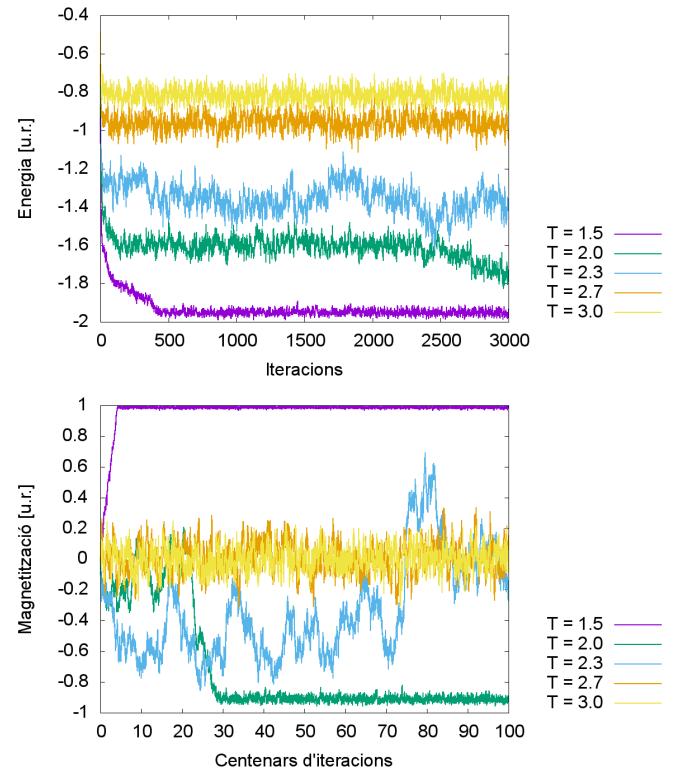


Fig. 1. Evolució "temporal" de l'energia i la magnetització per partícula en la simulació de Metròpolis d'un sistema d'Ising magnètic per a diferents temperatures. Es presenta un sistema 2d quadrat d'espins amb $L=48$.

Es pot veure en els anteriors dos gràfics que, per a temperatures prou baixes, l'energia per partícula tendirà a -2, que es correspon amb una alineació paral·lela de totes les partícules del sistema (cada partícula interacciona amb $z = 4$ veïns; sense comptar interaccions repetides, $H \approx -J \cdot 2N \rightarrow H^*/N = -2$), mentre que a mida que s'augmenta la temperatura, també ho fa l'energia, tendint a un sistema completament desordenat (de mitja, hi haurà tantes interaccions paral·leles com antiparal·leles).

Quant a la magnetització, es pot observar clarament com a temperatures baixes, el sistema convergeix molt ràpid a un estat amb magnetització $m = \pm 1$, com caldrà esperar, però a mida que s'augmenta la temperatura i el material supera el punt crític, aquesta fluctua al voltant de $m = 0$.

Es pot notar en aquestes gràfiques un dels esdeveniments més interessants que pot presentar la simulació: Per ambdós gràfics, la temperatura $T = 2.0$ sembla convergir a una energia al voltant de -1.6 i mantenir-s'hi estable durant uns quants milers d'iteracions, fins que sembla que acaba de caure al seu

estat fonamental al voltant de les 2500-3000 iteracions. Això és probablement degut a l'existència d'estats meta-estables en què la cadena de Markov s'hi pot estancar durant una llarga estona, i només pot evitar-se repetint els experiments amb altres llavors pels generadors de nombres aleatoris, un altre motiu pel qual s'han realitzat tots els càlculs amb 200 llavors diferents. A això últim se li pot sumar l'elisió dels primers 8000 resultats a les mitjanes, per tal d'evitar les fluctuacions inicials.

V. EFECTES DE LA TEMPERATURA

Començant amb la termodinàmica del sistema, podem escollir-ne una mida suficientment gran (per exemple $L = 48$) i observar el comportament d'alguns paràmetres d'interès al variar-ne la temperatura. Seran objectiu d'estudi les següents variables: l'energia final del sistema, les seves fluctuacions (variància, que veurem que està estrictament relacionada amb la capacitat calorífica), la magnetització final, així com el valor absolut d'aquesta i les seves fluctuacions, amb les quals en calcularem la susceptibilitat magnètica.

