Long-range Order and Directional Defect Propagation in the Nonreciprocal XY Model with Vision Cone Interactions - Estudo de artigo

Gustavo Mangold, Leonardo Ferreira e Pedro Mendes Agosto de 2024

1 Introdução

Sistemas complexos podem ser definidos como uma coleção numerosa de indivíduos interagentes, "cujo comportamento depende crucialmente dos seus detalhes" [1]. Embora as técnicas fundamentais utilizadas em seu estudo tenham sido desenvolvidas no contexto da física estatística, elas foram importadas e adaptadas para descrição de sistemas sociais [2] e econômicos [3], bem como para problemas de ciência da computação [4]. Graças ao sucesso desse movimento interdisciplinar, o campo de aplicação da mecânica estatística de sistemas complexos se estendeu para praticamente todas as áreas do conhecimento científico.

As abordagens usualmente adotadas na modelagem de sistemas complexos se dividem basicamente em duas: modelos de grandes dimensões e modelos mínimos. O primeiro caso, próprio da ciência de dados, consiste em modelos com grandes números de variáveis e parâmetros (justificando o nome), que buscam a reprodução fina de dados observados e geralmente se interessam em produzir novas medidas. Já no segundo caso, importado da mecânica estatística, o intuito é construir modelos com poucas variáveis cuja investigação analítica e computacional promove intuição fenomenológica sobre o comportamento do sistema observado.

Dentre tais modelos mínimos, a classe dos sistemas de spin bidimensionais (ou modelo XY) se destaca por ser uma forma simples de atacar problemas com graus de liberdade contínuos. Nesse modelo, os indivíduos (ou spins) são idealizados por vetores de módulo unitário, restritos a rotacionar em um plano. O ângulo entre o vetor unitário e o eixo de referência pré-estabelecido representa o estado daquele indivíduo. Cada spin é associado ao nó de um grafo, cujas arestas representam as interações entre eles. De acordo com o tipo de interação (alinhamento ou anti-alinhamento), o sistema pode apresentar comportamento coletivo diverso, como fases ordenadas de longo alcance, e transições de fase

Em geral, as interações entre spins são simétricas, ou seja, a influência que o spin i tem sobre o spin j é a mesma que este tem sobre aquele. Embora essa simetria de interações faça todo sentido na maioria das abordagens físicas, nada impede que em algum sistema específico ou até em sistemas sociais e econômicos as interações sejam assimétricas. No contexto da dinâmica social, um indivíduo A pode influenciar um indivíduo B a adotar certa opinião, enquanto que o indivíduo A não sofre influência de B para se posicionar, em um exemplo de interação direcionada. Nesses casos, o grafo que representa as interações seria direcionado, com uma matriz de adjacência assimétrica.

Neste trabalho, investigamos o modelo XY em uma rede quadrada com visão de cone, isto é, onde um spin enxerga somente um ângulo pré-definido no seu entorno e que depende da sua orientação, restringindo as interações à primeiros vizinhos. Reproduzindo alguns

dos resultados da referência [5], onde utilizamos técnicas de Monte Carlo para estudar o efeito da assimetria da interação entre spins nas fases de longo alcance acessíveis ao sistema, explicitamos o contraste com o caso simétrico análogo e verificamos a dependência da reciprocidade da interação tanto nas fases de ordenamento quanto na estrutura de defeitos da rede.

2 O modelo XY ferromagnético em uma rede quadrada

O modelo XY consiste em uma coleção com M spins S_i , cujo estado é completamente descrito pela variável angular ϕ_i na forma

$$\mathbf{S}_i = \cos(\phi_i)\hat{x} + \sin(\phi_i)\hat{y},\tag{1}$$

acopladas à um banho térmico de temperatura T. Cada spin é associado a um nó de uma rede quadrada de lado L e com condições de contorno periódicas, de modo que o número total de spins nos sistema é $M=L^2$. Assim, o estado microscópico do sistema seja completamente determinado pela coleção $\{\phi_i\}_{i=1}^M$. Na configuração de primeiros vizinhos, cada spin interage apenas com aqueles outros que estejam imediatamente adjacentes a eles, através de uma energia (ou campo) local

$$E_i = -\sum_{\langle i,j\rangle} J_{ij}(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) = -\sum_{\langle i,j\rangle} J_{ij} \cos(\phi_i - \phi_j), \tag{2}$$

e a energia total do sistema é dada por

$$E = -\sum_{i=1}^{M} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \cos(\phi_i - \phi_j). \tag{3}$$

