

Trabajo Final - Física Computacional

Carlos J. Cattena

Viernes 5 de Agosto

Se estudian algunas propiedades básicas del modelo XY clásico sobre una red bidimensional rectangular mediante métodos Monte Carlo, utilizando el algoritmo de Metropolis.

1 El Modelo XY

El modelo XY 2D describe un sistema de espines clásicos (de longitud unitaria) restringidos a un espacio bidimensional, con interacciones de primeros vecinos. Cada espín i es descrito por un vector en el plano, cuyas coordenadas son parametrizadas respecto de un único grado de libertad: el ángulo respecto de un eje arbitrario, $\mathbf{s}_i = (\cos(\phi_i), \sin(\phi_i))$. En el presente trabajo se estudian las propiedades básicas del sistema para el caso en el cual los espines son dispuestos sobre una red rectangular. El Hamiltoniano del sistema está dado por:

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j = J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\phi_i - \phi_j) \quad (1)$$

donde $\langle i,j \rangle$ denota sumas sobre i, j a primeros vecinos. Cada uno de los estados posibles del sistema tiene asociada una probabilidad determinada por el factor de Boltzmann,

$$p = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) \quad (2)$$

donde E es la energía del sistema, T es la temperatura, k_B es la constante de Boltzmann y Z es un factor de normalización. El Hamiltoniano dado por la ecuación 1 resulta invariante ante una rotación (continua) global de todos los espines, es decir, posee una simetría global continua $O(2)$.

De acuerdo con el teorema de Mermin-Wagner [1], la simetría global $O(2)$ del modelo XY no puede romperse espontáneamente, por lo que el orden de largo alcance se ve impedido por las fluctuaciones, a cualquier temperatura finita ($T > 0$) [5]. Por ende, este sistema carece de una fase ordenada a bajas temperaturas, de lo cual podría inferirse, en principio, que el modelo XY bidimensional no presenta transición de fases. Sin embargo, el principal interés de este sistema radica en que exhibe un tipo muy especial de transición de fase, de orden infinito, cuya naturaleza ha sido ampliamente descrita por Kosterlitz y Thouless [2]. Por encima de un valor crítico de la temperatura, T_{KT} , la función de correlación de los espines decae exponencialmente, con una longitud característica ξ ,

$$\langle \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j \rangle \propto \exp\left(-\frac{r}{\xi}\right) \quad (3)$$

mientras que a temperaturas por debajo del valor crítico el sistema de espines presenta un orden de *cuasi* largo alcance, donde correlación decae conforme a una ley de potencias:

$$\langle \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j \rangle \propto r^{-\eta} \quad (4)$$

El módulo de helicidad es una medida de la reacción del sistema ante una torsión [7] y puede ser definido como la derivada segunda de la energía libre respecto de ϕ , para $\phi = 0$,

$$\Upsilon(T) = -\frac{\partial^2 \ln Z(\phi)}{\partial \phi^2} \Big|_{\phi=0} \quad (5)$$

y puede calcularse numéricamente mediante la expresión [4],

$$\Upsilon(T) = -\frac{1}{2L^2} \langle E \rangle - \frac{J}{k_B T N^2} \left\langle \left(\sum_{\langle i,j \rangle} \sin(\phi_i - \phi_j) \mathbf{r}_{i,j} \cdot \hat{\mathbf{x}} \right)^2 \right\rangle \quad (6)$$

donde $\mathbf{r}_{i,j}$ es el vector desde el espín i al j y $\hat{\mathbf{x}}$ es una dirección fija. En el caso del presente trabajo, sólo se estudia un sistema isotrópico, por lo que la dirección asociada al versor $\hat{\mathbf{x}}$ puede considerarse arbitraria.

Si bien no existe un orden de largo alcance para bajas temperaturas, $0 < T < T_{KT}$, el módulo de helicidad del sistema es diferente de cero. El módulo de helicidad exhibe un salto discontinuo justo en la transición de fase para un sistema infinito. Existe una relación rigurosa entre la temperatura de transición y el módulo de helicidad, justo a esta temperatura [8],

$$\Upsilon(T_{KT}) = \frac{2T_{KT}}{\pi} \quad (7)$$

Para los sistemas de tamaño finito, el módulo de helicidad al valor crítico se aproxima al valor asociado al sistema infinito, T_{KT} , con una corrección de tipo logarítmica sobre el tamaño del sistema [9]:

$$\Upsilon(T_{KT}, L) = \Upsilon(T_{KT}, \infty) \left(1 + \frac{1}{2 \ln(L) + c} \right) \quad (8)$$

donde c es un parámetro dependiente del sistema. Además, mediante el análisis estándar de la hipótesis de scaling, se puede mostrar que,

$$\Upsilon(T, L) \left(1 + \frac{1}{2 \ln(L) + c} \right)^{-1} = f \left(\ln(L) - a/(T - T_{KT})^{1/2} \right) \quad (9)$$

donde f es la función de escaleo y a es un parámetro no universal, al igual que c . Las curvas para diferentes tamaños colapsan en la misma función.