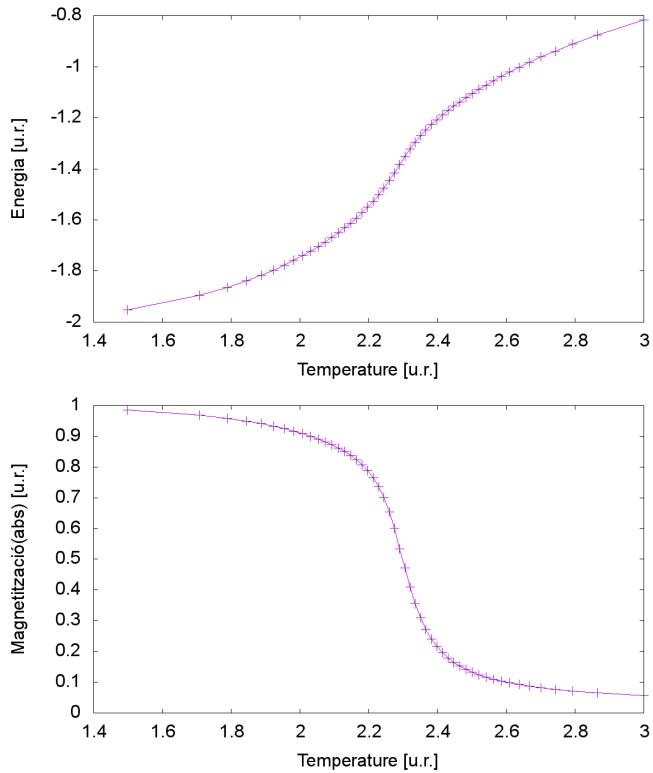


Fig. 2. Evolució de l'energia per partícula (A) i el valor absolut de la magnetització per partícula (paràmetre d'ordre) (B) en un sistema en dues dimensions, quadrat amb $L = 48$, d'Ising simulat amb el mètode de Montecarlo.

Es pot veure a la primera (A) de les dues figures anteriors (figura 2) la tendència que s'havia mencionat anteriorment per a l'energia del sistema: A mida que la temperatura s'apropa

²En aquesta figura i en totes les de l'estudi les barres d'error són massa petites com per a ser apreciables.

al zero, l'energia tendeix a la d'un paramagnet amb tots els espins paral·lels entre ells. Es pot veure també en ella un punt d'inflexió al voltant de $T = 2.3$, cosa que sembla indicar una transició de fase. També l'esperat apareix en el gràfic B de la figura anterior, on la magnetització (en valor absolut) disminueix progressivament a mida que augmenta la temperatura per sobre de la T_c , tendint al zero.

Es pot estudiar els paràmetres de la capacitat calorífica a volum constant i la susceptibilitat magnètica en el sistema de dues formes diferents. Recordem de termodinàmica que aquests dos paràmetres es poden calcular de la següent forma:

$$C_V = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_{V,N} \quad \chi = \left. \frac{\partial M}{\partial H} \right|_{h=0}$$

Però com s'ha estudiat a la teoria de Física Estadística, és també conegut que aquests valors estan estretament relacionats amb les fluctuacions de l'energia i la magnetització respectivament. Per exemple, la capacitat calorífica compleix el següent: Se suposa un sistema amb energia $U = \langle H \rangle$. Derivant respecte el paràmetre β :

$$\langle H \rangle = \frac{\sum H e^{-\beta H}}{\sum e^{-\beta H}} \rightarrow \frac{\partial U}{\partial \beta} = \left(\frac{\sum H e^{-\beta H}}{\sum e^{-\beta H}} \right)^2 - \frac{\sum H^2 e^{-\beta H}}{\sum e^{-\beta H}}$$

On es pot identificar de forma senzilla, canviant les derivades respecte β per derivades respecte T , que [7]:

$$C_V \cdot T^2 = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2$$

Cosa que es pot comprovar a la gràfica de la figura 3:

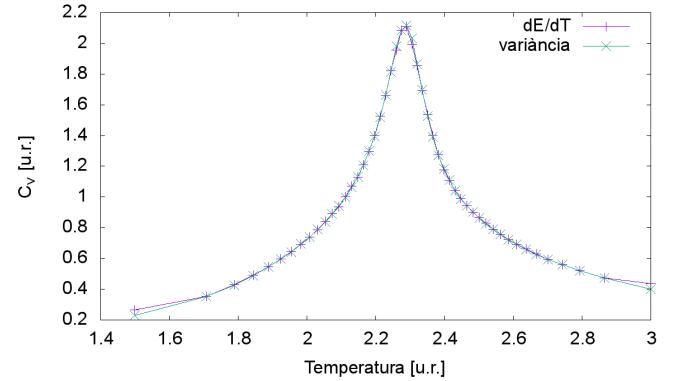


Fig. 3. Capacitat calorífica a volum constant per partícula d'un sistema magnètic d'Ising, de dues dimensions, quadrat, amb $L=48$, resolt amb el mètode de Montecarlo.