Analisando essa última equação, vemos que a minimização de energia depende do sinal dos fatores de acoplamento J_{ij} . Considerando um sistema ferromagnético com interações recíprocas, onde $J_{ij} = J > 0$ para todo par de spins $\langle i, j \rangle$, a equação (3) é simplificada para

$$E = -J \sum_{i=1}^{M} \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\phi_i - \phi_j), \tag{4}$$

de modo que a configuração microscópica que minimiza a energia total é $\phi_i - \phi_j = 0$ para todo par $\langle i, j \rangle$.

Os efeitos de temperatura são introduzidos através da regra dinâmica utilizada para se obter a configuração de equilíbrio $\mathbf{\Phi} = (\phi_1, \cdots, \phi_M)$. Neste trabalho, escolhemos a chamada dinâmica de Glauber [6], baseada em uma probabilidade de atualização para os ângulos dada por

$$\omega(\phi_i \to \phi_i') = \frac{1}{2} \left[1 - \tanh\left(\frac{E_i(\phi_i') - E_i(\phi_i)}{2T}\right) \right]. \tag{5}$$

Aqui, tomaremos a versão sequencial da dinâmica de Glauber [7], que consiste em atualizar cada ângulo ϕ_k no momento em que este é sorteado no algoritmo. A partir de uma configuração inicial arbitrária Φ_0 , a aplicação sucessiva da equação (5) leva o sistema até a configuração microscópica estacionária Φ , vinculada as quantidades macroscópicas

$$m = \left\langle \frac{1}{M} \sqrt{\left(\sum_{i=1}^{M} \cos(\phi_i)\right)^2 + \left(\sum_{i=1}^{M} \sin(\phi_i)\right)^2} \right\rangle_{ens}, \tag{6}$$

$$\langle S_i S_{i+d} \rangle = \left\langle \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M S_i S_{i+d} \right\rangle_{ens}.$$
 (7)

sendo m a magnetização do sistema e $\langle S_i S_{i+d} \rangle$ a correlação entre sítios, onde $\langle \cdot \rangle_{ens}$ denota média de ensemble. Como vemos na Figura 1, no limite $T \to 0$ as transições são determinísticas, acontecendo com probabilidade 1 ou 0 de acordo com o sinal de $\Delta E = E_i(\phi_i') - E_i(\phi_i)$, de forma que $m \to 1$. Já no limite $T \to \infty$ as transições se tornam completamente aleatórias, com o perfil de probabilidades se acumulando em torno de $\omega(\phi \to \phi') = 1/2$, de modo que $m \to 0$. Portanto, vemos que de acordo com o valor da temperatura, as propriedades macroscópicas apresentarão diferentes comportamentos.

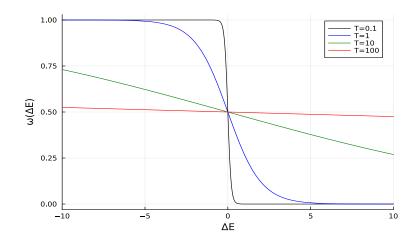


Figure 1: Perfil de probabilidades de transição $\omega(\phi \to \phi')$ em função da diferença de energia entre estados ΔE , para diferentes valores de temperatura T.

