
Transición de fase del modelo de Heisenberg 3D mediante el algoritmo de Wolff

David F. Bambagüe
Juan E. Bernate
Juan D. Ochoa

Contenido

1. Objetivos.
2. Introducción.
3. Modelo de Heisenberg
4. Algoritmo de Wolff
5. Histograma
6. Bibliografía.

Monte Carlo Simulations of Spin Systems

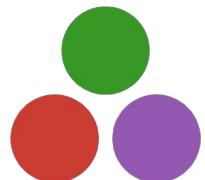
Wolfhard Janke

Institut für Physik, Johannes Gutenberg-Universität, D-55099 Mainz, Germany

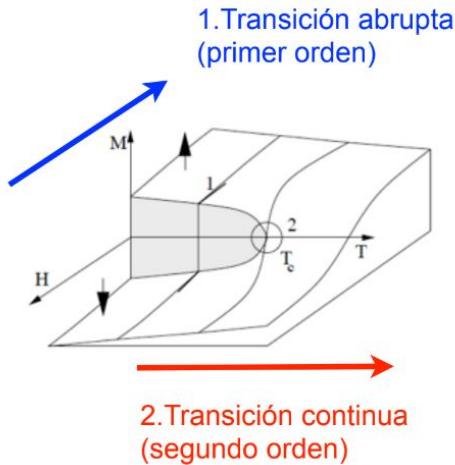
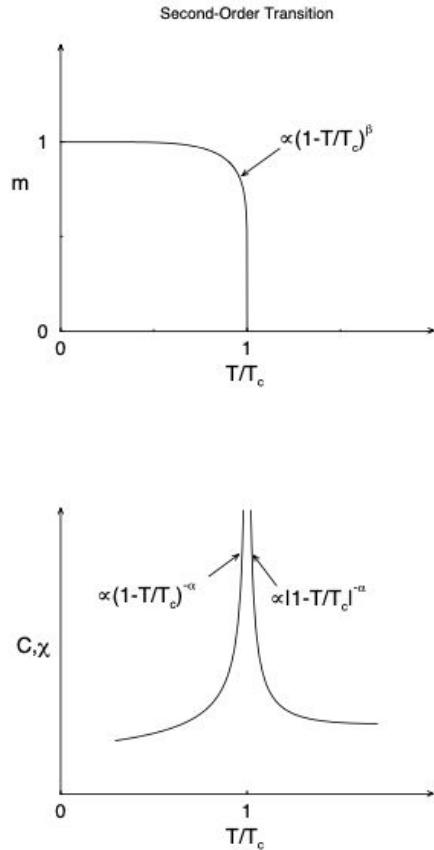
Abstract. This lecture gives a brief introduction to Monte Carlo simulations of classical $O(n)$ spin systems such as the Ising ($n = 1$), XY ($n = 2$), and Heisenberg ($n = 3$) model. In the first part I discuss some aspects of Monte Carlo algorithms to generate the raw data. Here special emphasis is placed on non-local cluster update algorithms which proved to be most efficient for this class of models. The second part is devoted to the data analysis at a continuous phase transition. For the example of the three-dimensional Heisenberg model it is shown how precise estimates of the transition temperature and the critical exponents can be extracted from the raw data. I conclude with a brief overview of recent results from similar high-precision studies of the Ising and XY model.

Objetivos

1. Entender el **modelo de Heisenberg** y estudiar los métodos empleados en el cálculo de **exponentes críticos**.
2. Implementar el **algoritmo de Wolff** -y posiblemente **métodos de histograma**- para obtener las curvas de *magnetización, susceptibilidad y calor específico* en una región cúbica isotrópica y con condiciones de frontera periódicas.
3. Obtener los exponentes y la **temperatura crítica**.

