

RESOLUCIÓ DEL MODEL D'ISING 2D

Albert Trullols

Introducció

L'objectiu d'aquesta pràctica ha estat resoldre el model d'Ising en 2D per mitjà de simulacions numèriques emprant l'algoritme de Monte Carlo. Durant el transcurs de l'informe farem certs apunts sobre l'eficiència a l'hora de prendre mesures a partir del programa, estudiarem la dependència dels resultats en la mida del sistema i el comportament de les variables termodinàmiques en el punt crític.

Sobre el model d'Ising

El model d'Ising és molt útil de cara a resoldre la termodinàmica de multitud de sistemes dinàmics complexos. D'entrada es tracta d'un model reticular d'estudi d'un sistema de ferromagnets uniaxials, no obstant és útil de cara a la resolució d'altres sistemes com l'aliatge binari o el gas reticular. Els sistemes pels quals el model d'Ising pot ser d'utilitat, solen tenir en comú fenòmens com la interacció de curt abast o com la dicotomia en el valor de les variables microscòpiques. Com a tancament d'aquesta motivació a l'estudi de l'Hamiltonià d'Ising, trobo interessant recalcar que com ja he dit, existeixen múltiples sistemes dinàmics complexos que poden estudiar-se a partir del model d'Ising, independentment dels detalls microscòpics dels sistemes, de manera que trobem que un mateix model, resol multitud de models que poden ser físicament, molt diferents.

Presentem l'Hamiltonià d'Ising:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i$$

Veiem que aquest hamiltonià té dues contribucions principals. Una de les contribucions és deguda a la interacció de curt abast a primers veïns amb constant d'interacció J . L'altra és la contribució deguda a l'acoblament entre un camp extern i el paràmetre d'ordre al qual farem referència durant aquest estudi com a magnetització.

Per a simplificar el problema, en aquesta pràctica hem treballat amb l'hamiltonià en unitats naturals de J i sense camp extern:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j$$

Sobre l'algoritme de Metropolis

De cara a la resolució numèrica del model d'Ising s'ha fet ús de l'algoritme de Metropolis, generant anteriorment una matriu aleatòria de spins de valor 1 o -1 i posteriorment proposant canvis sobre el seu valor que poden ser acceptats sota certa condició o rebutjats si aquesta condició no és satisfeta. Formalment diem aquest algoritme té estructura de cadena de Markov, tenim un conjunt finit d'estats, una matriu de transició d'estat inicial a final i una distribució inicial de probabilitats associada a la probabilitat inicial de que la cadena comenci a un cert estat. És útil demostrar que aquest algoritme, a més de tenir la estructura formal de la cadena de Markov, també en satisfà la condició de balanç detallat:

$$\pi_i P_{ij} = \pi_j P_{ji}$$

On π_k representa la probabilitat d'equilibri de l'estat k i P_{lm} representa la probabilitat de transició de l'estat l a l'estat m .

En el nostre cas ens interessa demostrar que:

$$T(X \rightarrow Y)Q(X \rightarrow Y) = T(Y \rightarrow X)Q(Y \rightarrow X)$$

On T representa la probabilitat de proposta de canvi i Q la probabilitat d'acceptació.

La probabilitat de proposta de canvi es pot entendre com la probabilitat de seleccionar aleatòriament un spin de la matriu i proposar el seu canvi. Donat que treballem en un sistema absolutament homogeni, la probabilitat d'escollir el canvi d'un spin qualsevol és la mateixa per a qualsevol dels spins, de manera que la probabilitat de proposta de canvi de l'estat X al Y i de fet, del canvi Y al X és:

$$T(X \rightarrow Y) = \frac{1}{N} = T(Y \rightarrow X)$$

On $N = L \cdot L$ és el nombre d'elements de la matriu de spins.

