

SIMULAZIONE NUMERICA DEL MODELLO DI ISING IN 2D

IL FINITE SIZE SCALING

M. D'Elia, I modulo corso di Metodi Numerici della Fisica, a.a. 2018/2019

Testi consigliati:

Newman, Barkema “Monte-Carlo methods in Statistical Physics”, Oxford University Press

Landau, Binder, “A guide to Monte-Carlo simulations in Statistical Physics”, Cambridge University Press

SCOPO

studiare il modello intorno alla transizione di fase ferromagnetica. Tale transizione avviene ad una temperatura critica inversa $1/T_c = \beta_c = 0.4406868\dots$ ed è del secondo ordine. Intorno a T_c è previsto un comportamento critico con lunghezza di correlazione ξ divergente. Tale comportamento è descritto dai cosiddetti esponenti critici, che descrivono come variano alcune quantità intorno a T_c in funzione della temperatura ridotta $t \equiv (T - T_c)/T_c \propto (\beta - \beta_c)$ (abbastanza vicino a T_c):

$$\xi \sim |t|^{-\nu}$$

$$\langle M \rangle \sim |t|^\beta \quad \text{per } T < T_c$$

$$\chi \equiv \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial h} \propto V(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \sim |t|^{-\gamma}$$

$$C \equiv \frac{\partial \langle \epsilon \rangle}{\partial T} \propto V(\langle \epsilon^2 \rangle - \langle \epsilon \rangle^2) \sim |t|^{-\alpha}$$

dove $V = L^2$ è il volume, $M = \sum_i s_i/V$ è la densità di magnetizzazione, $\epsilon = E/V$ è la densità di energia, C è il calore specifico del sistema e χ è la suscettività magnetica

NOTA: per volume finito è necessario usare $|M|$ al posto del vero parametro d'ordine M : quest'ultimo farebbe sempre zero anche per $T < T_c$ per simulazioni lunghe a piacere. Nel limite termodinamico le due quantità differiscono al più di un segno.

É usuale scrivere il comportamento critico anche in un'altra forma, che dice come variano le quantità al variare della lunghezza di correlazione, è facile eliminare $|t|$ trovando:

$$\langle |M| \rangle \sim \xi^{-\beta/\nu}$$

$$\chi \sim \xi^{\gamma/\nu}$$

$$C \sim \xi^{\alpha/\nu}$$

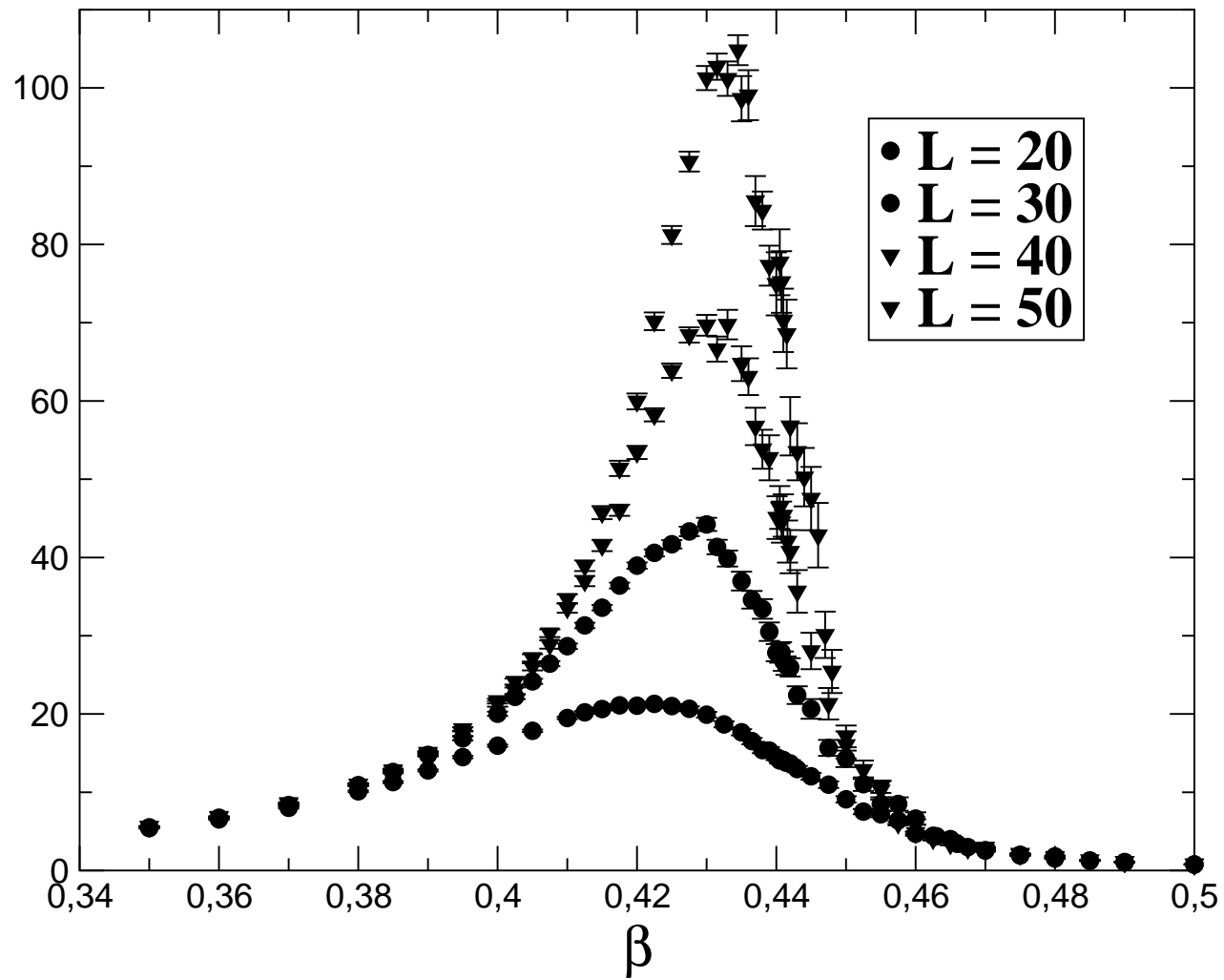
Per il modello di Ising in 2 dimensioni gli indici critici sono noti esattamente e sono:

$$\nu = 1 ; \quad \beta = 1/8 ; \quad \gamma = 7/4 ; \quad \alpha = 0 .$$

Di seguito riportiamo i valori calcolati per χ , C ed $\langle |M| \rangle$ al variare di β e per vari reticoli quadrati di lato L con condizioni periodiche al contorno.