També es pot veure clarament en aquesta anterior figura que la capacitat calorífica presenta un pic al voltant de la temperatura crítica.

Quant a la susceptibilitat magnètica, es pot demostrar que també compleix una relació similar [8]:

$$\chi \cdot T = \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2$$

On cal tenir clar que $\langle M \rangle$ fa referència a la mitjana del valor absolut d'aquesta, doncs pot prendre dues orientacions diferents, però equivalents.

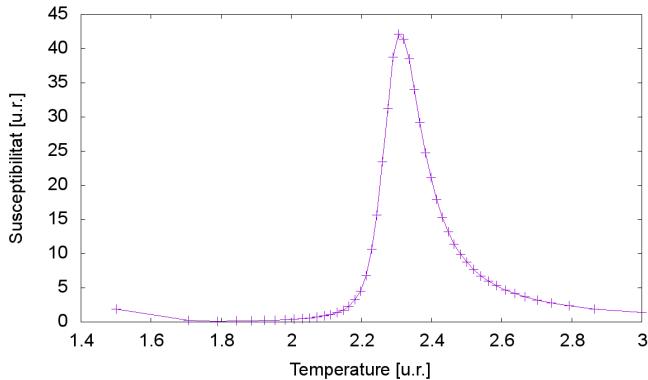


Fig. 4. Susceptibilitat magnètica per partícula d'un sistema d'Ising de dues dimensions, quadrat, amb $L=48$, resolt amb el mètode de Montecarlo.

Com es pot veure a la figura 4, la susceptibilitat per partícula del sistema presenta també un màxim al voltant de la temperatura crítica.

VI. EFECTES DE LA MIDA DEL SISTEMA

Si bé el model usat en aquesta pràctica és una bona representació en què emergeixen comportaments similars als de la realitat, és obvi que es tracta d'un sistema massa petit. De fet, sabem per la teoria que, si repetíssim els experiments amb un nombre de partícules tendint a l'infinít, variables com la capacitat calorífica o la susceptibilitat presentarien una discontinuïtat asymptòtica en el punt crític. No obstant, simular un sistema així seria una mica difícil. Observem, doncs, com afecta als gràfics presentats fins ara el canvi de la mida del sistema, amb l'esperança de trobar una tendència que permeti extrapolar certes dades fins el sistema infinit. Per a fer-ho s'han calculat tots els resultats per a configuracions quadrades de 12, 24, 36, 48, 60 i 72 espins per costat.

Es pot veure a la figura 5 com a mida que s'augmenta la mida del sistema, el pic de la capacitat calorífica i el de la susceptibilitat augmenta en valor i es desplaça lleugerament a l'esquerra. Tot i això, lluny del punt crític ambdues gràfiques es mantenen molt similars. Es pot veure en aquestes també l'efecte de disminuir massa la temperatura en les simulacions de Metròpolis: la longitud de correlació es fa comparable amb L , causant que l'algorisme es torni altament inestable.

A la figura 6 s'hi pot observar com la dependència de la magnetització respecte la temperatura es torna més abrupta com major és el sistema. En el cas del sistema infinit, es pot demostrar que aquesta transició ordre-desordre es tornaria sobtada, presentant un gràfic en forma d'escala [9][10][11].

VII. TEMPERATURA CRÍTICA

Com hem vist fins ara, per a determinar quina és la temperatura crítica s'hauria de simular un sistema de mida infinita. Pel contrari, només és possible determinar temperatures