De cara a la probabilitat d'acceptació expliquem breument la condició de l'algoritme. Si hem proposat un canvi X a Y tal que $\Delta E = E_Y - E_X$ és negatiu (és a dir, proposem un canvi que disminueix l'energia) el canvi s'accepta; si ΔE resulta ser positiu (és a dir, proposem un canvi que augmenta l'energia), generem un nombre aleatori q dins el rang $(0,1)$ tal que :

$$\text{Si } q < e^{\frac{-\Delta E}{KT}} \text{ s'accepta el canvi tal que } Q(X \rightarrow Y) = 1$$

$$\text{Si } q \geq e^{\frac{-\Delta E}{KT}} \text{ es rebutja el canvi tal que } Q(X \rightarrow Y) = e^{\frac{-\Delta E}{KT}}$$

Podem veure que per tal de satisfer les condicions sobre els possibles resultats de la comparació entre q i el factor de Boltzmann, la probabilitat d'acceptació és:

$$Q(X \rightarrow Y) = \min\left(1, e^{\frac{-\Delta E}{KT}}\right)$$

Que a més de satisfer les condicions sobre l'estudi quan ΔE positiu, en el cas de que ΔE sigui negatiu, el factor de Boltzmann serà o 1 o major a 1, per tant la transició sempre s'accepta. Veiem que per a la transició inversa Y a X apliquen els mateixos arguments i per tant:

$$Q(Y \rightarrow X) = \min\left(1, e^{\frac{-\Delta E}{KT}}\right)$$

Finalment trobem que:

$$T(X \rightarrow Y)Q(X \rightarrow Y) = \frac{1}{N} \min\left(1, e^{\frac{-\Delta E}{KT}}\right) = T(Y \rightarrow X)Q(Y \rightarrow X)$$

Eficiència de la presa de mesures

Degut a les fortes correlacions temporals amb l'estat inicial i entre configuracions consecutives que presenta la cadena de Markov, de cara a fer mesures mitjanes de les magnituds d'interès, és útil prendre mesures d'una manera adequada per tal de no obtenir mesures de l'error incorrectes. Per a tal, no prendrem cap mesura fins a un nombre MCINI de passos de l'algoritme de Monte Carlo, de cara a esquivar les correlacions amb l'estat inicial; i quan haguem de prendre mesures, les prendrem cada MCD passos per tal de no pertorbar els resultats amb les correlacions entre configuracions consecutives.

Com escollim MCINI i MCD?