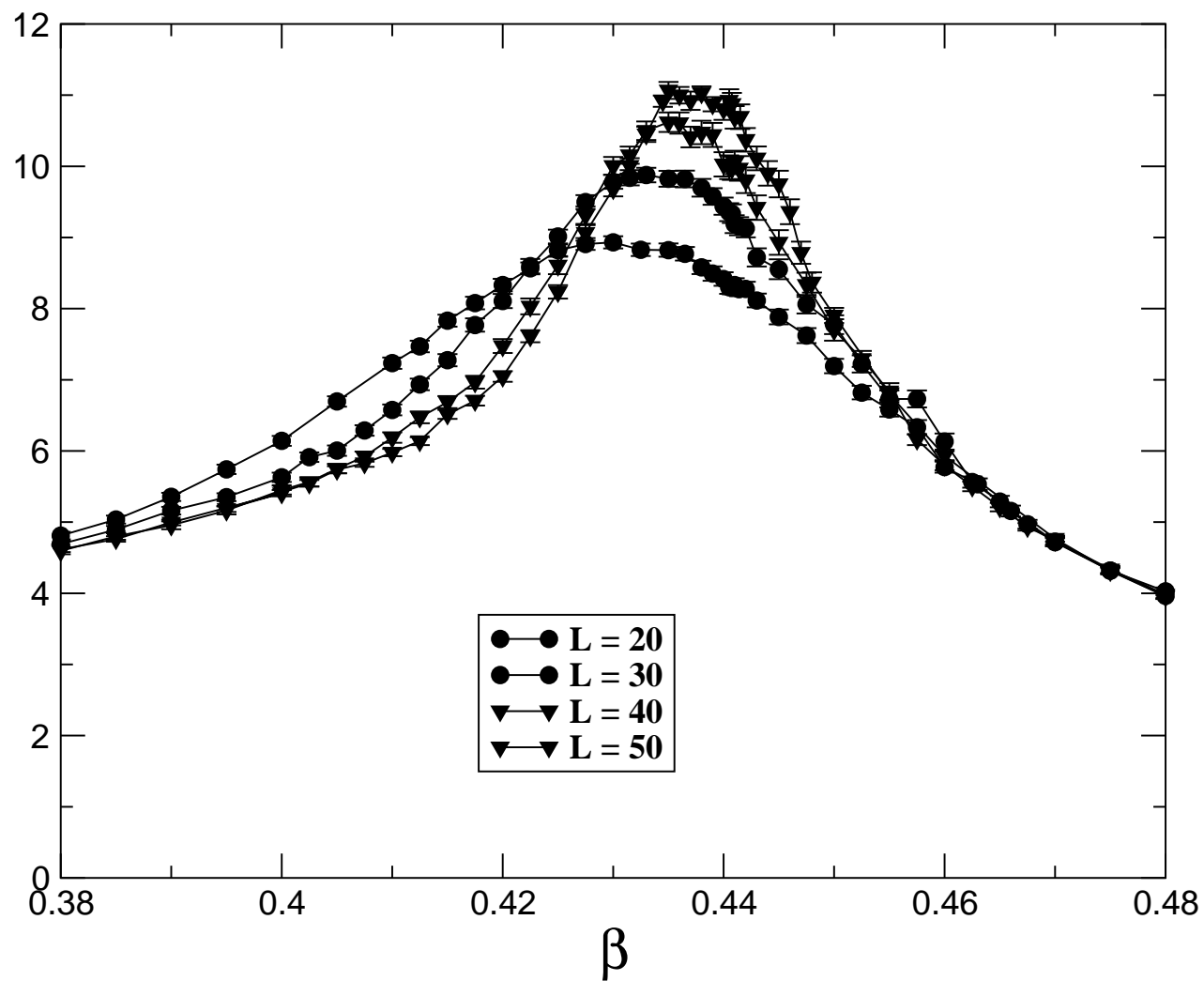
2D ISING MODEL

MAGNETIC SUSCEPTIBILITY



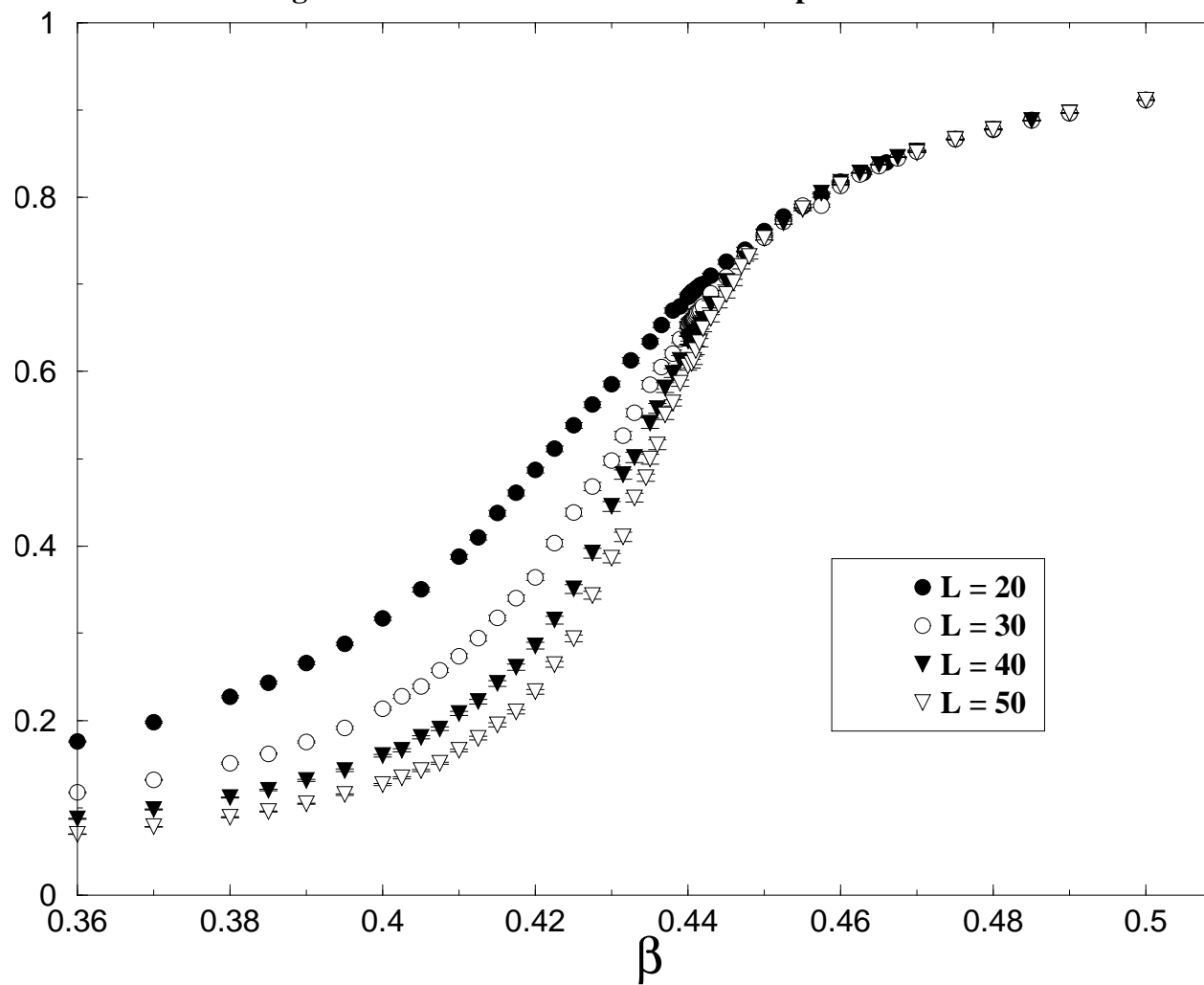
Modello di Ising 2d

calore specifico intorno alla transizione su diversi volumi



Modello di Ising in 2d

Magnetizzazione intorno alla transizione per diversi volumi

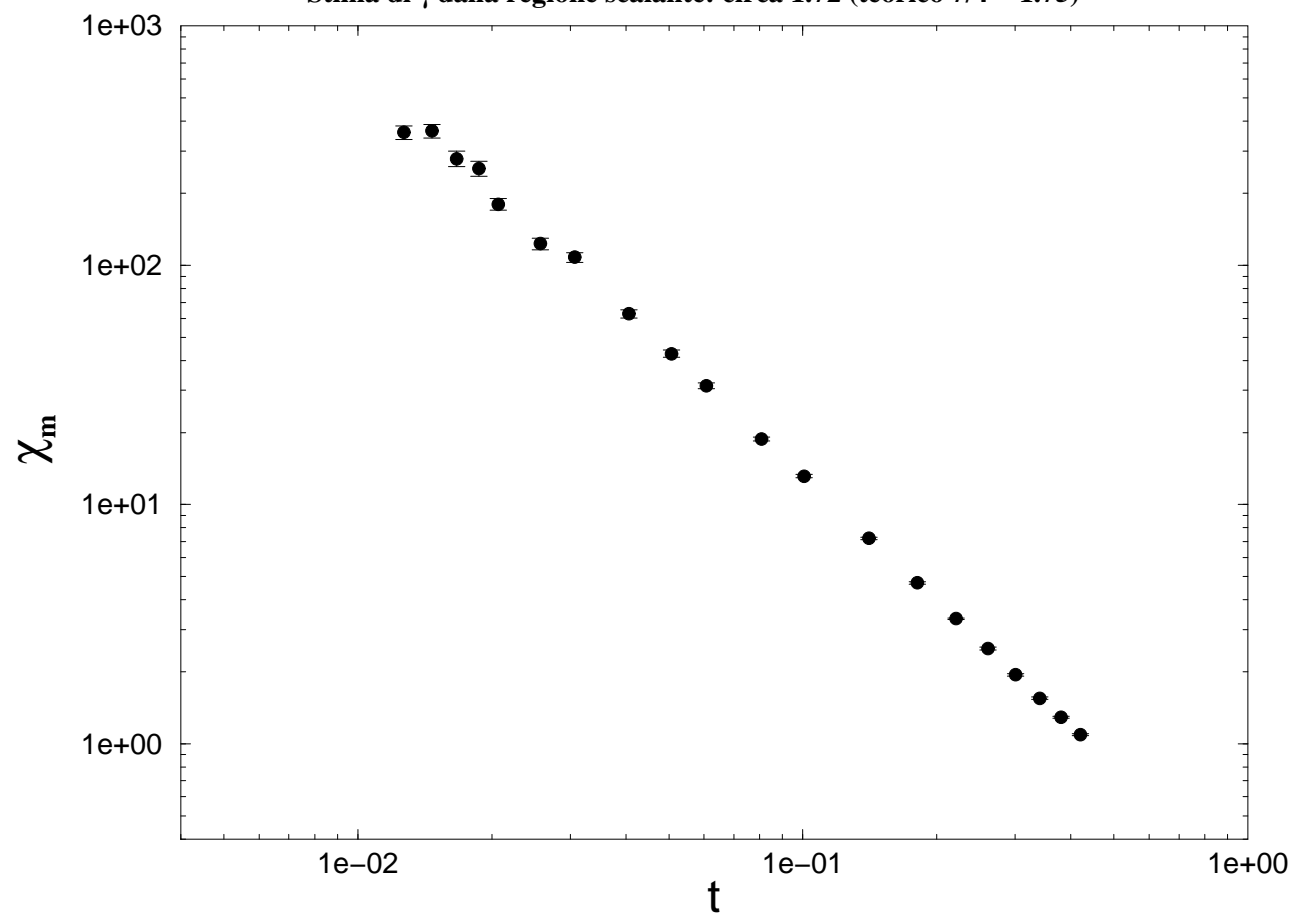


Ci sono alcune cose evidenti da notare:

- Non si osservano vere e proprie divergenze, anche se si nota come la suscettività magnetica abbia un picco che sembra crescere al crescere di L . Allo stesso modo la magnetizzazione ha una rapida salita intorno alla transizione che sembra diventare sempre più brusca al crescere di L .
- Per L finito quindi non c'è nessun comportamento critico. Il motivo è semplice: come può svilupparsi una lunghezza di correlazione infinita in un reticolo di dimensioni finite?