Segundo o teorema de Mermim-Wagner, o modelo XY em redes quadradas com interações recíprocas não pode apresentar uma fase ordenada de longo alcance (LRO) [8,9]. Em termos do comportamento da magnetização e da correlação entre sítios, equações (6) e (7) respectivamente, observam-se duas fases:

1. Desordenada (DO)
$$m \to 0, \quad \langle S_i S_{i+d} \rangle \propto e^{-d}. \tag{8}$$

2. Quasi-ordenada de longo alcance (QLRO)

$$m > 0, \quad \langle S_i S_{i+d} \rangle \propto d^{-\alpha}.$$
 (9)

Neste trabalho, os autores mostram que a não reciprocidade nas interações, via introdução do cone de visão com angulo $\theta < 2\pi$, faz com que uma fase LRO emerja:

3. Ordenada de longo alcance (LRO)

$$m \to 1, \quad \langle S_i S_{i+d} \rangle = constante > 0.$$
 (10)

Uma análise posterior é também feita utilizando o cumulante de Binder (cumulante de quarta ordem, definido como a *curtose* da magnetização), onde

$$U = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2}. (11)$$

3 Algoritmo

O algoritmo utiliza uma dinâmica de Monte-Carlo do tipo de Metropolis, com spin-flips caracterizados pela taxa de transição de Glauber (5) onde a energia do sistema é dada considerando uma rede bi-dimensional preenchida por spins $S_i \in \mathbb{R}^2$, com orientações

 $\phi_i \in [0, 2\pi)$, e definida como $\sum E_i$, em que a energia individual do sistema de spins em banho térmico à uma temperatura T é dada por (2). Temos também, como explicitado na soma, a interação ocorrendo somente com os vizinhos mais próximos.

A parte de não-reciprocidade que difere esse modelo do XY original aparece na constante de acoplamento, que depende da orientação dos spins interagentes. Assim, define-se um cone de visão de tamanho angular $\theta \in (0, 2\pi]$ fixo, e se escreve a constante de acoplamento como:

$$J_{ij}(\phi_i) = \begin{cases} J, & \min\{2\pi - |\phi_i - \vartheta_{ij}|, |\phi_i - \vartheta_{ij}|\} \leq \frac{\theta}{2} \\ 0, & \text{para o caso complementar} \end{cases}$$
 (12)

onde $\vartheta_{ij} = \frac{2\pi k}{n}$, $k \in \{0, 1, 2, ..., n\}$ é o ângulo que conecta os spins S_i e S_j , e n é o número de vizinhos mais próximos (4 na rede quadrada).

Portanto, a equação (12) nos diz que o acoplamento é constante e igual a J quando o spin amostrado "vê" o vizinho e nulo quando não o vê, ou seja, quando o cone não contém o vizinho.

O algoritmo pode ser resumido na sequência de passos:

- 1. Inicializar todos os spins com um ângulo $\phi_i \in [0, 2\pi)$.
- 2. Sortear um spin aleatoriamente entre os $M=L^2$ spins totais, e em cada sorteio atualiza-se o ângulo para inicial ϕ para $\phi'_i = \phi_i + rand(0, 2\pi)^1$ com aceitação dada pela equação (5), onde a energia depende das interações com vizinhos em (2) e que por sua vez depende da constante de acoplamento, que é não-nula somente quando o spin em questão enxerga um spin vizinho.
- 3. Repetir os passos 1 e 2 por N passos de Monte-Carlo, atualizando cada spin sorteado no momento do sorteio (atualização sequencial).

O item 2. da implementação pode ser feito de várias formas. O método adotado consiste em associar com cada vizinho, no caso da rede quadrada, um ângulo que será fixo, conforme a o painel esquerdo da figura (2). Assim, como θ é fixo e ϕ é sabido, para calcular o acoplamento basta calcular para todos os vizinhos a desigualdade em (12) e calcular a energia de acordo, como esquematizado no painel direito da figura (2).

4 Resultados

Os resultados nesta seção são somente sobre uma medida, e, a menos que seja especificado o contrário, tomamos somente o caso com L=32 para 10^5 passos de Monte Carlo, ou MCS, devido ao tempo hábil de realização das simulações. Médias são sempre tomadas sob $5 \cdot 10^3$ passos adicionais estacionários da simulação.