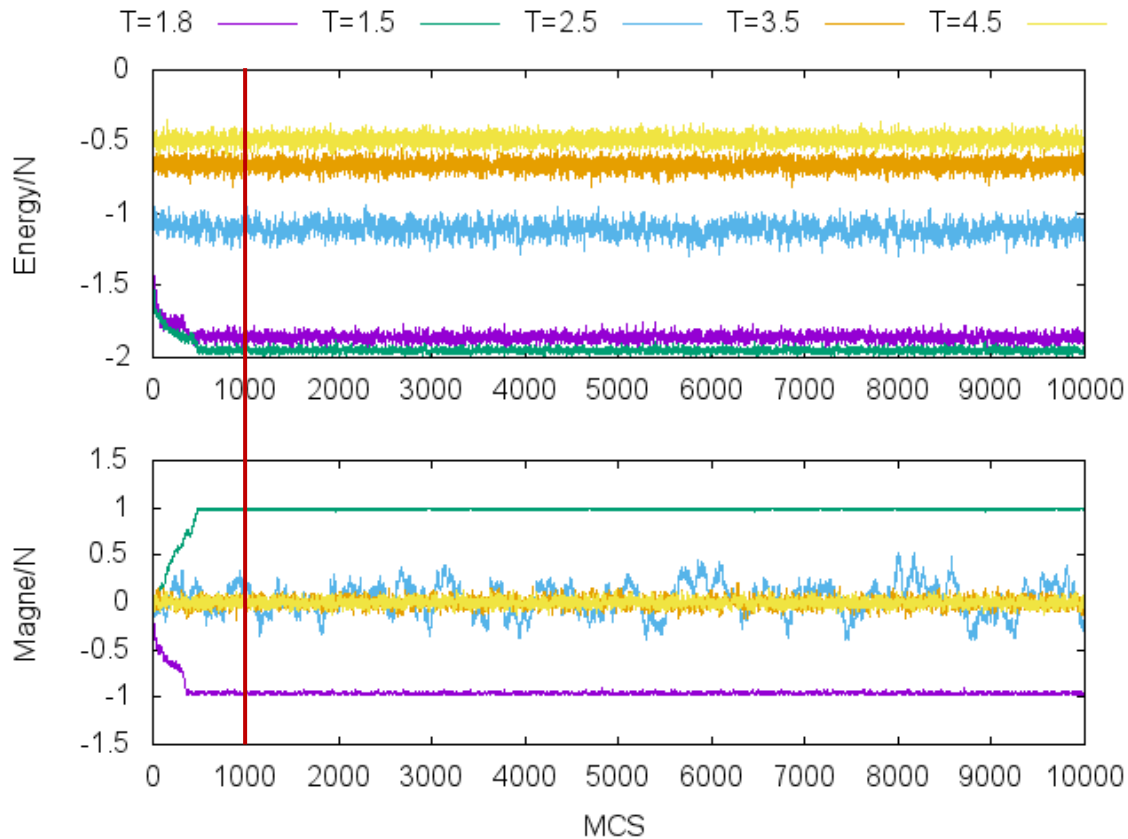


Figura 1. Evolució de la energia i del paràmetre d'ordre per spin en funció del pas de Monte Carlo per a diferents temperatures. La vertical vermella indica l'inici del procés de mesura. Per completitud, $L=48$.

A la *Figura 1* podem veure l'efecte de la dependència en la configuració inicial, observem que a partir d'un cert nombre de passes de MC la majoria d'evolucions semblen aturar el seu canvi relatiu de cara a mantenir el seu promig en un valor estacionari. En el nostre cas podríem prendre $MCINI = 1000$ on ja podem prendre mesures sense errors deguts a les correlacions inicials.

De cara a no prendre mesures consecutives un cop arribats a $MCINI$, volem trobar un MCD adequat de cara a la presa de mesures. A la *Figura 1* podem veure que per a temperatures properes a $T=2.5$, prop del punt crític, s'observen fluctuacions considerables del paràmetre d'ordre, aquesta informació ens resulta de gran valor i tot i no voler prendre mesures de passes consecutives, hem d'agafar un MCD tal que aquestes fluctuacions puguin donar compte a la variància del paràmetre d'ordre, hem agafat $MCD=20$ per tal de satisfer ambdues necessitats.

Com apunt i basat en els resultats representats en la *Figura 1*, podem observar que la rellevància del paper de $MCINI$ i MCD depèn en part de la temperatura. A temperatures baixes ($T=1.5$, $T=1.8$) veiem que saltar $MCINI$ passes a les mesures té un gran valor doncs a diferència de a temperatures més altes, tant l'energia com el paràmetre d'ordre triga un cert nombre de passes a prendre un valor relativament estacionari. De manera que un $MCINI$ massa petit a temperatures baixes pot donar problemes mentre a que a temperatures prou altes, un $MCINI$ baix no resulta especialment significatiu. En canvi, a temperatures al voltant de la crítica ($T \approx 2.5$) veiem que MCD té un paper molt més rellevant que a altres temperatures més llunyanes a aquesta on les fluctuacions del paràmetre d'ordre no són ni molt menys comparables a les de la temperatura crítica on cal ajustar MCD per mesurar un bon error del p.o.

Efecte de la mida del sistema

Un cop executades les simulacions i havent calculat els valors mitjans per a diferents llavors i diferents temperatures de les magnituds d'interès ens dedicarem a veure com afecta la dimensió de la matriu de spins en les diferents variables.

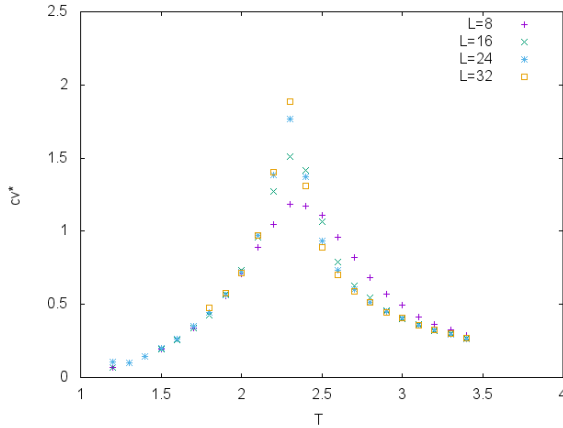


Figura 2. Evolució de la capacitat calorífica amb la temperatura per a diferents dimensions de matriu.