La transición de Kosterlitz-Thouless es de naturaleza topológica, determinada por el comportamiento de defectos topológicos, comúnmente denominados vórtices, los cuales están asociados a puntos en la red alrededor de los cuales los espines “giran” un número entero de veces. Los vórtices se manifiestan en pares a bajas temperaturas y, justo en la transición, se desligan [2, 3].

2 Método Monte Carlo

Las simulaciones Monte Carlo permiten obtener valores aproximados para promedios sobre ensambles estadísticos. En muchos casos, el número de conFiguraciones posibles que un sistema puede adoptar es muy alto, o incluso infinito para el caso del modelo XY clásico. Por ello, evaluar directamente la función partición o calcular los promedios con métodos numéricos estándar se vuelve prácticamente imposible. En los métodos Monte Carlo, se busca obtener un número finito de conFiguraciones suficientemente representativas, implementando un “muestreo de importancia” mediante el cual las conFiguraciones creadas poseen la distribución estadística deseada [6], de acuerdo con la ecuación 2:

$$P(S_i) = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{H(S_i)}{k_B T}\right) \quad (10)$$

para un conjunto $\{S_i\}$ de conFiguraciones, donde $H(S_i)$ es la energía de la conFiguración S_i . Aunque lo ideal es que las conFiguraciones del conjunto $\{S_i\}$ sean independientes, generalmente esto resulta impracticable. Por ello, la práctica usual es utilizar algoritmos que generen una “cadena de Markov” de conFiguraciones, en los cuales cada conFiguración S' se obtiene aleatoriamente a partir de una conFiguración previa S . Si la probabilidad de transición, $W(S \rightarrow S')$, se elige adecuadamente, entonces luego de un número suficiente de iteraciones las conFiguraciones estarán distribuidas de acuerdo con la ecuación 10, independientemente del punto de partida.

En los métodos Monte Carlo, además, la probabilidad de transición debe cumplir dos condiciones indispensables: *Estabilidad* $\sum_S P(s)W(S \rightarrow S') = P(S)$ y *ergodicidad*, $\exists n/W^n(S \rightarrow S') > 0$ para S y S' arbitrarios. La condición de estabilidad suele cumplirse requiriendo una condición más restrictiva, denominada “balance detallado”, $P(S)W(S \rightarrow S') = P(S')W(S' \rightarrow S)$

2.1 Algoritmo de Metropolis

El algoritmo de Metropolis permite obtener de una forma muy simple la probabilidad de transición $W(S \rightarrow S')$, dividiendo su cálculo en dos partes:

$$W(S \rightarrow S') = T(S \rightarrow S')A(S \rightarrow S') + \left(1 - \sum_X T(S \rightarrow X)A(S \rightarrow X)\right) \delta(S, S') \quad (11)$$

donde $T(S \rightarrow S')$ es la *probabilidad de proponer* una transición de la conFiguración S a la conFiguración S' y $A(S \rightarrow S')$ es la *probabilidad de aceptar* esta propuesta. Por un lado, T satisface $\sum_{S'} T(S \rightarrow S') = 1$ y $T(S \rightarrow S') = T(S' \rightarrow S)$. Por su parte, A se elige según,

$$A(S \rightarrow S') = \min\left(1, \exp\left[-\frac{H(S') - H(S)}{k_B T}\right]\right) \quad (12)$$

lo cual implica que, si la conFiguración propuesta posee menor energía que la actual se acepta siempre, de lo contrario se acepta con probabilidad $\exp[(H(S) - H(S'))/k_B T]$.

Realizar esta secuencia una vez por cada espín de la red, constituye un “paso de Monte Carlo” (MCS). En este trabajo, los MCS se han realizado en forma secuencial, no aleatoria.

2.2 Errores estadísticos

Una estimación Monte Carlo para un observable dado A (en equilibrio termodinámico), resulta, de acuerdo con lo expresado en la sección previa:

$$\langle A \rangle_{MC} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A_i \quad (13)$$

donde A_i es el observable A evaluado en la i -ésima configuración y N es el número total de configuraciones generadas. Si las configuraciones fueran independientes, el error estadístico asociado sería simplemente $\delta A = \sqrt{\frac{\sigma_A^2}{N}}$, donde σ_A es la varianza, dada por $\sigma_A^2 = \langle A^2 \rangle_{MC} - \langle A \rangle_{MC}^2$. En el caso contrario, las configuraciones subsiguientes resultan correlacionadas,

$$\Gamma_A(t) = \langle A_s A_{s+t} \rangle - \langle A \rangle^2 \neq 0 \quad (14)$$

sin embargo, si t es suficientemente grande, las correlaciones decaerán exponencialmente, $\Gamma_A(t) \propto \exp(-t/\tau_A)$, y el error estadístico adecuado puede obtenerse de la expresión:

$$\delta A = \sqrt{\frac{2\tau_A \sigma_A^2}{N}} \quad (15)$$

donde τ está dado por $1/2 + \sum_{t=1}^{\infty} \Gamma_A(t)/\sigma_A^2$.