- Per ogni valore di L possiamo però definire un valore pseudo-critico della temperatura $\beta_{pc}(L)$, ad esempio come quello dove si trova il massimo della suscettività magnetica.
- Si nota anche come il $\beta_{pc}(L)$ non coincida con il β_c , anche se sembra tendere ad esso al crescere di L .
- Il comportamento vicino (ma non troppo) al picco è in parte consistente con l'andamento critico previsto, ad esempio nella slide seguente riportiamo χ in funzione di $|t|$ per il reticolo con $L = 0$, che è consistente con $\chi \sim |t|^{-\gamma}$ e γ vicino a quello previsto, tuttavia avvicinandoci troppo a β_c questo comportamento scompare.

Ising 2d: suscettivita' magnetica su reticolo 60x60

Stima di γ dalla regione scalante: circa 1.72 (teorico $7/4 = 1.75$)



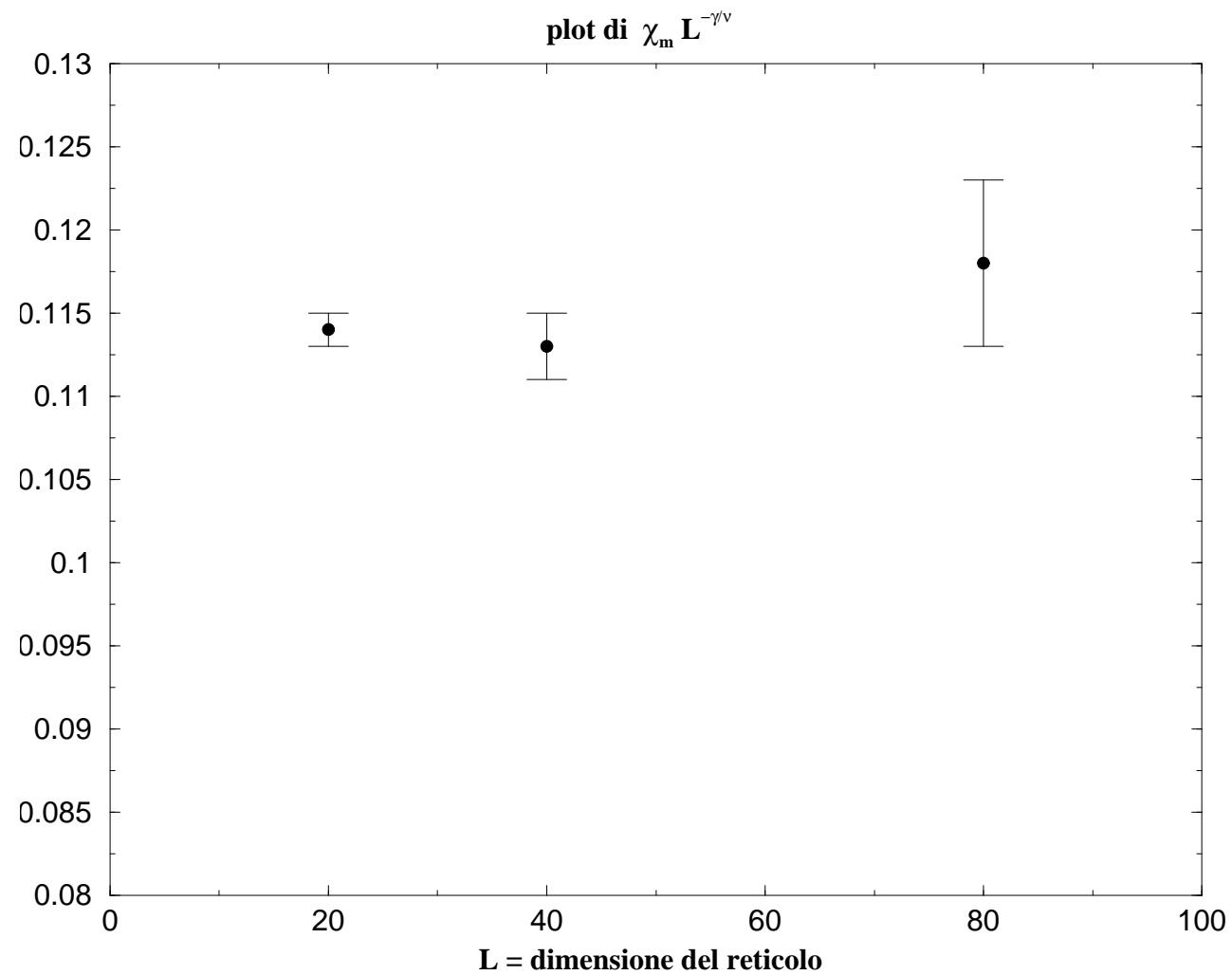
C'è modo di interpretare il comportamento osservato e, attraverso tale interpretazione, ricavare maggiori informazioni?