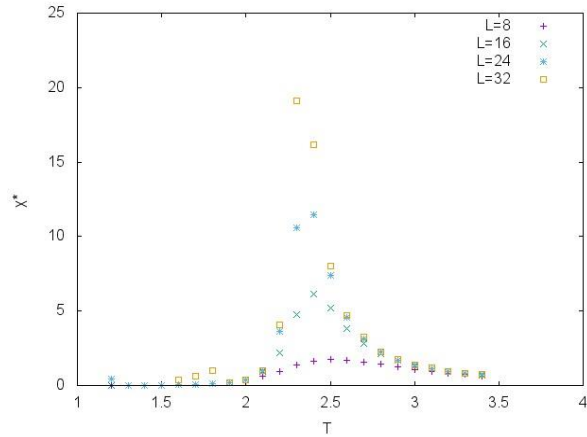


Figura 3. Evolució de la susceptibilitat amb la temperatura per a diferents dimensions de matriu.

Al estudiar els resultats ens trobem amb que els pics presents en ambdues magnituds i la seva posició sobre l'eix de temperatures depenen de la dimensió de la matriu. A mesura que augmentem L , el pic es desplaça cap a la esquerra i augmenta en alçada.

Tant la capacitat calorífica com la susceptibilitat són funcions resposta que esperem que divergeixin en una transició de fase, el pic que trobem en ambdues magnituds doncs, esperem que en el límit termodinàmic, és a dir amb una matriu de spins de dimensió infinita, creixi fins a l'infinit i que sigui infinitament estret, això explica els resultats que trobem en créixer L , ja que cada cop s'apropa més al límit termodinàmic. La posició del pic sobre l'eix de temperatures, la estudiarem posteriorment i veurem la rellevància que té de cara a conèixer la temperatura crítica.

De cara a trobar la temperatura del màxim d'ambdues magnituds hem buscat un polinomi d'interpolació que s'ajusti als resultats al voltant de la temperatura del pic i hem buscat la temperatura del màxim del polinomi. Veiem a les Figura 4, Figura 5, Figura 6 i Figura 7 aquests polinomis:

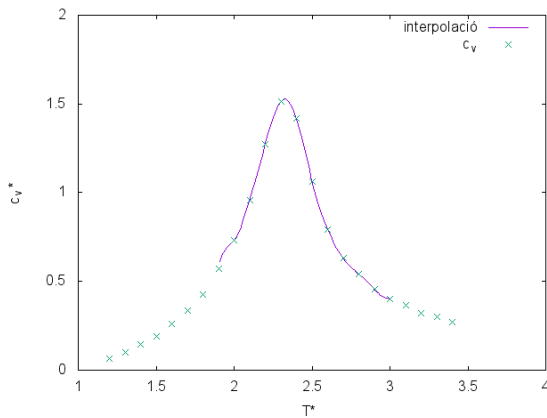


Figura 4. Interpolació de la capacitat calorífica. $L=16$

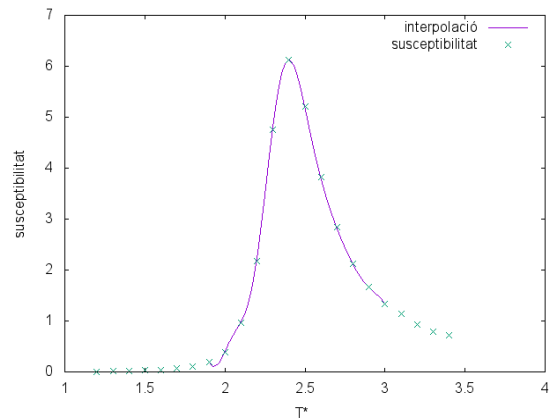
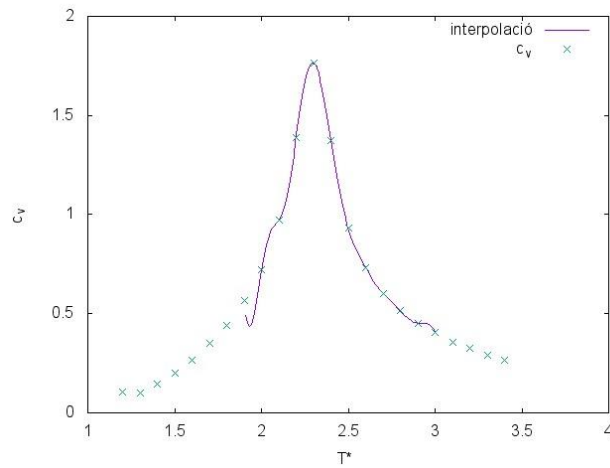
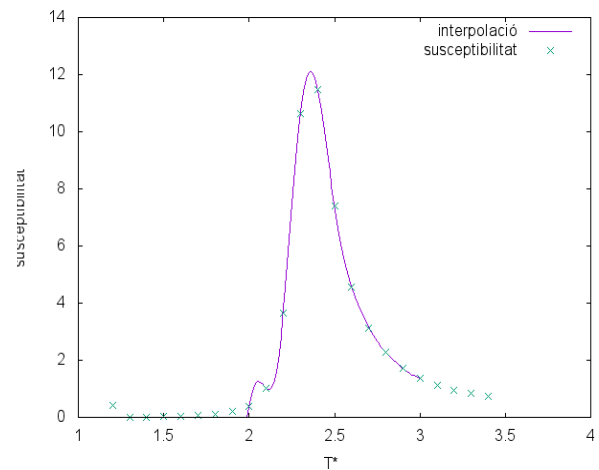


Figura 5. Interpolació de la susceptibilitat. $L=16$

Figura 6. Interpolació de la capacitat calorífica. $L=24$ Figura 7. Interpolació de la susceptibilitat. $L=24$

Presentem els resultats trobats per la interpolació a la *Taula 1*.

Taula 1. Temperatura del pic de la capacitat calorífica i de la susceptibilitat..

L	$T_{cL} (C_v)$	$T_{cL} (\chi)$
8	2.3289	2.5159
16	2.3036	2.4059
24	2.2959	2.3619
32	2.2929	2.3319

També resulta d'interès estudiar l'evolució de la energia i del valor absolut de la magnetització en funció de la temperatura per a diferents dimensions de la matriu:

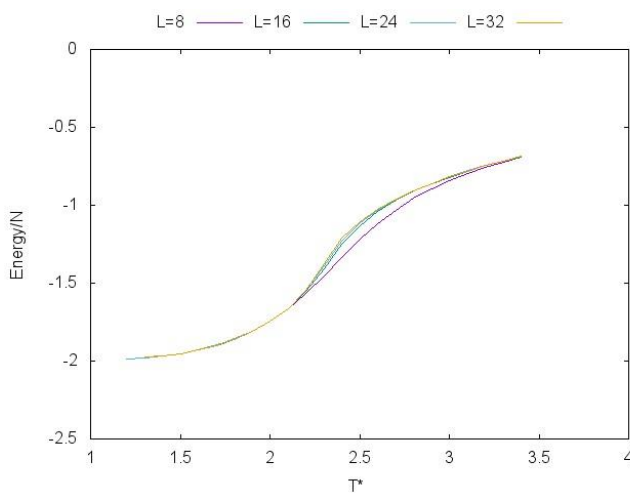


Figura 8. Evolució de la energia per spin en funció de la temperatura per a diferents L .

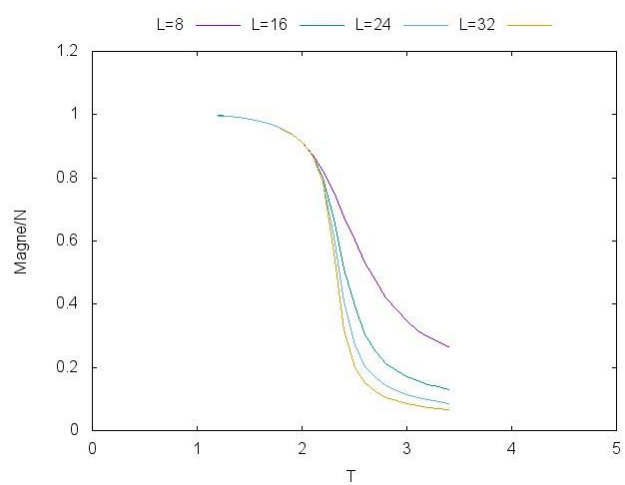


Figura 9. Evolució del valor absolut de la magnetització per spin en funció de la temperatura per a diferents L .