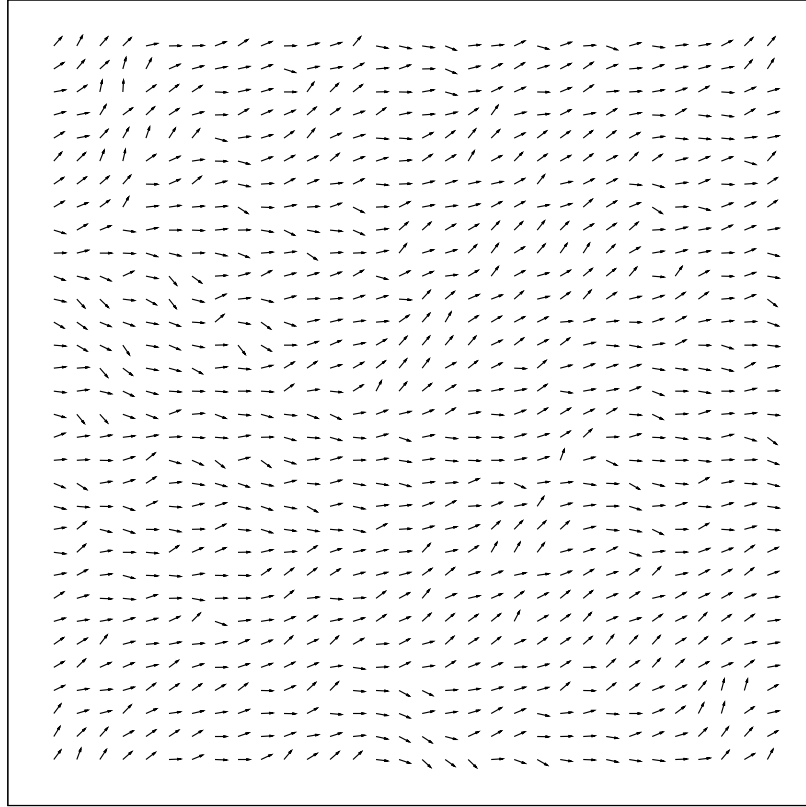


Figura 3.1: Captura de imagen para uno de los pasos de Monte Carlo, a la temperatura $T = 0.24$. El tamaño del sistema es 32×32 , y se partió de una condición inicial ordenada. Esta imagen es una de las componentes de la película en: http://dl.dropbox.com/u/29708721/xy_CJCattena.avi

3 Resultados Numéricos

A partir de esta sección, todas las unidades expresadas han sido reducidas (salvo que se aclare explícitamente lo contrario), de acuerdo con: $E \rightarrow E/J$, $T \rightarrow k_b T/J$, etc. Además se tomó $J = 1$ y se utilizó el generador de números (pseudo)aleatorio “Mersenne Twister”.

A continuación se presentan una serie de resultados numéricos, obtenidos mediante el método de Monte Carlo, haciendo uso del algoritmo de Metropolis. Se obtuvieron diferentes cantidades de interés del Modelo XY en función de la temperatura: Función de correlación, Energía, Calor específico y Módulo de Helicidad. Se consideraron sistemas de diferentes tamaños, y en la mayor parte de los resultados sólo se consideró como condición inicial al sistema ordenado y de contorno periódicas, por ser de las de mayor interés. Sin embargo, se eligieron algunos casos particulares con condición inicial desordenada y condiciones de contorno abiertas, para comparación.

En todos los casos, la descripción completa de los parámetros utilizados se encuentra al pie de cada una de las Figuras.

A modo ilustrativo, han sido capturados 1000 estados de un sistema de tamaño 32×32 durante la realización del método de Monte Carlo, para diferentes temperaturas y con las imágenes asociadas se construyó una película de 110 segundos de duración. La misma se puede descargar de:

http://dl.dropbox.com/u/29708721/xy_CJCattena.avi

Una captura de la misma, puede apreciarse en la Figura 3.1, realizada para un paso Monte Carlo arbitrario a la temperatura $T = 0.24$.

3.1 Función de Correlación

Tal como se describe en la primera sección del informe, a bajas temperaturas los espines tienden a estar alineados, a pesar de que no puede existir un orden de largo alcance. La correlación muestra un comportamiento del tipo ley de potencias, con un exponente que depende de la temperatura. Esta situación fue referida como “orden de cuasi largo alcance”.