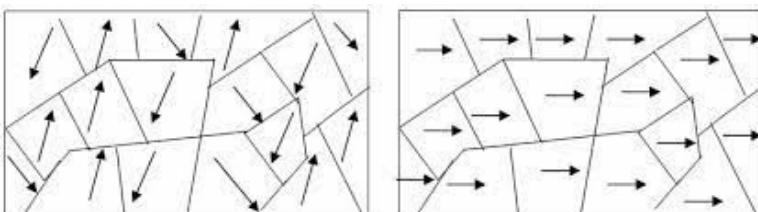


Transición de fase ferromagnética



Las transiciones de fase están asociadas a rupturas de simetría

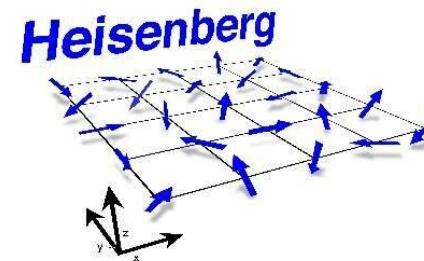
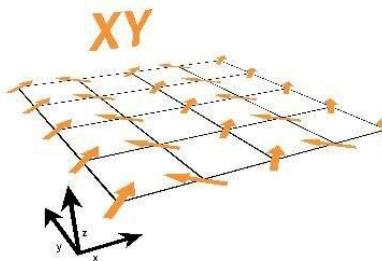
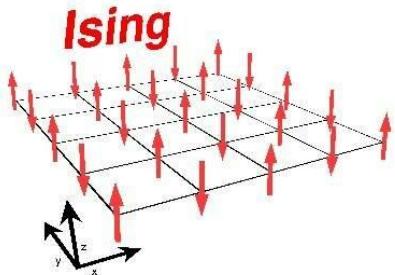
El ferromagnetismo es un fenómeno físico en el que se produce ordenamiento magnético de todos los momentos magnéticos de una muestra, en la misma dirección y sentido.





Modelo de Heisenberg 3d

Una interacción que tiende a orientar los momentos angulares de espín y, por tanto, afecta a los momentos magnéticos de los átomos.



Zur Theorie des Ferromagnetismus.

Von W. Heisenberg in Leipzig.

Mit 1 Abbildung. (Eingegangen am 20. Mai 1928.)

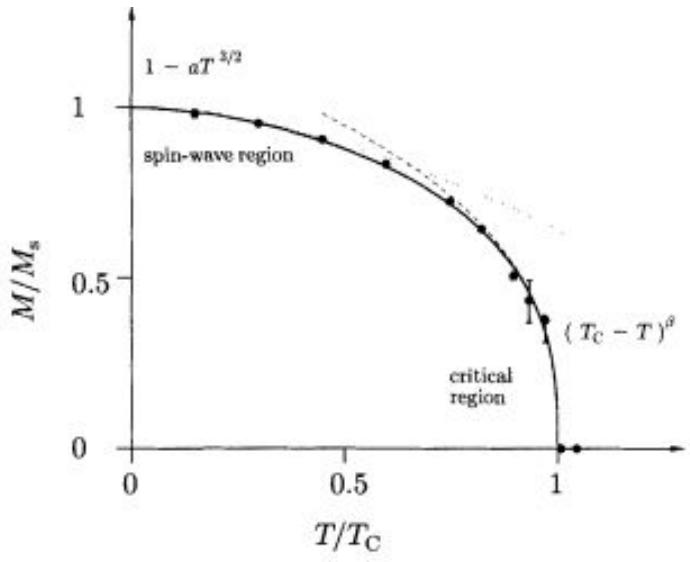
Die Weisschen Molekularkräfte werden zurückgeführt auf ein quantenmechanisches Austauschphänomen; und zwar handelt es sich um diejenigen Austauschvorgänge, die in letzter Zeit von Heitler und London mit Erfolg zur Deutung der homöopolaren Valenzkräfte herangezogen worden sind.

Einleitung. Die ferromagnetischen Erscheinungen sind in formal befriedigender Weise durch die bekannte Weisssche Theorie* gedeutet worden. Diese Theorie basiert auf der Annahme, daß jedes Atom im

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j$$

¿Cómo calculamos las propiedades termodinámicas?