A partir de les *Figura 8* i *Figura 9* i contrastant amb la *Figura 1*, veiem que el que podem esperar en cas d'augmentar prou la dimensió de la matriu de spins de cara a apropar-nos al límit termodinàmic és que a temperatures baixes l'energia per spin s'aproximi a -2 i que temperatures altes s'apropi a -0.5. De la mateixa manera el que podem esperar del valor absolut de la magnetització és que a temperatures baixes s'apropi al valor 1 (paràmetre d'ordre de valor 1 o -1) i que a temperatures altes (per sobre de T_c) el valor absolut de la magnetització s'apropi a 0.

Estudi del punt crític

El nostre objectiu ara és calcular l'exponent crític γ de la susceptibilitat magnètica. Abans però és útil estudiar T_{cL} , la temperatura dels pics de les funcions resposta.

Prenent $\nu=1$ per simplificar el problema sabem que:

$$T_{cL} = T_c + DL^{-\frac{1}{\nu}} = T_c + D \cdot \frac{1}{L}$$

Aleshores si a partir de la *Taula 1* fem una regressió lineal de T_{cL} en funció de $1/L$ i en cerquem la ordenada a l'origen, trobarem T_c . Representem a les *Figura 10* i *Figura 11* els resultats i mostrem a la *Taula 2* els paràmetres numèrics:

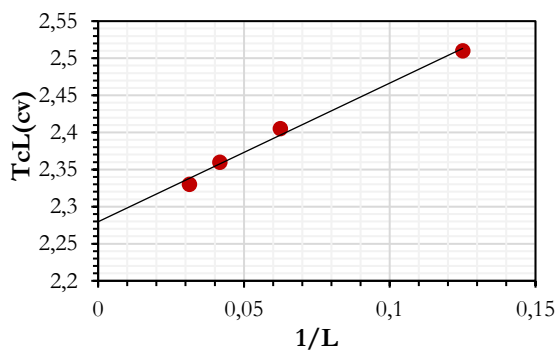


Figura 10. En vermell evolució de T_{cL} de la capacitat calorífica en funció de $1/L$. Línia negra: recta de regressió lineal. $R=0.991$

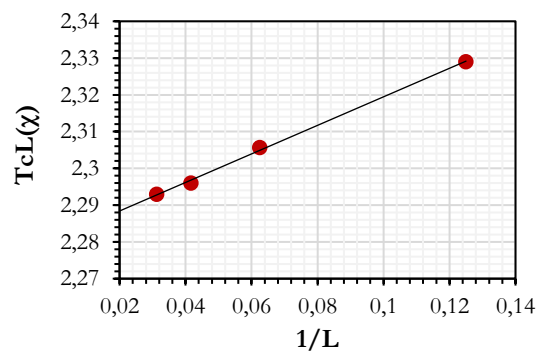


Figura 11. En vermell evolució de T_{cL} de la susceptibilitat magnètica en funció de $1/L$. Línia negra: recta de regressió lineal. $R=0.998$

Taula 2. Temperatura crítica T_c calculada per regressió lineal identificant la ordenada a l'origen per als blocs de dades associats a la capacitat calorífica i a la susceptibilitat magnètica.

dades	T_c	δT_c
c_v	2.2801	0.0008
χ	2.280	0.009

Ara ens dediquem a trobar l'exponent crític de la susceptibilitat magnètica γ a partir del comportament de la susceptibilitat a prop del punt crític. Pel que fa al nostre cas, estudiarem la susceptibilitat i el seu valor just al pic. El comportament de la susceptibilitat s'espera:

$$\chi(T_{cL}) = BL^{\frac{\gamma}{\nu}}$$

$$\log(\chi(T_{cL})) = \log(B) + \frac{\gamma}{\nu} \log(L) = \log B + \gamma \log(L)$$

Per tant estudiar el valor que pren el logaritme de la susceptibilitat al seu pic per diferents L , ens permet trobar l'exponent γ a partir d'una regressió sobre el conjunt de dades $\log(\chi(T_{cL})) - \log(L)$. Mostrem els valors dels pics a la *Taula 3*:

Taula 3. Valors del pic de la susceptibilitat per a cada L i els respectius logaritmes.