- È chiaro che non osserviamo nessuna divergenza perché ξ non riesce veramente a divergere. C'è un regime di temperature vicino a β_c dove ξ inizia a crescere, e corrispondentemente si vede crescere χ come nella figura precedente, ma poi ξ satura ad un valore ξ_{eff} fissato dal size L .
- Stiamo quindi osservando degli **effetti di size finito** che si manifestano quando la lunghezza caratteristica che descrive la fisica del sistema diventa confrontabile o minore del reticolo esplorato dalla simulazione, $\xi \lesssim L$.
- Possiamo però fare una previsione sul massimo raggiunto dal picco della suscettività magnetica al variare di L , che sarà proporzionale a $\xi_{eff}^{\gamma/\nu}$ quando ξ_{eff} assume il suo valore massimo, che è proporzionale ad L , e quindi

$$\chi_{max} \propto L^{\gamma/\nu}$$

questo è consistente con i dati mostrati nella figura seguente usando $\gamma/\nu = 7/4$.
In alternativa non conoscendo gli esponenti critici, il valore di γ/ν può essere ottenuto proprio da un fit ai valori di $\chi_{max}(L)$ in funzione di L .

Finite Size Scaling per il picco della suscettività



È questo il meglio che sappiamo fare? Riusciamo a descrivere anche cosa succede intorno al massimo?

- Le variabili del problema sono L e ξ dove $\xi(\beta)$ sarebbe la lunghezza vera che si avrebbe per reticolo infinito. Possiamo quindi scrivere

$$\chi(\beta, L) = \chi(\xi, L) = L^{\gamma/\nu} \hat{\phi}(L, \xi)$$

dove la funzione $\hat{\phi}$ esprime l'andamento di χ intorno al picco di altezza $L^{\gamma/\nu}$.

- Ci sono 3 lunghezze in gioco, ξ , L e la spaziatura a del reticolo in termini della quale sono implicitamente espresse ξ ed L . Tuttavia intorno alla transizione, dove $\xi \rightarrow \infty$, possiamo **assumere** che il sistema perda completamente memoria della sua struttura microscopica e quindi anche del valore di a . Sotto questa assunzione un'unica quantità diventa rilevante per il nostro problema, cioè il rapporto L/ξ

- Con questa assunzione abbiamo quindi

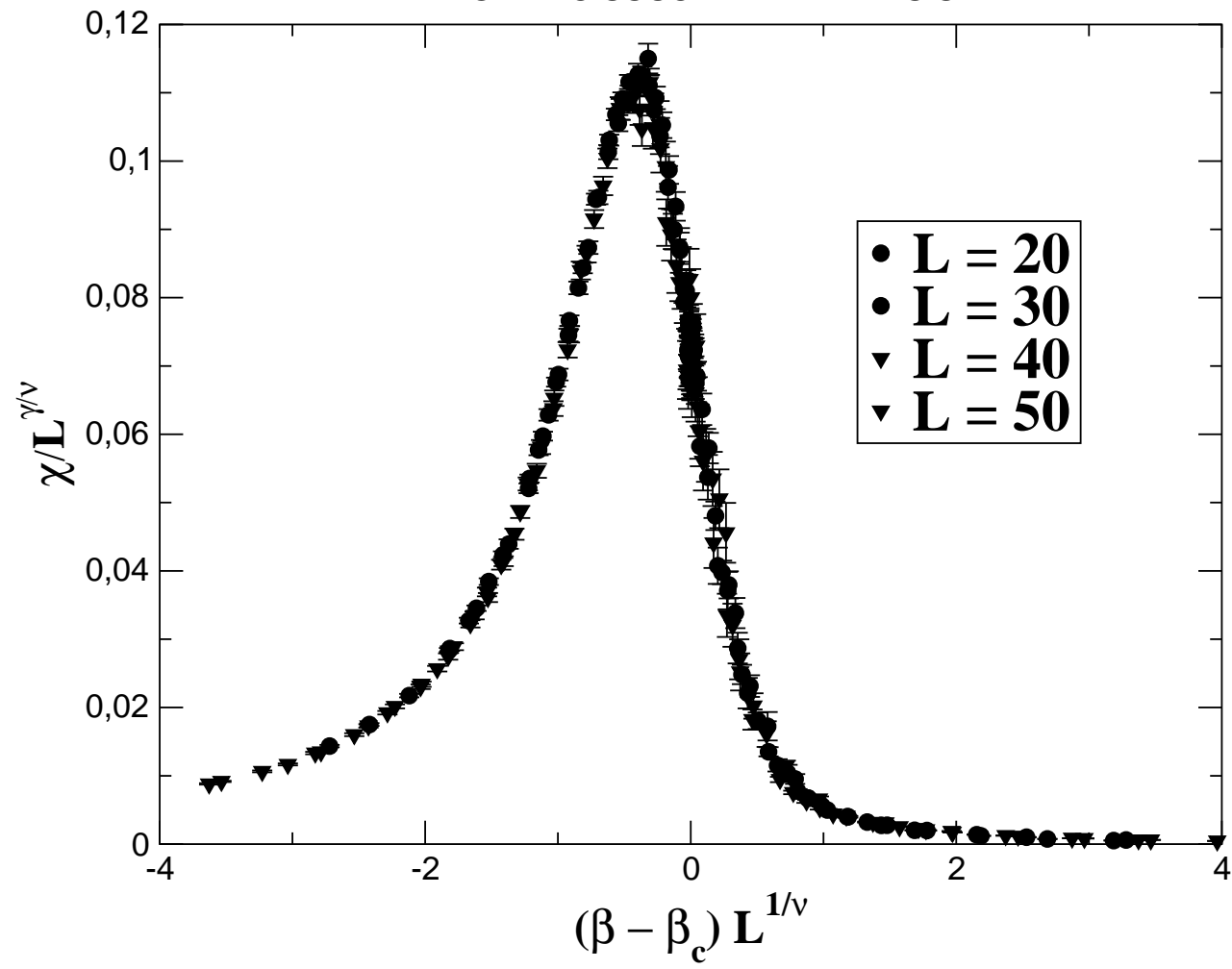
$$\chi(\beta, L) = L^{\gamma/\nu} \hat{\phi}(L/\xi) = L^{\gamma/\nu} \tilde{\phi}(tL^{1/\nu}) = L^{\gamma/\nu} \phi((\beta - \beta_c)L^{1/\nu})$$

dove ϕ (o le altre equivalenti prima scritte) è un'opportuna funzione (ignota) ed abbiamo usato nei vari passaggi il fatto che $\xi \propto t^{-\nu}$ e che $t \propto (\beta - \beta_c)$.

- La precedente è una relazione di **scaling**: stiamo dicendo che una quantità, di principio funzione di più variabili, deve essere in realtà funzione di una loro opportuna combinazione (variabile di scaling) a parte un prefattore proporzionale a $L^{\gamma/\nu}$.
- Questa previsione, derivante unicamente dall'ansatz che intorno ad una transizione con lunghezza di correlazione divergente il sistema perda memoria della struttura microscopica, può essere verificata esplicitamente riportando la quantità $\chi/L^{\gamma/\nu}$ come funzione di x dove $x = (\beta - \beta_c)L^{1/\nu}$ è la variabile di scaling.
- Il ragionamento può essere ripetuto per tutte le quantità. La verifica è fatta nelle figure seguenti, dove abbiamo usato gli indici critici ed il valore di β_c noti per Ising.