La *magnetización* (espontánea):



$$m_c = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i \quad \Rightarrow \quad \langle M \rangle_T = \sum_c m_c p_T(E_c)$$

¡Este será nuestro **parámetro de orden!**

La *susceptibilidad magnética*

$$\chi = \frac{N}{k_B T} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2)$$

y la *capacidad calorífica*:

$$C_T = \frac{1}{k_B T^2} (\langle E^2 \rangle_T - \langle E \rangle_T^2)$$

Exponentes críticos

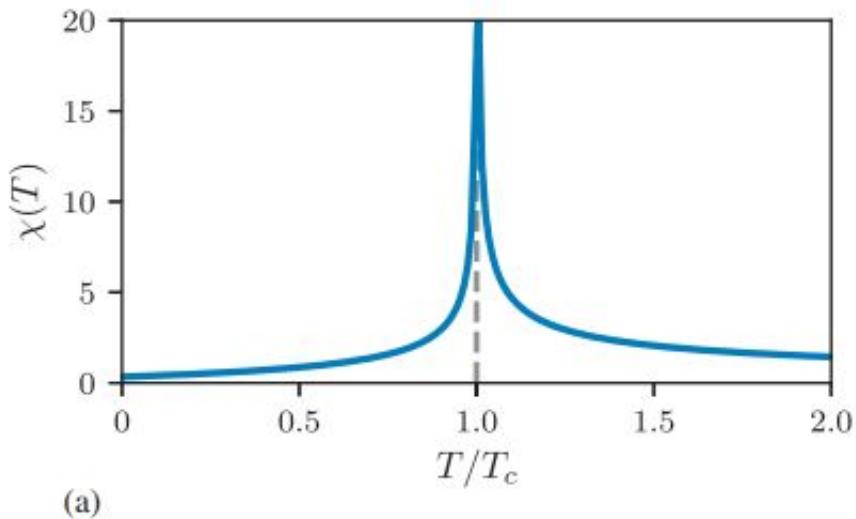
En cercanía a la temperatura crítica,

$$M \propto (T_c - T)^\beta, \quad (T < T_c)$$

$$C \propto (T_c - T)^{-\alpha}$$

$$\chi \propto (T_c - T)^{-\gamma}$$

$$M \propto H^{1/\delta}, \quad (T \approx T_c)$$



¿Por qué tienen esa forma?

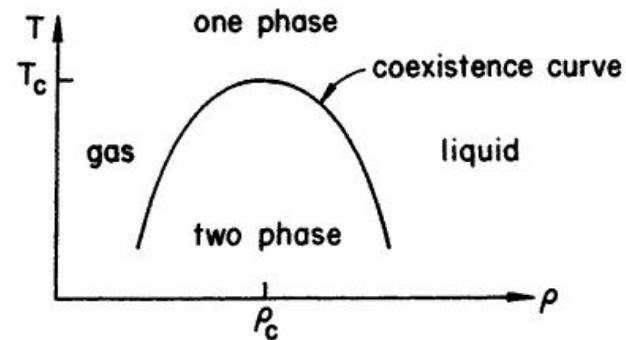
¡En cercanía a la temperatura crítica, el sistema exhibe propiedades de invarianza a escala!

¿Por qué nos interesan?

- Son independientes de la intensidad de la interacción J .

Dependen de:

- ❖ Grupo de **simetría** del Hamiltoniano.
- ❖ **Dimensión** d .
- ❖ Naturaleza de las interacciones (e.g **corto-alcance** como en nuestro caso)



$$M \propto (T_c - T)^\beta$$

$$|\rho_+ - \rho_-| \propto |T - T_c|^\beta$$

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \text{ (Rushbrooke)}$$

$$\gamma = \beta(\delta - 1) \text{ (Widom)}$$

$$\gamma = (2 - \eta)\nu \text{ (Fisher)}$$

$$2 - \alpha = d\nu \text{ (Josephson)}$$

Interacción entre los espines

Función de correlación: $G(\vec{r}_i - \vec{r}_j) = \langle \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \rangle$

Dada la invariancia de rotación, en cercanías a la temperatura crítica

$$G(r; T) = r^\nu e^{-r\xi}$$

Longitud de correlación:

$$\xi(T) = -\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{r}{\ln G(r, T)}$$