A magnetização média, isto é, tomada sob todos os spins baseado na equação (6), apresenta transição contínua em uma temperatura crítica distinta para cada cone de visão, como demonstrado no painel esquerdo da figura (3). Vemos que quanto menor o ângulo θ que define o cone de visão, menor é a temperatura crítica que separa a fase desordenada da ordenada. Para $\theta = 90^{\circ}$, a magnetização é aproximadamente nula sempre.

O cumulante de Binder, apresentado para ângulos múltiplos de 45° no painel direito da figura (3), por mais que não mostre um comportamento como o esperado da curtose nos pontos críticos, apresenta um comportamento interessante, sendo aproximadamente constante para os ângulos especiais $\theta = 90, 180, 270$, que, como veremos no diagrama de fase, representam pontos onde temos simetria na quantidade de vizinhos de cada spin, i.e., todos os spins vêem a mesma quantidade de vizinhos.

¹No caso desse algoritmo, o sorte
io pode ser por um ângulo $\Delta\theta$ que varia em torno do ângulo atual do spin. Aqui, definimos $\Delta\theta=\pi$.

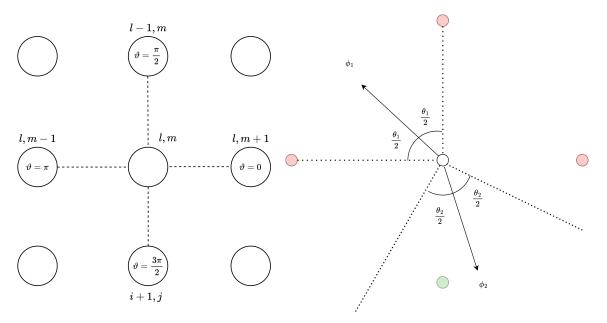


Figure 2: Painel esquerdo: diagrama representando os ângulos que definem as interações com os vizinhos mais próximos na rede quadrada, onde l,m correspondem aos índices da rede, respectivamente, linhas e colunas. Painel direito: diagrama representando o cone de visão para duas orientações diferentes de spin para $\theta = 90^{\circ}$. Em vermelho, os spins não vistos por ϕ_2 , e, em verde, aqueles contabilizados na energia. Podemos inferir que a situação em que dois vizinhos são sorteados é impossível, pois, do ponto de vista do sorteio de ângulos os spins são puntiformes, ou seja, sortear um float exatamente (dentro da precisão permitida) igual $\frac{\pi}{2}$ não é factível.

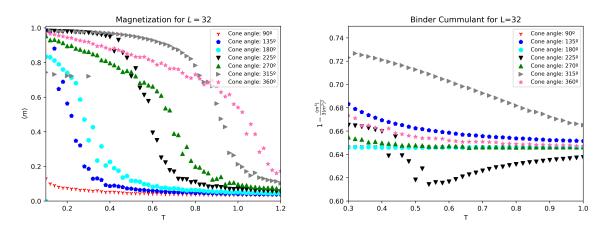


Figure 3: Painel esquerdo: magnetização em função da temperatura para alguns ângulos distintos do cone de visão. Painel direito: cumulante de Binder para alguns ângulos de cone de visão.

O diagrama de fase, que é um gráfico de contorno da magnetização em função da temperatura e do ângulo do cone de visão na Figura 4, apresenta três fases distintas caracterizadas na Seção 2. Em vermelho, com $m \to 1$, temos fases ordenadas de longo alcance (LRO), e, em azul, uma fase desordenada (DO) com $m \to 0$. Uma fase intermediária surge entre essas duas, a quasi-ordenada de longo alcance (QLRO), com m > 0. Aqui, é importante notar o surgimento de regiões para ângulos especiais múltiplos de 90° , onde a fase QLRO também emerge. Isso se dá, segundo o trabalho original [5], pela assimetria no número de vizinhos. Isto é, para θ não múltiplo de 90° , cada spin pode enxergar números distintos de vizinhos. No caso de múltiplos de 90° , um spin sempre enxerga o mesmo número de vizinhos. Essa simetria, esquematizada no painel direito da figura 2, é um