L	$\log(L)$	$\chi(T_{cL})$	$\log(\chi(T_{cL}))$
8	2.0794	1.7548	0.5623
16	2.7725	6.1181	1.8112
24	3.17805	12.1032	2.4934
32	3.4657	20.3987	3.0155

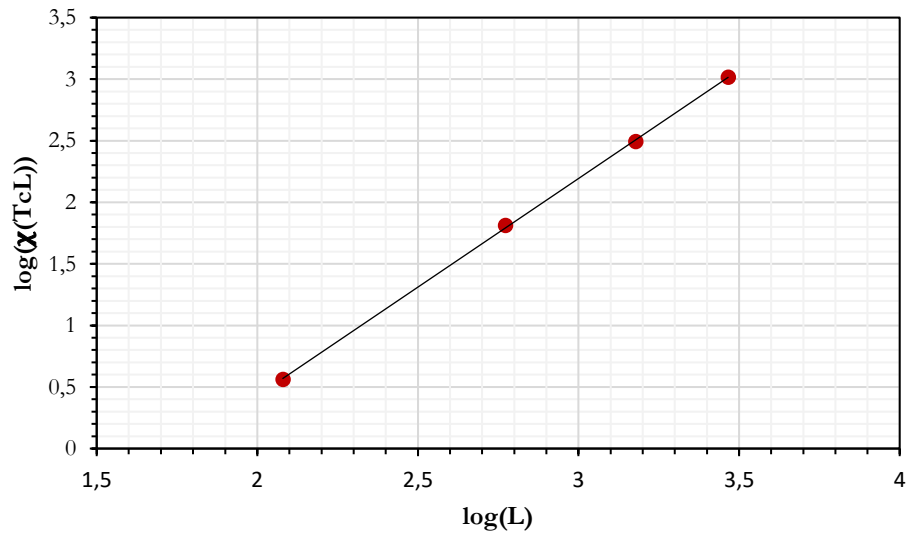


Figura 12. Evolució del logaritme de la susceptibilitat en funció del logaritme de L . $R = 0.9998$.

A partir de la regressió lineal podem trobar l'exponent crític γ amb la pendent de la recta:

$$\gamma = 1.76 \pm 0.02$$

A partir d'aquest punt resulta senzill calcular els demés exponents crítics.

Compatibilitat dels resultats

En aquest apartat ens dedicarem a comparar els resultats trobats de T_c i γ amb els valors teòrics tabulats per a una retícula quadrada dels models Ising 2D i MFT.

Taula 4. Valors de T_c experimental, teòric predit per Ising 2D i teòric predit per MFT.

Exp	Ising 2D	MFT
2.280 ± 0.009	$\frac{2}{\log(1 + \sqrt{2})} \approx 2.269$	2.000

Podem veure que:

$$|T_c(exp) - T_c(Ising\ 2D)| = 0,011 < 2\delta T_c(exp)$$

Per tant trobem que el resultat experimental és plenament compatible amb el predit pel model Ising 2D teòricament. En canvi trobem que la T_c predita per MFT és incompatible amb el nostre resultat. Aquest resultat no és sorprenent doncs el model de camp mitjà és útil de cara a donar informació de les transicions de fase i descriure diagrames de fase lluny del punt crític, no obstant falla quantitativament de cara a donar resultats numèrics consistents amb les correlacions existents en el sistema, de manera que no esperem trobar resultats numèrics compatibles entre els models Ising 2D i MFT.

Taula 5. Valors de γ experimental, teòric predit per Ising 2D i teòric predit per MFT.

Exp	Ising 2D	MFT
1.76 ± 0.02	$\frac{7}{4} = 1.75$	1.0

Veiem de nou que:

$$|\gamma(exp) - \gamma(Ising\ 2D)| = 0,01 < \delta\gamma(exp)$$

De manera que hem trobat un resultat de l'exponent crític de la susceptibilitat magnètica compatible amb el teòric predit pel model d'Ising 2D. Un altre cop veiem que el nostre resultat no és compatible amb el predit per MFT cosa que esperàvem.