- Sabemos que la longitud de correlación crece cuando nos acercamos a la temperatura crítica:

$$\xi \propto |T - T_c|^{-\nu}$$

Tiempo de Correlación

- Las configuraciones están fuertemente correlacionadas

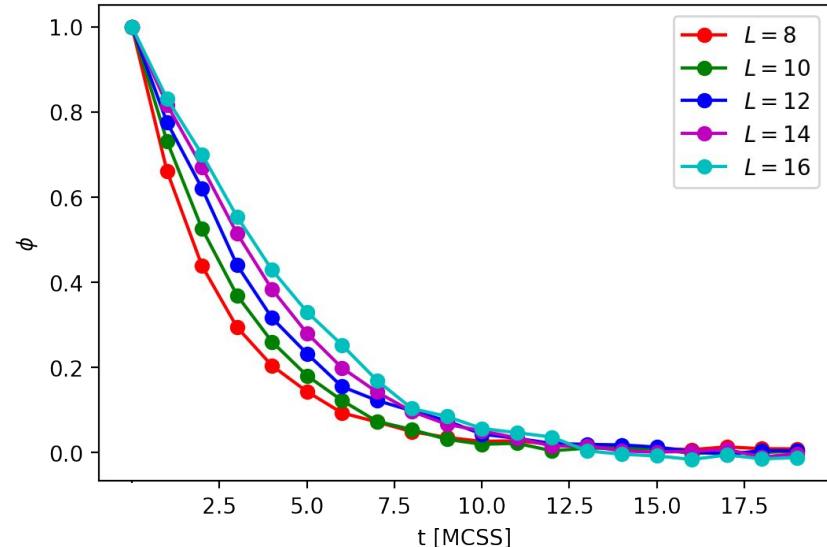
Podemos definir una **función de correlación no lineal** para el estado transiente:

$$\Phi_A^{\text{nl}}(\tau) = \frac{\langle A(\tau) \rangle - \langle A(\infty) \rangle}{\langle A(\tau_0) \rangle - \langle A(\infty) \rangle}$$

$$\langle A(\tau) \rangle = \sum_X p(X, \tau) A(X) = \sum_X p(X, \tau_0) A(X(\tau))$$

y un **tiempo de correlación**:

$$\tau_A^{\text{nl}} = \int_0^\infty \Phi_A^{\text{nl}}(\tau) d\tau.$$



τ = 3 mcss

- Para dos cantidades la correlación lineal se puede definir como:

$$\Phi_{AB}(\tau) = \frac{\langle A(\tau_0)B(\tau) \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle}{\langle AB \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle}$$

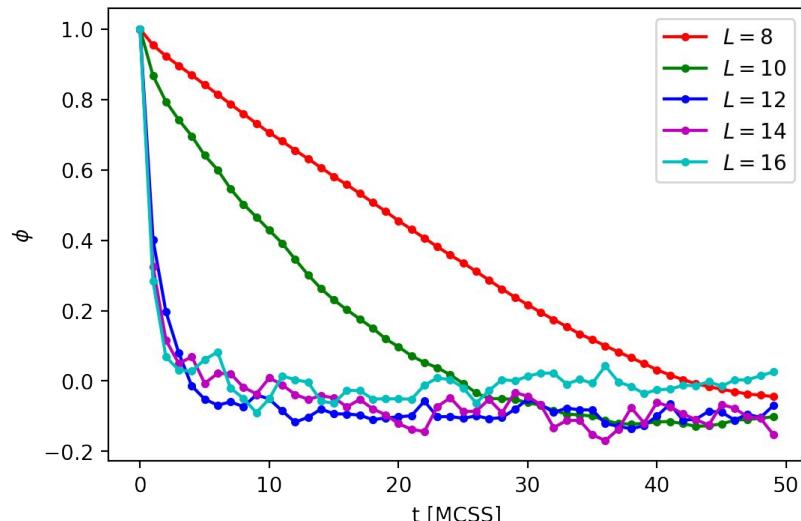
- Si $A=B$ la función se convierte en la función de autocorrelación

$$\Phi_\sigma(\tau) = \frac{\langle \sigma(\tau_0)\sigma(\tau) \rangle - \langle \sigma(\tau_0) \rangle^2}{\langle \sigma^2(\tau_0) \rangle - \langle \sigma(\tau_0) \rangle^2}$$