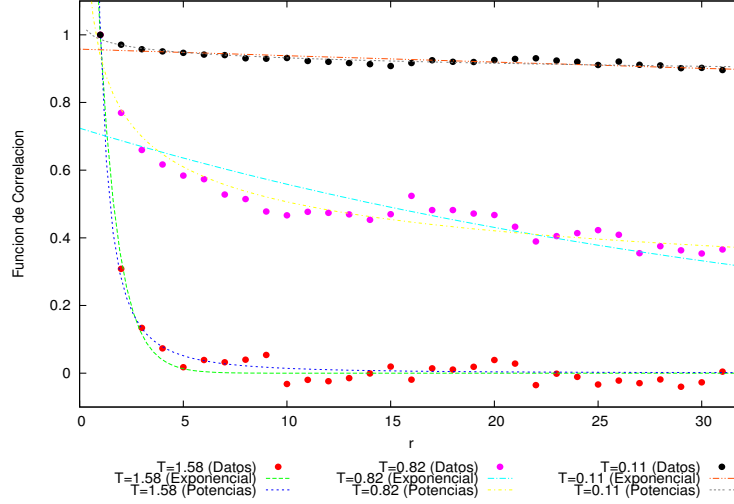


Figura 3.2: Ajuste exponencial y de potencias de la función de correlación a diferentes temperaturas, para un sistema de tamaño 64×64 . En todos los casos, se partió de un sistema ordenado, se realizaron 1000 MCS de equilibración y luego 20000 MCS cada 70 de los cuales se tomaron las mediciones. Estos pasos se realizaron para 50 temperaturas diferentes, en el intervalo $[0,2]$.

Para contabilizar la dependencia con la temperatura del exponente de decaimiento de la función de correlación, se realizó un ajuste (utilizando gnuplot) de la misma a para 100 temperaturas diferentes en el rango $[0,2]$, para un sistema de tamaño 64×64 . La mayor distancia posible (expresada en términos de la unidad de red, a) entre dos espines independientes es $L/2a$, en este caso: 32. En todos los casos sólo se consideraron condiciones de contorno periódicas y se partió de una condición inicial ordenada. Los resultados se muestran en la Figura 3.3. También se muestra allí el valor esperado de $\eta = 0.25$ para la temperatura de transición [5]. De la intersección de esta línea con los valores de η obtenidos se puede hacer una estimación de la T_{KT} .

Por encima de la temperatura crítica, la función de correlación muestra un comportamiento exponencial. De la misma forma que para la ley de potencias, se realizó un ajuste exponencial de la función de correlación a diferentes temperaturas, y los resultados se exhiben en la Figura 3.4. Como puede verse, el valor de ξ tiene un comportamiento divergente a $T = T_{KT}$.

Finalmente y a modo ilustrativo, se realizó una película (utilizando gnuplot y ffmpeg), con una duración aproximada de 50 segundos, en la que se puede apreciar el comportamiento de la función de correlación a diferentes temperaturas y la forma en la que ajustan la función exponencial y la ley de potencias. Para visualizarla, hay que acceder a:

http://dl.dropbox.com/u/29708721/XY_FCorrelacion_CJCattena.avi

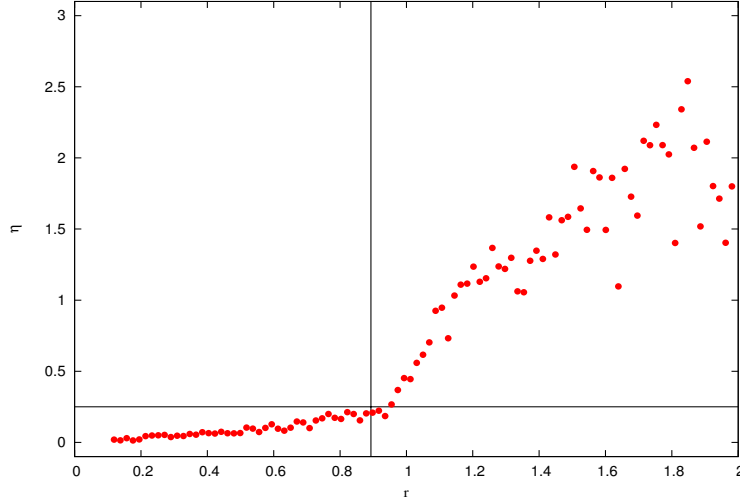


Figura 3.3: Resultados del ajuste del exponente η a diferentes temperaturas. Para obtener cada uno de los puntos que se muestran en la Figura, primero se tomaron 1000 MCS para equilibrar el sistema. Luego se realizaron 20000 MCS y las mediciones se registraron cada 70 MCS. Se tomaron 100 temperaturas diferentes en el intervalo $[0,2]$. La línea horizontal está situada sobre $\eta = 0.25$ y la vertical muestra $T = 0.8933$