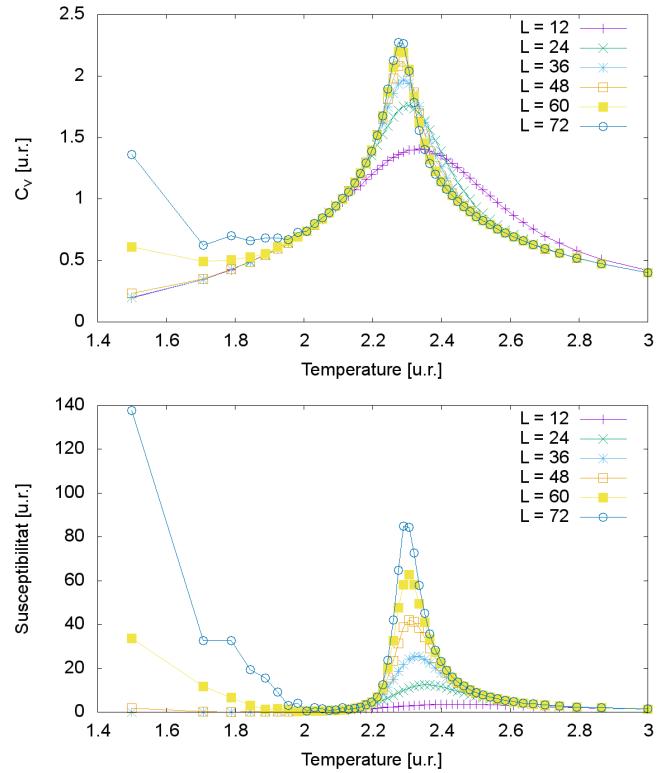


Fig. 5. Evolució de la capacitat calorífica per partícula (A) i de la susceptibilitat magnètica (B) dependent de la temperatura, per a diferents mides d'un sistema magnètic d'Ising en dues dimensions, quadrat.

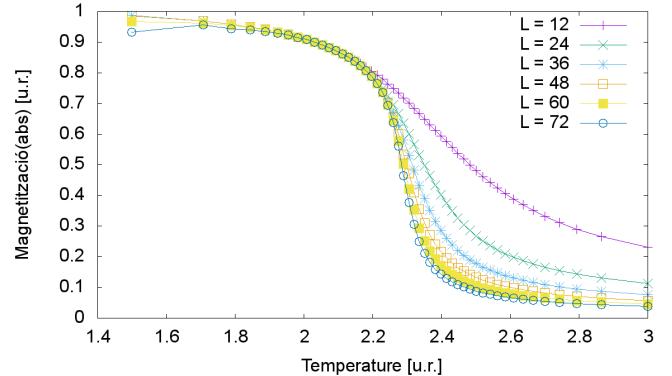


Fig. 6. Dependència de la magnetització d'un sistema d'Ising 2D quadrat amb la mida del costat.

pseudo-crítiques amb les dades que es posseeixen. No obstant, si s'observa l'evolució de la posició del màxim a mida que es varia la mida L (de fet, la seva dependència amb $1/L$), es pot extrapolar quin hauria de ser el seu valor en $L \rightarrow \infty$ (figura 7). Amb una ràpida regressió lineal³[10], es pot trobar que el valor de T_c hauria de ser aproximadament $T_c = 2.27 \pm 0.01$, a partir de l'estudi de l'ordenada d'origen d'ambdues línies.

Aquesta última regressió lineal pot ser justificada d'acord amb l'exponent crític de la longitud de correlació: Suposi's

³Es pot veure a la següent secció que això és justificat pel valor de l'exponent crític ν .

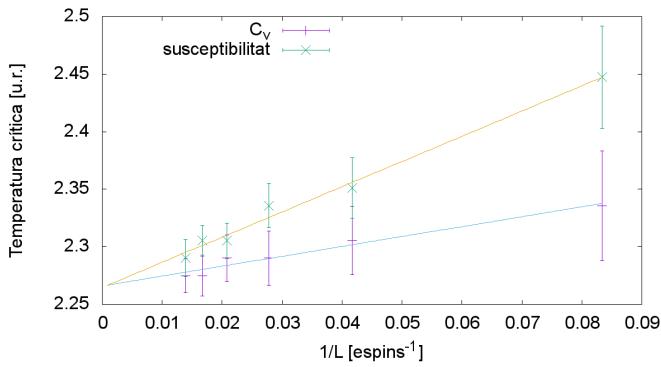


Fig. 7. Regressions lineals de les dependències de la temperatura del màxim de la capacitat calorífica per partícula a volum constant i el de la susceptibilitat magnètica respecte l'invers de la longitud del costat d'un sistema magnètic d'Ising quadrat. Les dues línies de regressió coincideixen molt bé en $1/L = 0$ a la temperatura $T_c = 2.27 \pm 0.01$. Les barres d'error han estat calculades a partir de l'amplada del pic en els gràfics d'on s'han tret.

un experiment sobre un sistema finit en què s'obté una temperatura crítica T_c^* , pel qual se sap que el sistema real presenta una temperatura crítica T_c . La longitud de correlació d'aquest sistema tendirà a l'infinít com més properes siguin aquestes dues temperatures, i ho farà segons un exponent ν :

$$\xi \propto \frac{1}{|T_c^* - T_c|^\nu} \quad (1)$$

Doncs es pot demostrar que un sistema finit recrearà els resultats corresponents a $\xi = L$. Doncs, només cal trobar el valor de l'exponent crític ν per a comprovar la fiabilitat d'una regressió lineal, cosa que es farà en la següent secció.