8	19
10	9
12	1
14	1
16	1

$$\langle A(\tau_0)B(\tau) \rangle = \sum_X p(X, \tau_0) A(X(\tau_0)) B(X(\tau)).$$

$$\tau_{AB} = \int_0^\infty \Phi_{AB}(\tau) d\tau$$



Escalamiento finito

Las singularidades alrededor de puntos críticos ocurren cuando L tiende a infinito. Si no es así, el comportamiento se modifica.

- Reemplazamos la longitud de correlación con el tamaño del sistema

$$C = C_{reg} + aL^{\alpha/\beta}$$

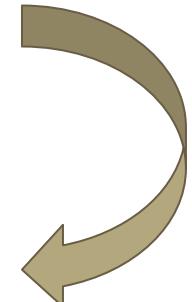
$$m = bL^{-\beta\nu}$$

$$\chi = L^{\gamma/\nu}$$



$$|T - T_C| \propto \xi^{-1/\nu} \rightarrow L^{1/\nu}$$

- Redefinimos las variables termodinámicas definidas arriba cerca de la temperatura crítica



Calculo la temperatura crítica con mayor precisión

Binder Culmulant

$$U_L(T) = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle_L}{3 \langle M^2 \rangle_L^2}$$

Donde

$$M_S(T, L) = L^{-\frac{\beta}{\nu}} F_{M_S} \left[(T - T_c) L^{\frac{1}{\nu}} \right]$$

- Es independiente del tamaño del sistema en la temperatura crítica.

$$\frac{\langle M^4 \rangle_L}{\langle M^2 \rangle_L^2} = \frac{L^{-\frac{4\beta}{\nu}} F_{M4} \left[(T - T_c) L^{\frac{1}{\nu}} \right]}{\left\{ L^{-\frac{2\beta}{\nu}} F_{M2} \left[(T - T_c) L^{\frac{1}{\nu}} \right] \right\}^2} = F_C \left[(T - T_c) L^{\frac{1}{\nu}} \right]$$

Ahora, como la magnetización tiene forma gausina.

Para una temperatura mayor a la crítica

$$P_L(M) = \sqrt{\frac{L^d}{2\pi\sigma_L^2}} \exp \left[-\frac{M^2 L^d}{2\sigma_L^2} \right]$$

Entonces el cuarto momento cumple que: $\langle M^4 \rangle_L = 3 \langle M^2 \rangle_L^2$, \longrightarrow **por lo tanto U=0 para l en el infinito**

- Para una temperatura menor tenemos dos magnetizaciones, una positiva y una negativa, luego su distribución se puede escribir como

$$P_L(M) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{L^d}{2\pi\sigma_L^2}} \left\{ \exp\left[-\frac{(M - M_S)^2 L^d}{\sigma_L}\right] + \exp\left[-\frac{(M + M_S)^2 L^d}{\sigma_L}\right] \right\}$$