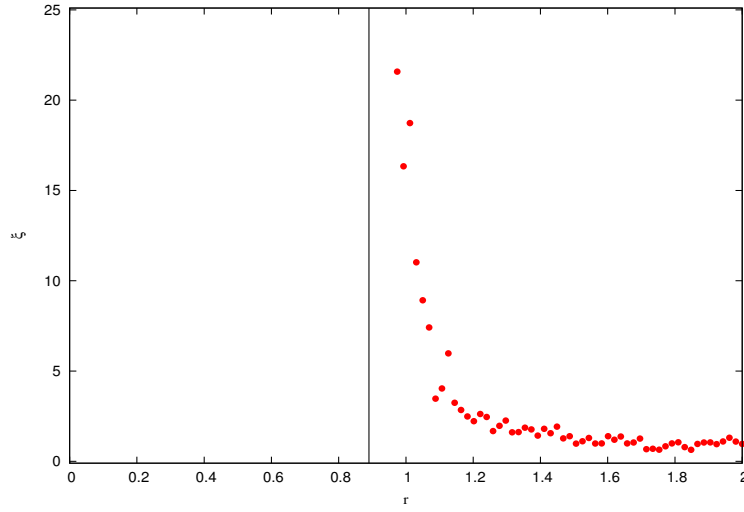


Figura 3.4: Resultados del ajuste de la longitud de correlación a diferentes temperaturas para un decaimiento exponencial. Para obtener cada uno de los puntos que se muestran en la Figura, primero se tomaron 1000 MCS para equilibrar el sistema. Luego se realizaron 20000 MCS y las mediciones se hicieron cada 70 MCS. Se registraron 100 temperaturas diferentes en el intervalo $[0,2]$. La línea horizontal marca el valor $T = 0.8933$.

3.2 Energía y Calor específico

La dependencia de la energía del sistema con la temperatura se obtuvo para sistemas de diferentes tamaños, para diferentes condiciones iniciales y de contorno. Si bien los datos están altamente correlacionados, se consideraron las mediciones cada 70 MCS como descorrelacionadas, a

partir del análisis de la función de autocorrelación de la energía (Figura 3.5) y buscando limitar el número total de pasos de Monte Carlo, debido a que las simulaciones consumen un tiempo importante.

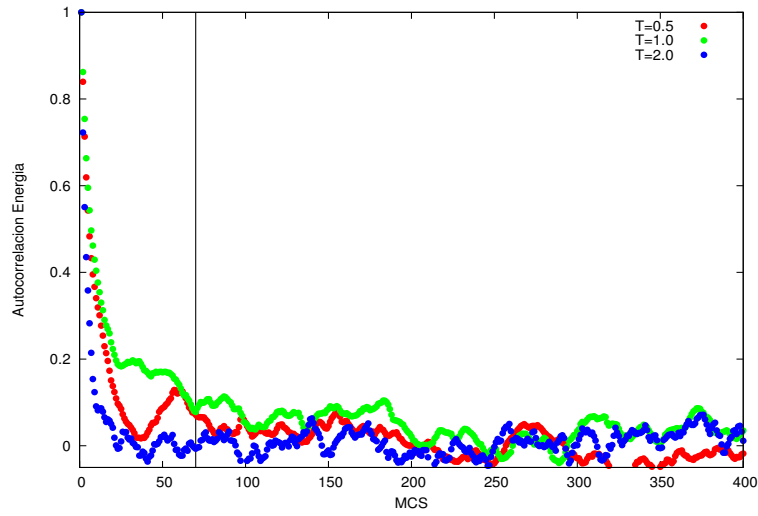


Figura 3.5: Función de autocorrelación para la energía del sistema, en función MCS, para tres teperaturas diferentes: $T = 0.5, 1.0, 2.0$. La línea vertical marca el valor de 70. El fitting exponencial arroja un valor aproximado para la constante de decaimiento de $\lambda = 35$, tras lo cual, $70 \approx 1 + 2\lambda$.

La Figura 3.6 muestra el comportamiento de la energía para sistemas de tamaños diferentes, en todos los casos con condiciones de contorno periódicas y partiendo de una condición inicial ordenada.