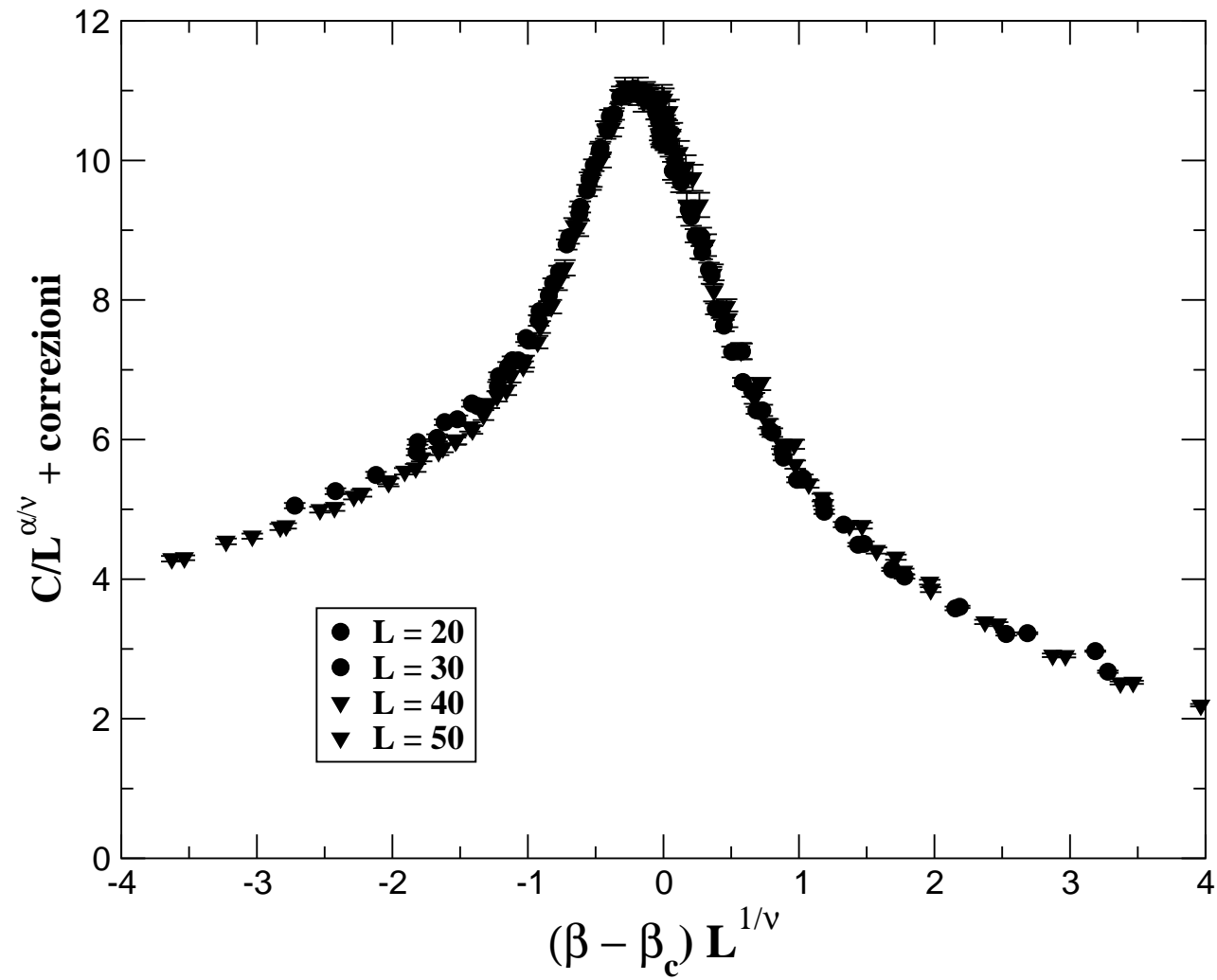
2D ISING MODEL

MAGNETIC SUSCEPTIBILITY F.S.S.



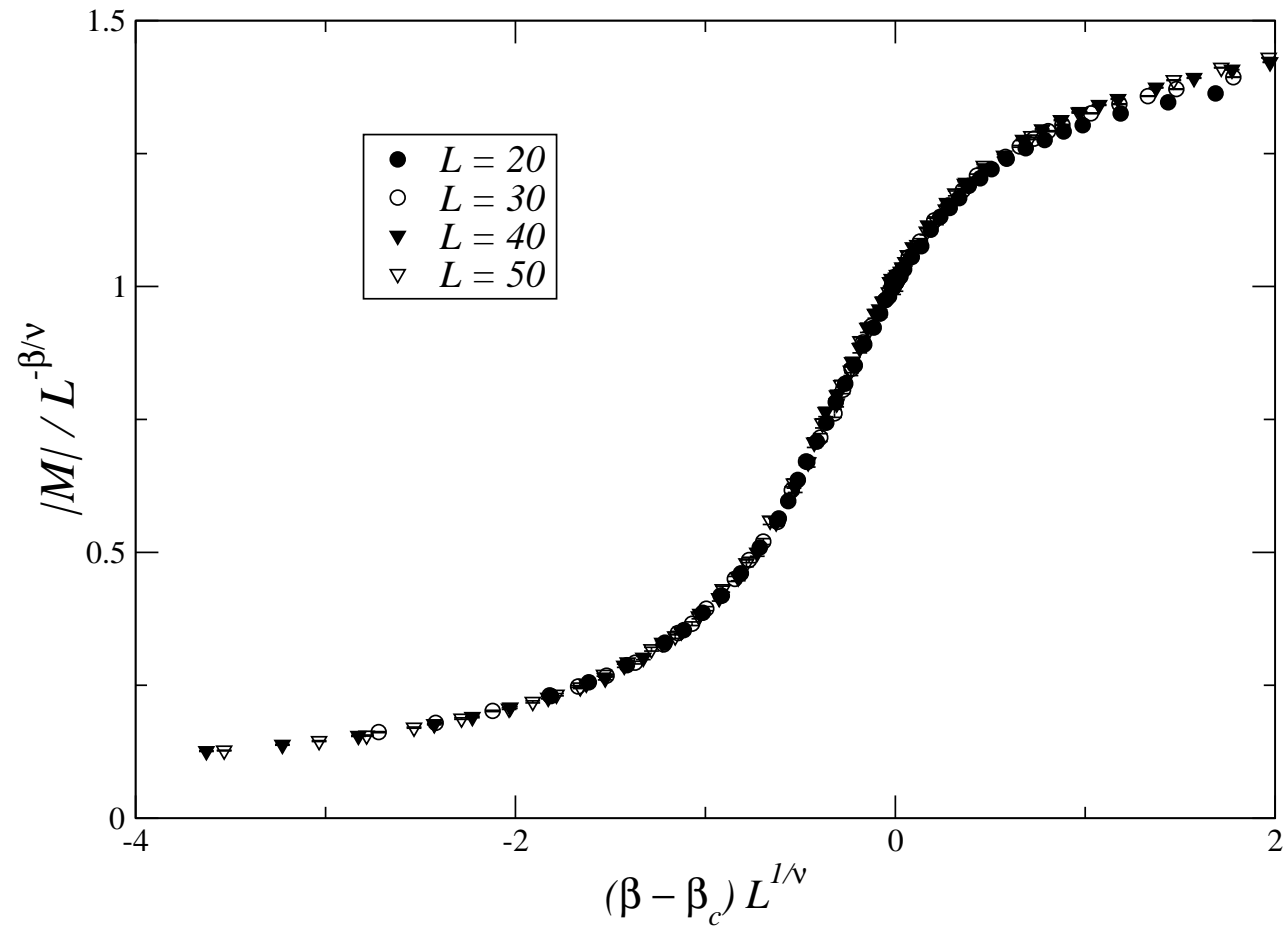
Modello di Ising in 2d

analisi di finite size scaling del calore specifico



Modello di Ising in 2d

Analisi di finite size scaling della magnetizzazione



La tecnica che abbiamo visto all'opera è nota come *scaling di size finito* o *finite size scaling* (FSS)

- Il collasso dei dati ottenuti per diversi L su un'unica funzione mostra allo stesso tempo che l'ansatz di scaling è giusto e che gli indici critici ipotizzati (o in questo caso già noti) sono quelli giusti.
- In alternativa la tecnica permette di stimare gli indici o il β_c cercando di ottenere il collasso.
- Possiamo anche capire come si sposta la posizione del massimo della suscettività, cioè $\beta_{pc}(L)$, al variare di L . Il massimo è sempre sul punto dove $\phi(x)$ ha un massimo, quindi corrisponderà ad un certo \bar{x} che non è necessariamente nullo. Abbiamo quindi

$$(\beta_{pc}(L) - \beta_c)L^{1/\nu} = \bar{x} \quad \longrightarrow \quad \beta_{pc}(L) = \beta_c + \bar{x} L^{-1/\nu}$$

che può fornire direttamente ν effettuando un fit.