VIII. EXPONENTS CRÍTICS

Els exponents crítics són cinc (5), i defineixen el comportament analític de les variables termodinàmiques del sistema prop del punt crític.

A. Longitud de correlació — ν

Servirà com a justificació de la regressió lineal de la secció anterior. Recordant l'equació 1:

$$|T_c^* - T_c| \propto L^{\frac{-1}{\nu}} \rightarrow \log(|T_c^* - T_c|) \propto -\frac{1}{\nu} \log(L)$$

En el gràfic següent (figura 8), doncs, s'ha representat l'anterior i se n'ha fet una regressió lineal, el pendent de la qual s'espera que sigui l'invers de ν canviada de signe. S'obtingué el resultat següent:

$$-\frac{1}{\nu} \approx -1.16 \pm 0.14 \text{ Per als càlculs amb el màxim de } C_v$$

i:

$$-\frac{1}{\nu} \approx -1.06 \pm 0.06 \text{ Per als càlculs amb el màxim de } \chi$$

Ambdós resultats són compatibles entre ells, i donen un valor per a μ aproximat de (fent la mitjana entre ells) 0.9 ± 0.1 .

Noti's que el valor esperat per a aquest paràmetre és de $\nu = 1$ [2][12], amb el qual és només marginalment compatible. Això probablement sigui degut al quart punt de la gràfica 8 per a la susceptibilitat, que sembla allunyar-se molt de la regressió. Amb el paràmetre ν aproximadament igual a 1, queda justificada la regressió lineal de la figura 7.

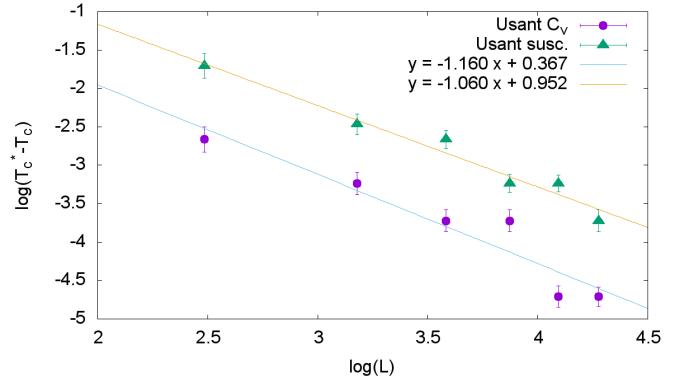


Fig. 8. Dependència potencial de la temperatura crítica trobada en un sistema d'Ising 2d finit de longitud característica L en funció d'aquesta. S'han calculat les dependències de la temperatura trobada com a màxim de la capacitat calorífica, i com a màxim de la susceptibilitat magnètica. S'han representat els resultats de les regressions lineals.

B. Capacitat calorífica — α

Descrivим el comportament de la capacitat calorífica segons:

$$C_v \propto |T_c^* - T_c|^{-\alpha}$$

I, degut a la relació entre $\log(|T_c^* - T_c|)$ i $\log(L)$, es pot reescriure com:

$$C_v \propto L^{\frac{\alpha}{\nu}}$$

Cosa que simplifica els càlculs dels gràfics. Atenent a la figura 9, el pendent de la recta és de $\alpha/\nu \approx 0.27 \pm 0.04 \rightarrow \alpha \approx 0.24 \pm 0.06$, que és fortament no compatible amb el valor que s'esperava d' $\alpha = 0$ [10][12].

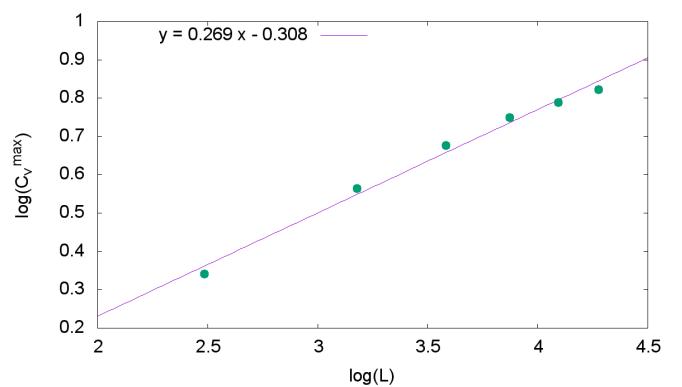


Fig. 9. Dependència potencial de la capacitat calorífica per partícula al punt crític d'un sistema d'Ising 2d finit de longitud característica L en funció d'aquesta. S'ha representat el resultat de la regressió lineal.