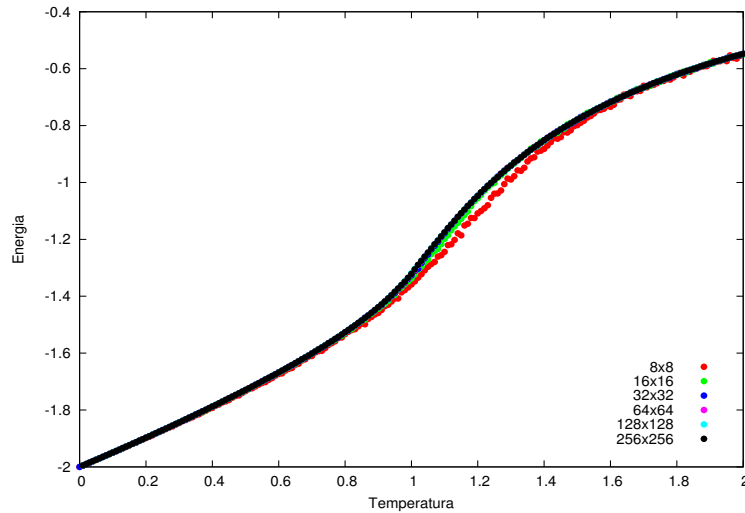


Figura 3.6: Energía en función de la temperatura para sistemas de diferentes tamaños: 8×8 , 16×16 , 32×32 , 64×64 , 128×128 y 256×256 . Los resultados corresponden a condiciones de contorno periódicas y condición inicial ordenada, para 200 temperaturas diferentes en el intervalo $[0, 2]$. En todos los casos, para cada temperatura se tomaron 1000 MCS para equilibrar el sistema y luego 50000 MCS, con mediciones cada 70 MCS.

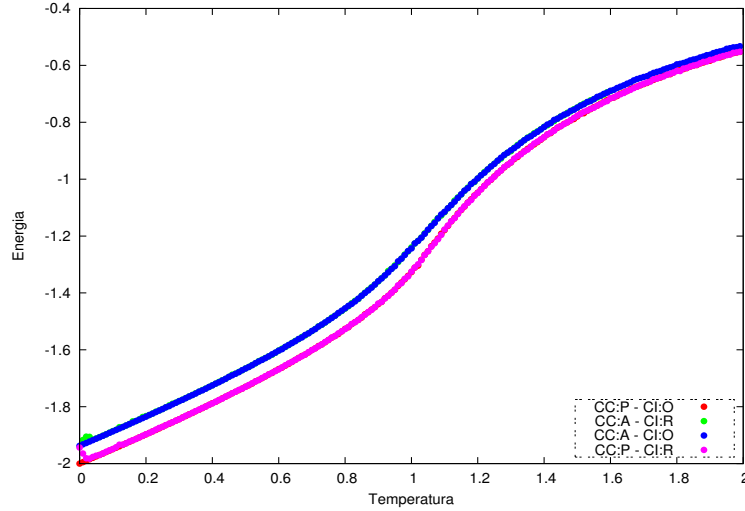


Figura 3.7: Energía en función de la temperatura para diferentes combinaciones de condiciones iniciales y de contorno, para un sistema de tamaño 32×32 . Los puntos corresponden a 200 temperaturas diferentes en el intervalo $[0,2]$. En todos los casos, para cada temperatura se tomaron 1000 MCS para equilibrar el sistema y luego 50000 MCS, con mediciones cada 70 MCS.

A modo de comparación la Figura 3.7 muestra la energía en función de la temperatura para un sistema de tamaño 32×32 para diferentes combinaciones de condiciones iniciales y de contorno. Tal como se espera, el comportamiento de la energía del sistema como función de la temperatura no depende de las condiciones iniciales.

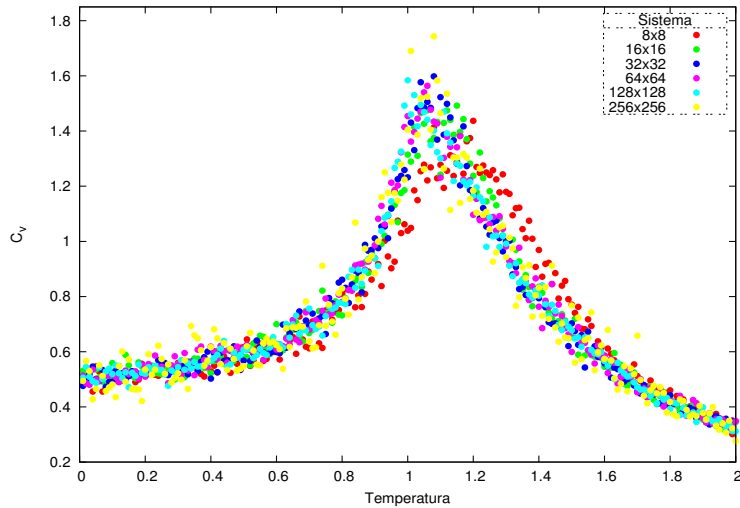


Figura 3.8: Calor específico en función de la temperatura para sistemas de diferentes tamaños: 8×8 , 16×16 , 32×32 , 64×64 , 128×128 y 256×256 . Los resultados corresponden a condiciones de contorno periódicas y condición inicial ordenada, para 200 temperaturas diferentes en el intervalo $[0,2]$. En todos los casos, para cada temperatura se tomaron 1000 MCS para equilibrar el sistema y luego 50000 MCS, con mediciones cada 70 MCS.