Additional: Test Finite Size Scaling

Ara mostrem el test de FSS que hem dut a terme sobre la susceptibilitat magnètica. Conegut els exponents crítics γ i ν així com la dependència de la susceptibilitat magnètica amb la dimensionalitat del sistema, s'espera que l'escalament de la susceptibilitat per a les diferents L suposi el col·lapse de totes les figures en una mateixa evolució de la susceptibilitat en funció de la temperatura. Representem a la *Figura 13* la susceptibilitat en funció de la temperatura, ambdues escalades per dimensionalitat:

$$T_{scaled} = \frac{1}{L^\nu(T - T_c)}$$

$$\chi_{scaled} = \frac{\chi}{L^\gamma}$$

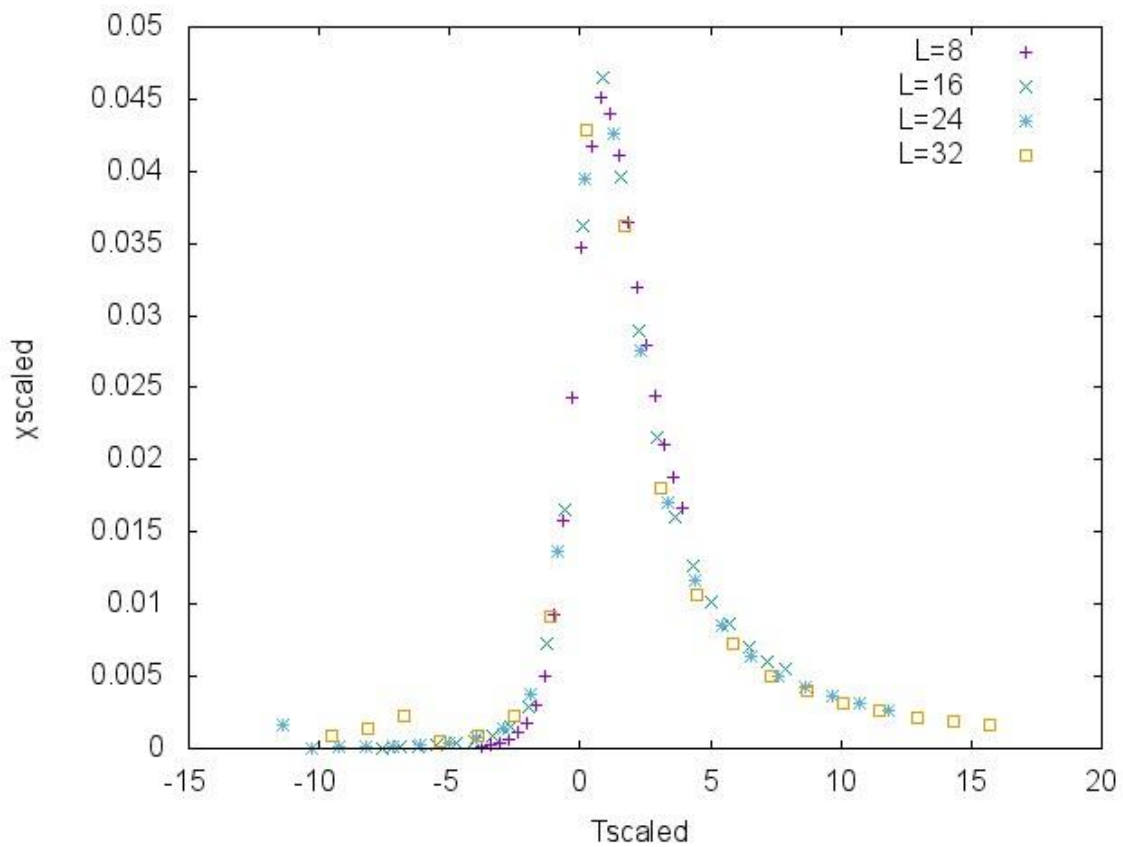


Figura 13. Susceptibilitat en funció de la temperatura, ambdues escalades per a diferents L . S'observa el col·lapse de les corbes.