C. Paràmetre d'ordre — β

El paràmetre d'ordre (la magnetització) segueix la següent tendència:

$$\langle |m| \rangle \propto |T_c^* - T_c|^\beta = L^{-\frac{\beta}{\nu}}$$

Si s'observa la figura 10, s'obté el valor pel paràmetre β/ν fent servir tant els màxims de C_v , com els de χ . I els valors obtinguts són, respectivament:

$$\left. \frac{\beta}{\nu} \right|_{C_v} \approx 0.10 \pm 0.05 \rightarrow \beta \approx 0.09 \pm 0.06$$

i:

$$\left. \frac{\beta}{\nu} \right|_{\chi} \approx 0.11 \pm 0.08 \rightarrow \beta \approx 0.10 \pm 0.08$$

Aquests dos resultats són completament compatibles amb el seu valor esperat $\beta = 0.125$ [12].

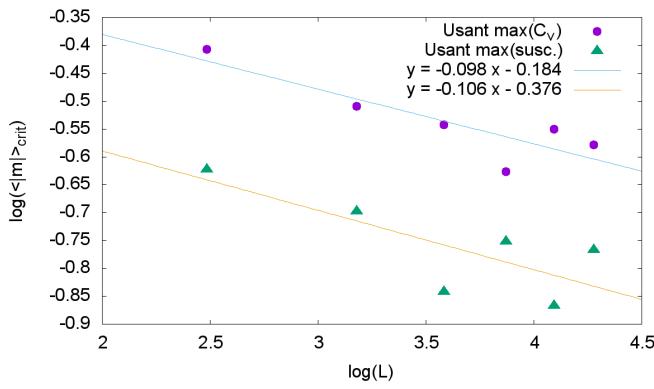


Fig. 10. Dependència potencial del valor absolut de la magnetització per partícula al punt crític d'un sistema d'Ising 2d finit de longitud característica L en funció d'aquesta. S'han calculat les dependències d'aquesta en dues temperatures crítiques diferents, trobades com a màxim de la capacitat calorífica i com a màxim de la susceptibilitat magnètica. S'han representat els resultats de les regressions lineals.

D. Susceptibilitat — γ

La susceptibilitat compleix el següent:

$$\chi \propto |T_c^* - T_c|^{-\gamma} = L^{\frac{\gamma}{\nu}}$$

I, com s'observa a la figura 11, s'obté el valor de:

$$\frac{\gamma}{\nu} \approx 1.760 \pm 0.006 \rightarrow \gamma \approx 1.58 \pm 0.18$$

Que és un resultat perfectament compatible amb el valor bibliogràfic $\gamma = 1.75$ [12].

E. Camp extern — δ

Per acabar, l'exponent delta permet relacionar la magnetització amb un camp magnètic extern. Donat que en aquest estudi no s'han simulat camps externs, aquest exponent ha de ser determinat mitjançant les relacions d'escala:

$$\delta = 1 + \frac{\gamma}{\beta}$$

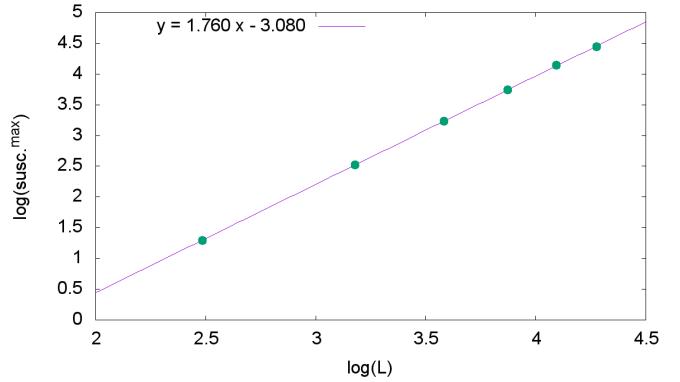


Fig. 11. Dependència potencial de la susceptibilitat magnètica per partícula al punt crític d'un sistema d'Ising 2d finit de longitud característica L en funció d'aquesta. S'ha representat el resultat de la regressió lineal.

Si s'introduceix en aquesta relació els valors que s'han trobat per a γ i β , s'obté el resultat $\delta = 17 \pm 11$. Aquesta mateixa relació, pels valors teòrics dels paràmetres γ i β , dona un valor de $\delta = 15$ [12]. Doncs, és senzill veure que, si bé el resultat experimental sembla poc significatiu (a jutjar pel seu enorme error relatiu, superior al 60%), és completament compatible amb l'esperat, i bastant proper a ell.