La Figura 3.8 muestra el calor específico para diferentes tamaños de sistema, obtenido de

acuerdo con el teorema de fluctuación-disipación:

$$\frac{c_v}{k_B} = \frac{1}{NT^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (16)$$

A medida que crece el tamaño del sistema, se observa un máximo que se ubica cada vez más cerca de la temperatura crítica esperada para el límite termodinámico.

3.3 Modulo de Helicidad

La Figura 3.9 muestra los resultados numéricos del método Monte Carlo para el modulo de helicidad del modelo XY bidimensional en función de la temperatura, donde las condiciones de contorno fueron periódicas y la condición inicial correspondió a un sistema ordenado. Al pie de la imagen se referencian los parámetros utilizados.

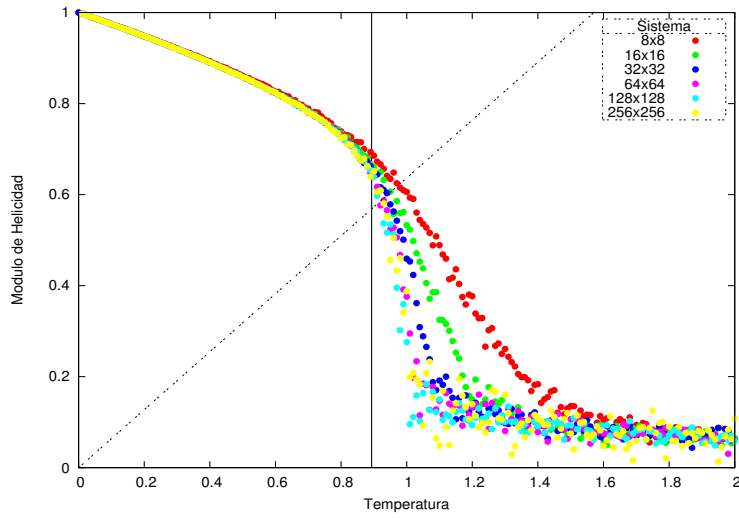


Figura 3.9: Módulo de helicidad en función de la temperatura para sistemas de diferentes tamaños: 8×8 , 16×16 , 32×32 , 64×64 , 128×128 y 256×256 . Los resultados corresponden a condiciones de contorno periódicas y condición inicial ordenada, para 200 temperaturas diferentes en el intervalo $[0, 2]$. En todos los casos, para cada temperatura se tomaron 1000 MCS para equilibrar el sistema y luego 50000 MCS, con mediciones cada 70 MCS.

Como puede verse, a medida que el tamaño del sistema crece, el módulo de helicidad tiende a hacer más abrupta su caída de tal forma que el salto esperado para el límite termodinámico es alcanzado muy lentamente como función del tamaño del sistema. En el gráfico 3.9 también se muestra una línea vertical correspondiente a la temperatura de transición conocida para el sistema infinito, $T_{KT} \approx 0.8933$ [10].

En la Figura 3.10 se muestran los valores estimados para la temperatura crítica de los sistemas de diferentes tamaños, a partir de los puntos de intersección entre la línea con pendiente $2/\pi$ y el módulo de helicidad. Claramente el valor de T_{KT} se aproxima al valor teórico correspondiente al límite termodinámico a medida que el tamaño del sistema crece.

Finalmente, se trata de mostrar la universalidad del salto del módulo de helicidad en función de la temperatura, para cuando esta última toma el valor crítico. Utilizando la ecuación 9 se intenta realizar el colapso de las curvas asociadas al módulo de helicidad, para diferentes tamaños, eligiendo los parámetros a y c de forma tal que las curvas colapsen lo mejor posible.

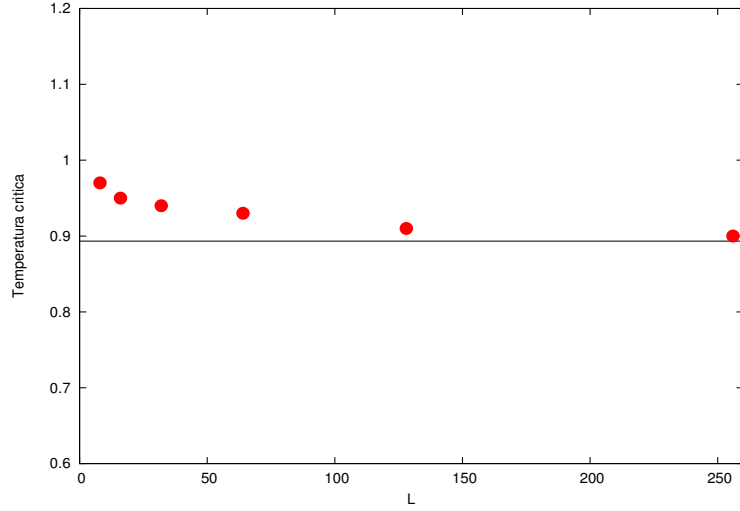


Figura 3.10: Temperatura crítica estimada para diferentes tamaños del sistema, de acuerdo con la Figura 3.9.