UNIVERSALITÀ

Se provassimo a studiare un modello statistico simile all'Ising (stessa simmetria Z_2) ma con diverse caratteristiche microscopiche (interazione non a primi vicini, reticolo non a maglie quadrate, etc. etc.) ci potremmo aspettare di trovare lo stesso comportamento nel regime in cui ξ diventa molto grande ed il sistema perde memoria della struttura microscopica. Quindi gli indici critici devono dipendere solo dalla simmetria in gioco (e dalla dimensionalità) ed essere comuni a più sistemi con caratteristiche microscopiche diverse. Questo definisce delle **CLASSI DI UNIVERSALITÀ**

In alcuni casi la simulazione viene usata per determinare quanto valgono gli indici critici di un dato modello. Tuttavia in molti altri casi, nella pratica, quello che si fa è di verificare se funzionano bene degli indici critici già noti e predetti sulla base dell'universalità, cioè sulla base della coincidenza della simmetria rotta con quella di un altro modello noto e già studiato.

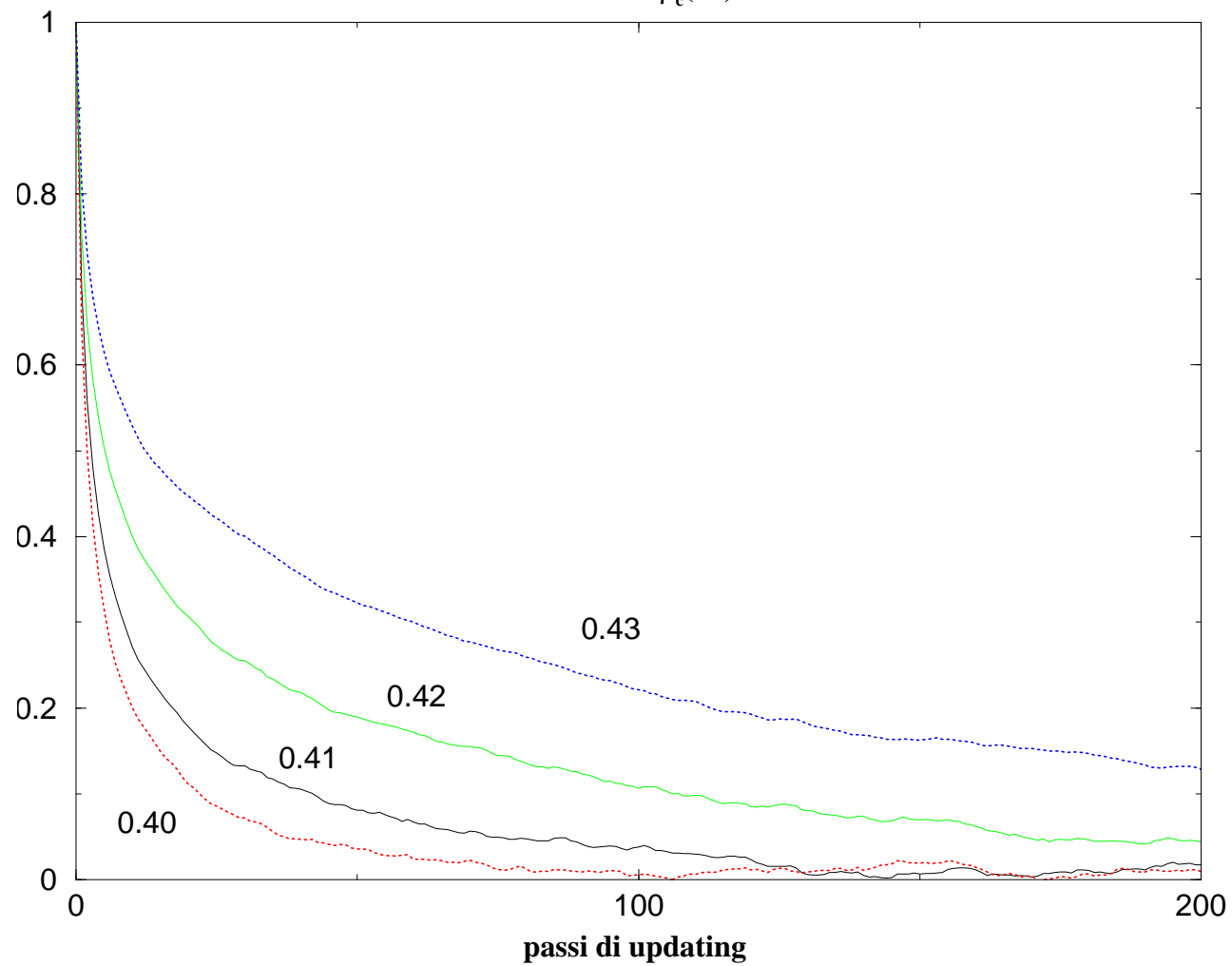
IL CRITICAL SLOWING DOWN

GLI EFFETTI COLLATERALI DEL COMPORTAMENTO CRITICO

- In corrispondenza della transizione di fase, dove la simmetria si rompe, può capitare che il tempo di autocorrelazione della nostra catena di Markov diventi molto grande e tenda ad infinito.
- Questo è naturale se pensiamo che alla transizione ci si attende che l'ergodicità venga persa: la catena rimane bloccata in una delle fasi (spin su o spin giù), l'autovalore uno della matrice W_{ab} diventa degenere, cioè il secondo autovalore più grande (in modulo) λ_1 tende a uno e quindi $\tau_{exp} \equiv -1/(\log(\lambda_1)) \rightarrow \infty$.
- Da un punto di vista più pratico, intorno a T_c si formano grossi domini di dimensione sempre più grande e diventa sempre più lungo e laborioso perdere memoria della struttura di domini che si viene a creare in un certo punto della simulazione.

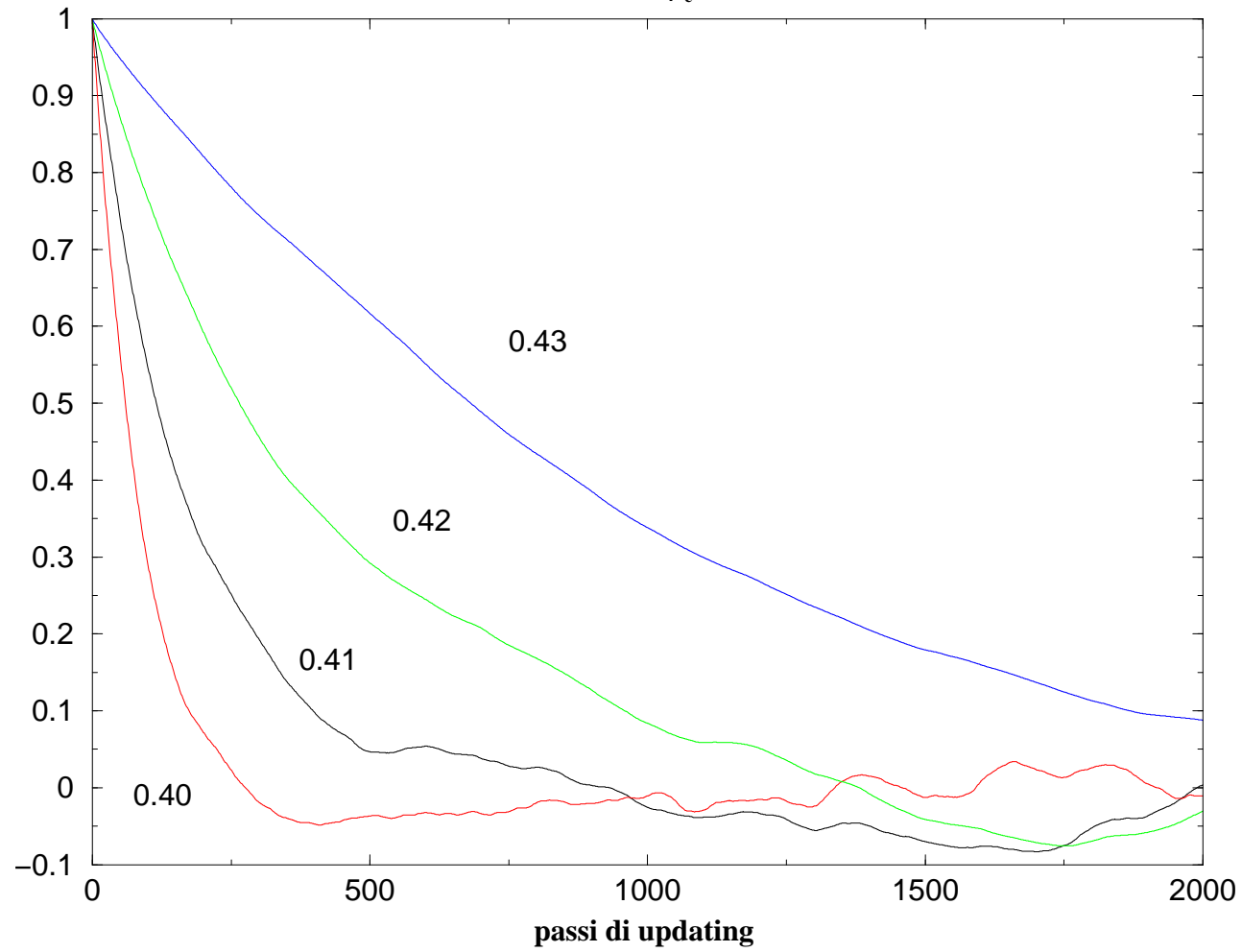
Autocorrelazione dell'energia verso la transizione