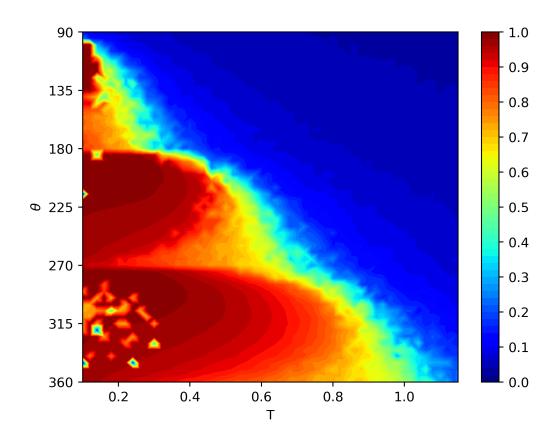


Figure 4: Gráfico de contorno para a magnetização para parâmetros

A análise é complementada pelo uso da correlação em função da distância d, apresentada nas figuras (5). Para $\theta=315^{\rm O}$, vemos que na porção do diagrama de fases em que $m\to 1$ (região vermelha), a correlação se mantém constante, indicando a presença da fase (LRO), como definida em 10. Na porção em que m>0 (regiões amarela e azul clara do diagrama), temos $T\leq T_C$ e vemos que a correlação cai como uma lei de potência em função da distância d, indicando a presença de uma fase (QLRO). Já na porção em que $m\to 0$ (região azul escura do diagrama), observamos um decaimento exponencial, implicando em uma fase 8. Já para $\theta=270^{\rm O}$, um dos ângulos especiais, vemos um decaimento por lei de potência em temperaturas, vemos que a fase (LRO) é suprimida.

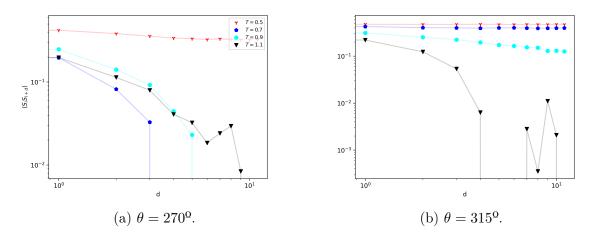


Figure 5: Correlação para diferentes temperaturas e dois ângulos distintos.

Referências

- [1] G. Parisi, "Complex systems: a physicist's viewpoint," 2002.
- [2] C. Castellano, S. Fortunato, and V. Loreto, "Statistical physics of social dynamics," *Reviews of Modern Physics*, vol. 81, p. 591–646, May 2009.
- [3] S. Bornholdt and F. Wagner, "Stability of money: phase transitions in an ising economy," *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 316, p. 453–468, Dec. 2002.
- [4] A. Lucas, "Ising formulations of many np problems," Frontiers in Physics, vol. 2, 2014.
- Τ. [5] S. Loos. S. Klapp, and Martynec, "Long-range and diorder defect rectional propagation inthe nonreciprocal <mml:math xmlns:mml = "http://www.w3.org/1998/math/mathml"display="inline"><mml:mrow><mml:mi mathvariant="italic">xy</mml:mi></mml:mrow></mml:math> model with vision cone interactions," Physical Review Letters, vol. 130, May 2023.
- [6] R. Glauber, "Time-dependent statistics of the ising model," Journal of mathematical physics, vol. 4, no. 2, pp. 294–307, 1963.
- [7] A. Coolen, "Statistical mechanics of recurrent neural networks i—statics," in *Handbook of biological physics*, vol. 4, pp. 553–618, Elsevier, 2001.
- [8] V. Berezinskii, "Destruction of long-range order in one-dimensional and two-dimensional systems having a continuous symmetry group i. classical systems," Sov. Phys. JETP, vol. 32, no. 3, pp. 493– 500, 1971.
- [9] J. Kosterlitz and D. Thouless, "Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems," in *Basic Notions Of Condensed Matter Physics*, pp. 493–515, CRC Press, 2018.