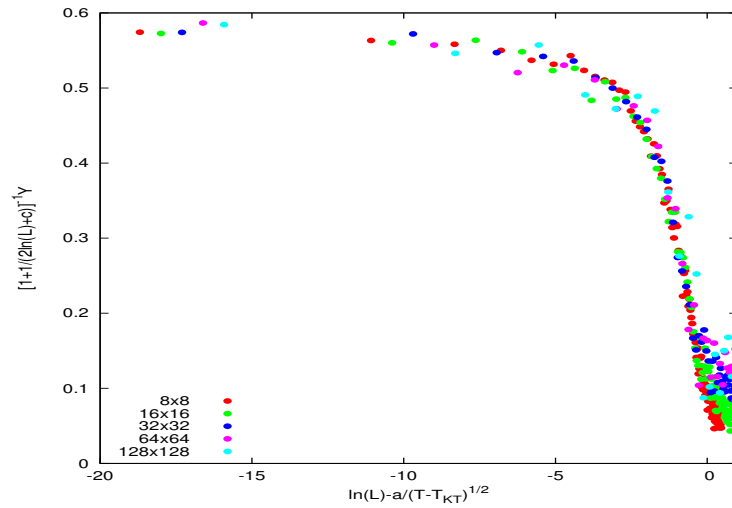


Figura 3.11: Función de scaling del módulo de helicidad en la que colpasan las curvas correspondientes a los sistemas de diferentes tamaños. El caso ilustrado se realizó tomando $a = 1.7$ y $c = 1.0$ de acuerdo a la ecuación 9.

4 Comentarios finales

Se han estudiado las propiedades básicas del modelo XY bidimensional, fundamentalmente en función del tamaño de los sistemas considerados. Aunque se trata de un modelo que no posee una fase con ordenamiento de largo alcance a temperatura finita alguna, se observó que a temperaturas por debajo de un valor crítico, la función de correlación de los espines del sistema decae conforme a una ley de potencias. A este régimen se lo ha referido como “orden de cuasi-largo alcance”. Cuando la temperatura está por encima del valor crítico, el decaimiento de la función de correlación tiene una forma exponencial.

Con respecto al comportamiento de la energía en función de la temperatura, se ha visto que los sistemas relativamente pequeños, con condiciones de contorno periódicas, brindan un buen estimativo del límite termodinámico. El calor específico presenta un máximo a un valor de la temperatura que se acerca al valor crítico del límite termodinámico, a medida que el tamaño del sistema crece.

El módulo de helicidad ha sido obtenido para sistemas de diferentes tamaños. El salto observado depende de los efectos de tamaño finito. De la intersección de las diferentes curvas obtenidas con valor teórico a la temperatura crítica, $2T_{KT}/\pi$, se puede realizar una estimación rudimentaria de T_{KT} en función del tamaño del sistema. Lo que se observa es que los valores así obtenidos se aproximan al valor esperado para el límite termodinámico a medida que se hace crecer el tamaño del sistema.

Finalmente, para dar cuenta de la universalidad del salto en el módulo de helicidad, se utilizó la hipótesis del scaling para intentar colapsar los resultados para diferentes tamaños en una única curva.

5 Bibliografía

- [1] D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
- [2] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, J. Phys. C **6**, 1181 (1973).
- [3] J.M. Kosterlitz, J. Phys. C **7**, 1046 (1974).
- [4] S. Teitel and C. Jayaprakash, Phys. Rev. B **27**, 598 (1983).
- [5] P. M. Chaikin and T. C Lubensky, *Principles of Condensed Matter Physics* (University Press, Cambridge, 1995.)
- [6] M. E. J. Newman and G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (Clarendon Press, Oxford, 2009.)
- [7] M.E. Fisher, M.N. Barber and D. Jasnow, Phys. Rev. A **8**, 1111 (1973).
- [8] D. R. Nelson and J. M. Kosterlitz, Phys. Rev. Lett. **39**, 1201 (1977).
- [9] H. Webber, P. Minnhagen, Phys. Rev. B **37**, 5986 (1987).
- [10] Y. Tomita and Y. Okabe, Phys Rev B **65**, 184405 (2002).