reticolo 40 x 40 $\beta_c(40) = 0.43$



Autocorrelazione di M verso la transizione

reticolo 40 x 40 $\beta_c(40) = 0.43$

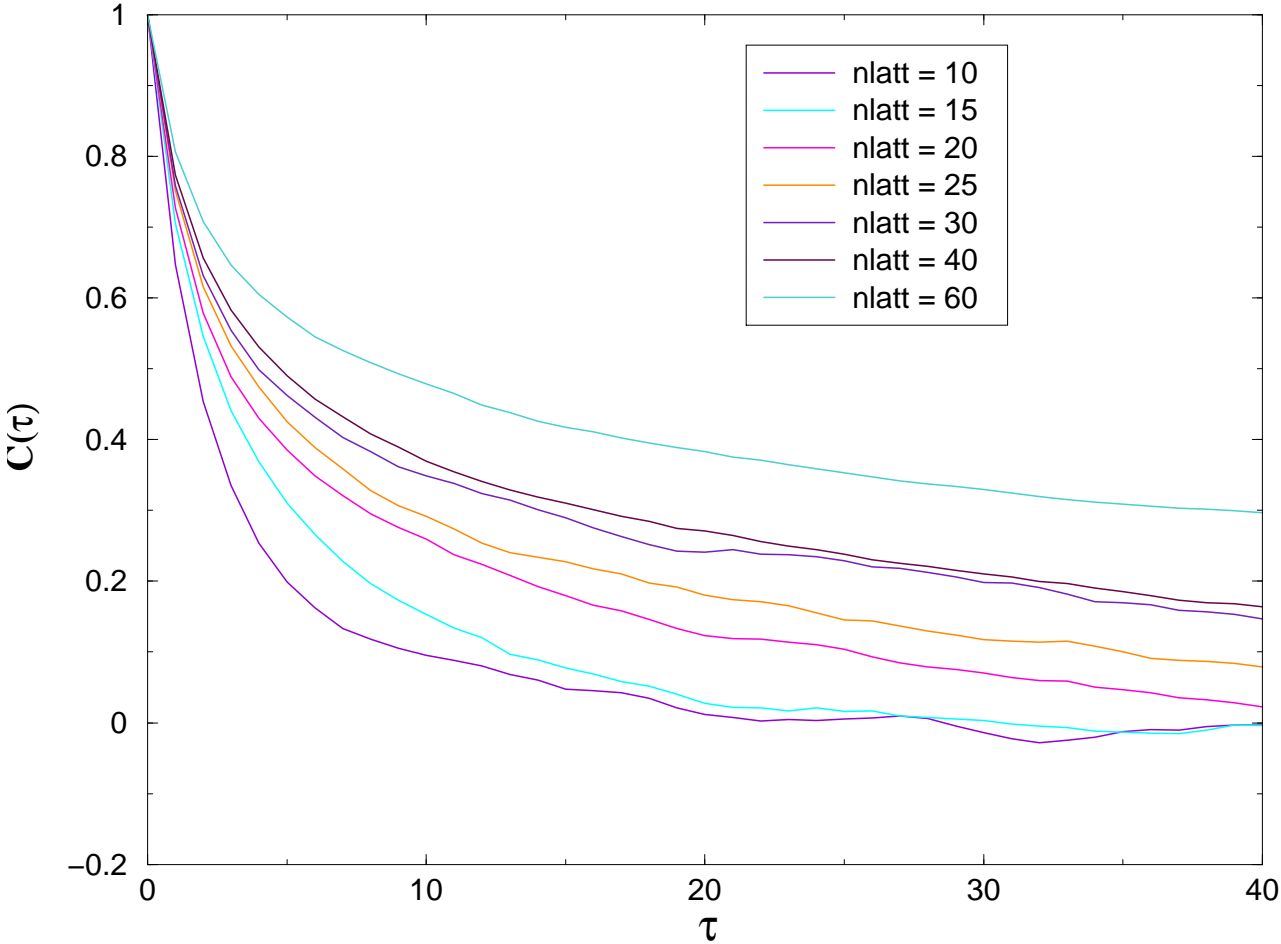


- Per quanto detto, è ragionevole aspettarsi che il tempo di autocorrelazione cresca al crescere della dimensione tipica dei domini, quindi della lunghezza di autocorrelazione. Il modo esatto con cui questo avviene è descritto da un esponente critico noto come coefficiente di critical slowing down:

$$\tau \sim \xi^z$$

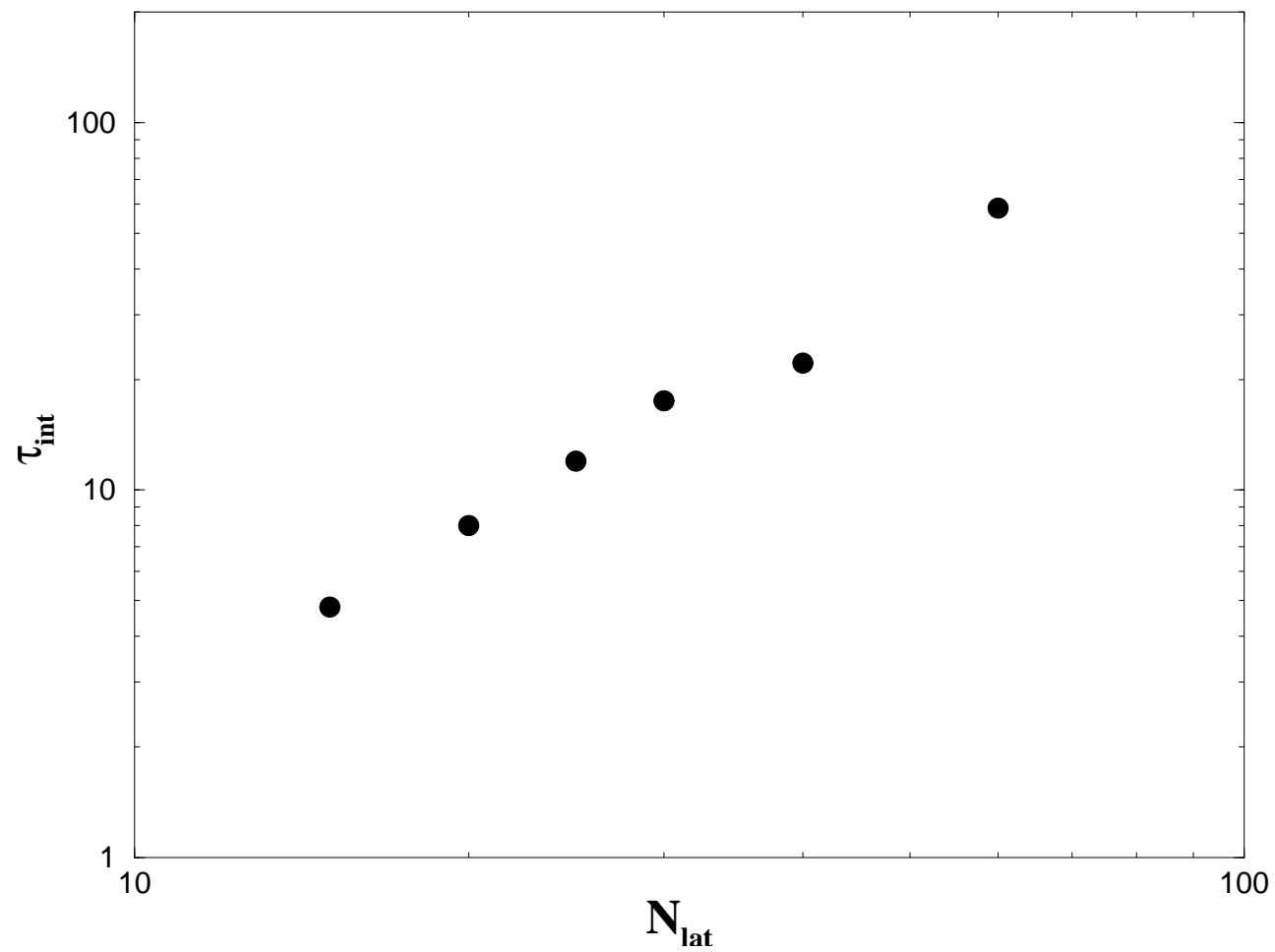
- Il coefficiente z non rappresenta una proprietà fisica del sistema, ma è invece una caratteristica dell'algoritmo: algoritmi diversi possono avere coefficienti z diversi, quindi è possibile sperare di inventare nuovi algoritmi che rendano il problema meno importante (z più piccolo)
- Gli effetti di size finito giocano un ruolo anche qui: per L finito il tempo di autocorrelazione resterà finito raggiungendo un massimo intorno a $\beta_{pc}(L)$ che crescerà come L^z .

Ising 2d: autocorrelazione energia al punto critico



Ising 2d: τ_{int} al punto critico come funzione di N_{lat}

plot in scala logaritmica: dalla pendenza z circa 1.8



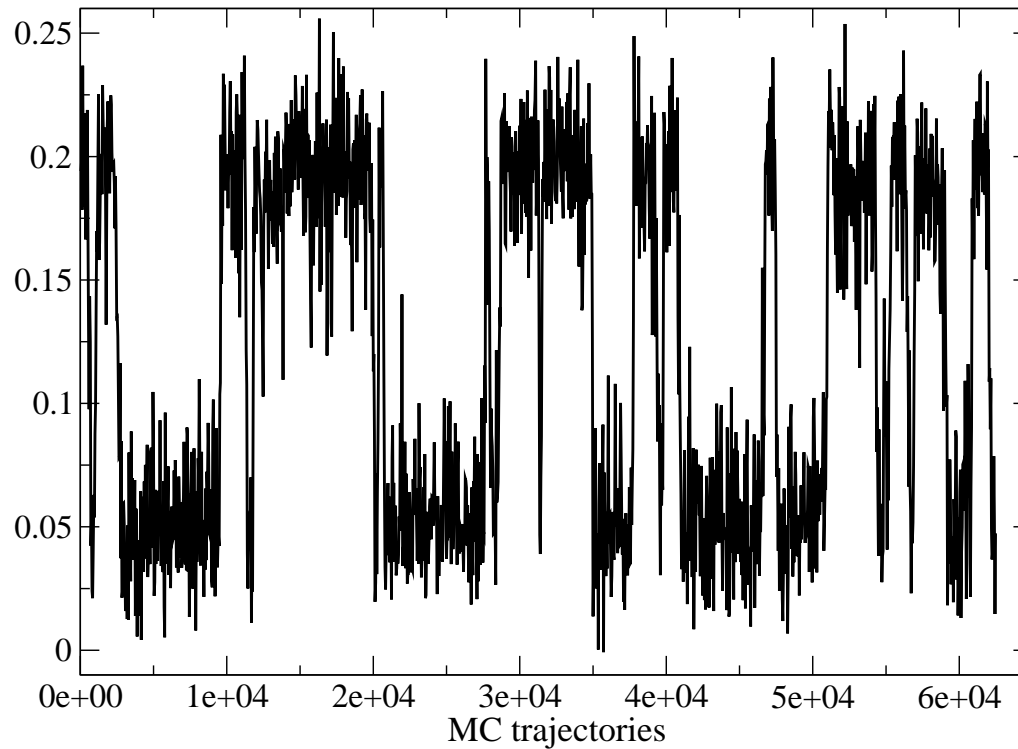
Per l'algoritmo Metropolis locale che abbiamo usato, si osserva un coefficiente $z \sim 2$. Questo è ragionevole considerando che

- Per decorrelare bisogna perdere memoria di strutture ordinate di dimensione circa ξ .
- Un dominio viene spazzato via quando una informazione di segno opposto all'interno o al bordo inizia a propagare: essendo l'algoritmo locale, la propagazione avviene localmente e più o meno a caso, come in un processo diffusivo. In un processo diffusivo, come il random walk, la distanza percorsa è circa proporzionale alla radice quadrata del tempo, cioè $t \propto (\text{distanza})^2$

La speranza è di riuscire a realizzare un algoritmo migliore che, intorno alla transizione, riesca ad individuare una struttura ordinata (dominio) nel suo insieme invertendola tutta in un colpo solo. **Questa speranza è realizzata dagli algoritmi a cluster**

What if FIRST ORDER?

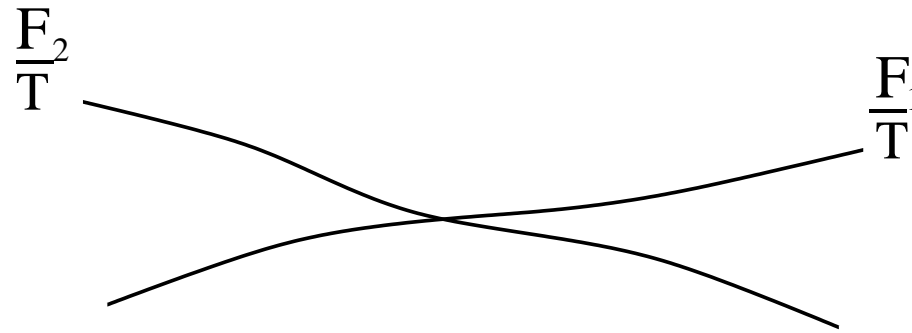
A strong first order (large gap) will be manifest already on moderate lattice sizes.
Look for instance at this picture



Coexistence of phases is already pretty clear, you do not need further investigations on larger lattices to believe it is first order.

But indentifying weaker first order transitions may be much more expensive ...

Finite Size Scaling for first order: qualitative sketch



At a first order two free energy sheets cross with a finite angle. The energy density $\epsilon = -\frac{T^2}{V} \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{F}{T} \right)$ has a gap $\Delta\epsilon$ (say $\epsilon = 0$ on one side and $\Delta\epsilon$ on the other)

Specific heat: $C = V(\langle \epsilon^2 \rangle - \langle \epsilon \rangle^2)$.

Probability of being in phase 1 or 2 around the transition: $P_1 : P_2 = 1 : e^{\Delta\epsilon V \tau / T_c}$

$$C = (\Delta\epsilon)^2 V \frac{e^{\Delta\epsilon V \tau / T_c}}{(1 + e^{\Delta\epsilon V \tau / T_c})^2} = L^3 \phi(\tau L^3)$$

A first order scales as a second order with critical indexes $\nu = 1/3$ ($1/d$ in d -dimensions) and $\alpha = 1$.