IX. FINITE SIZE SCALING

Se sap [13] que per a una quantitat termodinàmica qualsevol P , que en el sistema infinit es comporta com $P_\infty(t)$, divergent prop del punt crític amb exponent $t^{-\rho}$, es pot calcular quin serà el seu comportament en un sistema finit:

$$P_L(t) = P_\infty(t) \cdot f_P(x(t)), \quad x(t) := \frac{L}{\xi_\infty(t)}$$

Cosa que va ser primer proposada per E. Brézin [14]. I, aplicant propietats d'anàlitzitat de P_L i el fet que $P_\infty \sim t^{-\rho}$, es pot obtindre el seu comportament al voltant del punt crític com a sèrie de potències:

$$P_L(t) = L^{\frac{\rho}{\nu}} \left(p_0 + p_1 L^{\frac{1}{\nu}} t + p_2 L^{\frac{2}{\nu}} t^2 + \dots \right)$$

Es pot veure al primer terme com emergeix l'exponent que s'ha estat usant per a calcular els exponents crítics a l'anterior secció. Doncs, igualant ambdues expressions per a P_L , es pot extrapolar que el comportament de la funció f_P ha de respectar:

$$f_P(x) \sim x^{\frac{\rho}{\nu}}$$

Del contrari P_L presentaria una discontinuïtat asymptòtica en $t = (T - T_c)/T_c = 0$. Per tant, es pot definir una nova funció:

$$\mathcal{P}(\xi) = \frac{P_L}{L^{\frac{\rho}{\nu}}}(\xi) = (p_0 + p_1 \xi + p_2 \xi^2 + \dots), \quad \xi = L^{\frac{1}{\nu}} t$$

Que és completament invariant a l'escala del sistema simulat. Es pot comprovar als gràfics de la figura 12, on s'ha representat les dades reescalades amb els exponents crítics que s'han trobat a l'informe, que es compleix correctament al voltant de T_c .

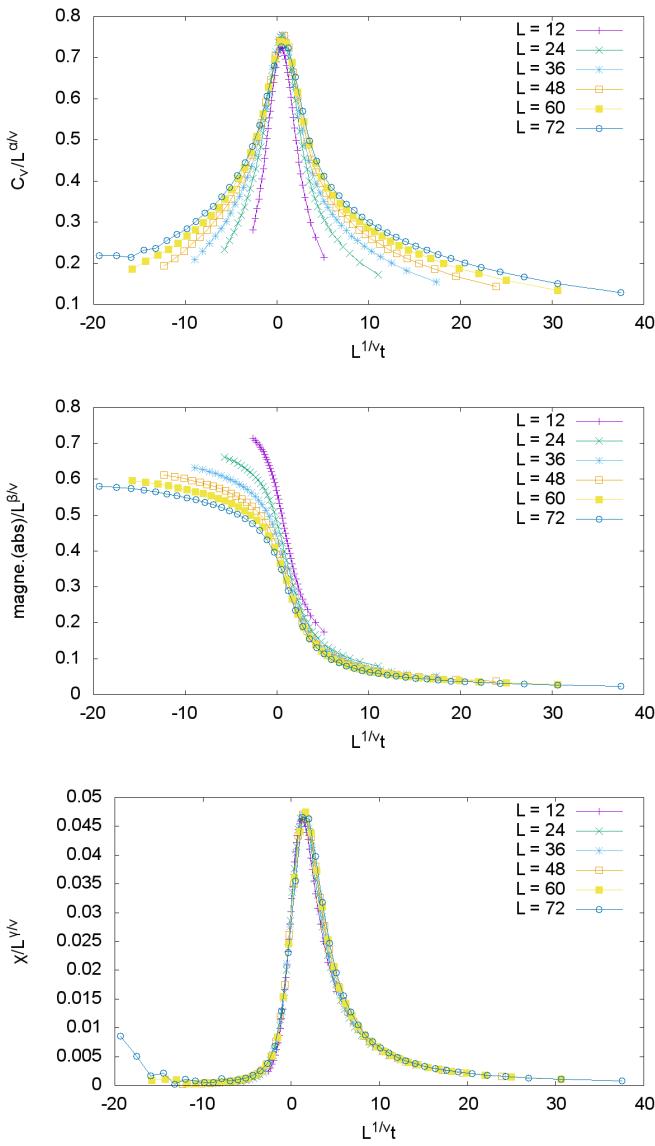


Fig. 12. Dependència dels valors de la capacitat calorífica (A), el valor absolut de la magnetització (B) i la susceptibilitat magnètica (C) d'un sistema d'Ising finit, amb els valors adequadament reescalats per a complir amb les prediccions de FSS. S'han usat els exponents crítics calculats al llarg de l'informe.

X. CONCLUSIONS

S'ha observat el comportament del sistema d'Ising 2d finit, amb longitud del costat L , així com la seva evolució "temporal", a mida que l'algorisme de Metròpolis avançava.

S'ha observat l'evolució de les principals variables termodinàmiques del sistema variant la temperatura, així com la longitud característica d'aquest, i s'ha demostrat que totes elles concordaven amb l'esperat.

S'ha extrapolat la temperatura crítica en què apareix la transició de fase per al sistema infinit i s'ha trobat un valor extremadament compatible amb el valor esperat de la bibliografia ($T_c^{exp} = 2.27 \pm 0.01$ i $T_c^{teo} = 2.269$). A més, s'han calculat

els exponents crítics de la simulació i la majoria d'ells han estat compatibles amb els valors de la teoria, tret d' α (veure la taula 1).

| Exponent | Simulació | Bibliografia |
|----------|-----------------|---------------|
| ν | 0.9 ± 0.1 | 1 |
| α | 0.24 ± 0.06 | 0 |
| β | 0.10 ± 0.08 | $1/8 = 0.125$ |
| γ | 1.58 ± 0.18 | $7/4 = 1.75$ |
| δ | 17 ± 11 | 15 |

Tbl. 1. Taula amb els exponents trobats mitjançant la simulació de Metròpolis d'un sistema d'Ising 2d finit.

I, per acabar, s'ha comprovat la teoria del *Finite Size Scaling*, tot reescalant algunes de les gràfiques més representatives.

Es pot concloure, doncs, que l'algorisme de Metròpolis és un bon model de simulació de Montecarlo, que, en un temps de computació no massa elevat, és capaç de donar prediccions raonables per a un sistema d'Ising en dues dimensions. S'ha observat, però, que per a temperatures massa petites, la longitud de correlació es fa comparable amb la mida del sistema, i l'algorisme de Metròpolis no és capaç de donar aquestes prediccions. Seria interessant repetir els experiments amb un ordinador més potent i per a mides més grans del sistema per a obtindre resultats més propers al model infinit.

REFERENCES

- [1] Stanford University. *The Ising Model*. URL: <https://stanford.edu/~jeffjar/statmech/intro4.html>.
- [2] Antoni Planes. *Fenòmens Col·lectius i Transicions de Fase*.
- [3] Gerard T. Barkema and Mark E. J. Newman. "Monte Carlo simulations in surface science". In: *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (1999).
- [4] Paul A. Gagniuc. "Markov chains : from theory to implementation and experimentation". In: () .
- [5] S. P. (Sean P.) Meyn and R. L. (Richard L.) Tweedie. "Markov chains and stochastic stability". In: (2009), p. 594.
- [6] *Markov chain - Wikipedia*. URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Markov_chain.
- [7] Claudio Gros. *Grand canonical ensemble 10.1 Grand canonical partition function*. Institute of Theoretical Physics, Frankfurt University.
- [8] Martin Evans. *The Microcanonical, Canonical and Grand Canonical Distrubtions Tutorial Sheet 2*. School of Physics, The University of Edinburgh.
- [9] Joao Amaral, Joao Goncalves, and Vitor Amaral. "Thermodynamics of the 2-D Ising Model From a Random Path Sampling Method". In: *IEEE Transactions on Magnetics* 50 (Jan. 2014), p. 1002204. doi: 10.1109/TMAG.2014.2326713.
- [10] Eduardo Ibarra García Padilla, Carlos Malanche-Flores, and Freddy Poveda Cuevas. "The Hobbyhorse of Magnetic Systems: The Ising Model". In: *European Journal*

- of Physics* 37 (Jan. 2016), p. 65103. DOI: 10.1088/0143-0807/37/6/065103.
- [11] Ishita Agarwal. *Numerical Analysis of 2-D Ising Model*. University of Bonn, 2011.
 - [12] Eduard Vives. “Presentacions de les Pràctiques”. In: (2022).
 - [13] Jae-Kwon Kim. “Application of finite size scaling to Monte Carlo simulations”. In: *Phys. Rev. Lett.* 70 (12 Mar. 1993), pp. 1735–1738. DOI: 10.1103/PhysRevLett.70.1735. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.70.1735>.
 - [14] E. Brézin. “An investigation of finite size scaling”. In: *J. Phys. France*, 43 (1 1982).