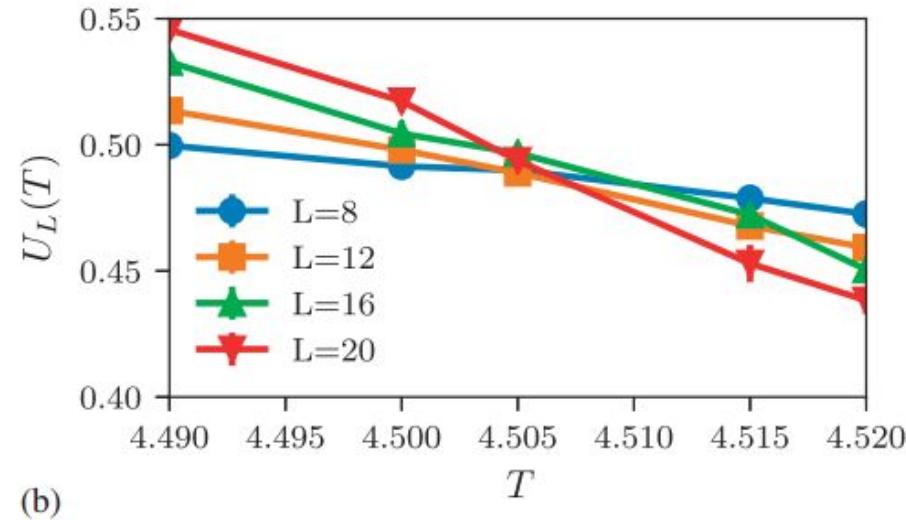
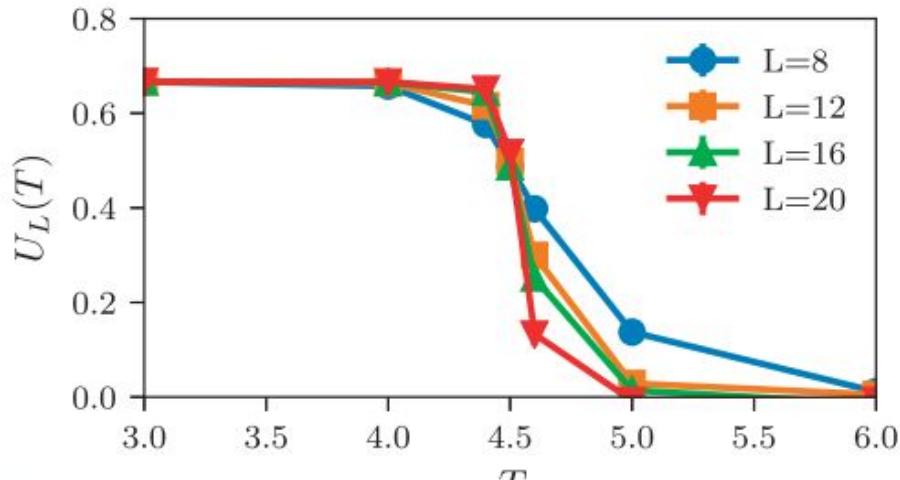
Entonces el cuarto momento cumple que:

$$\langle M^4 \rangle_L = \langle M^2 \rangle_L^2 \longrightarrow \text{por lo tanto U}=\frac{2}{3} \text{ para l en el infinito}$$

Finalmente

$$U_L(T) = \begin{cases} \frac{2}{3}, & \text{for } T < T_c, \\ \text{const.}, & \text{for } T = T_c, \\ 0, & \text{for } T > T_c, \end{cases}$$

Comportamiento del **cumulante de Binder** para el modelo de Ising



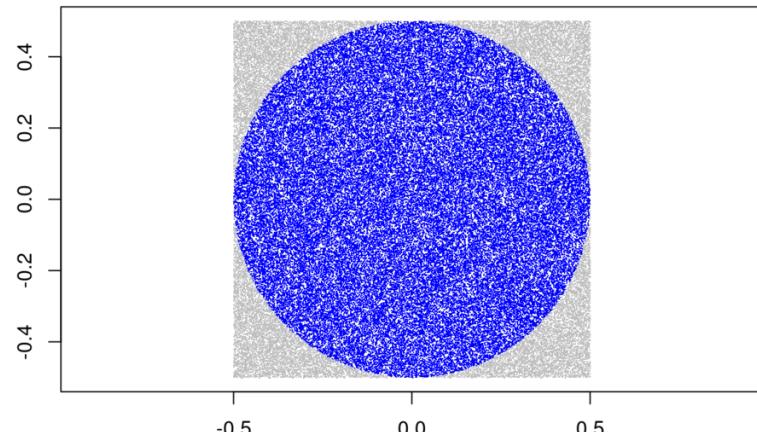
Simulaciones de Monte Carlo

¿Cómo calculamos un **valor esperado**?

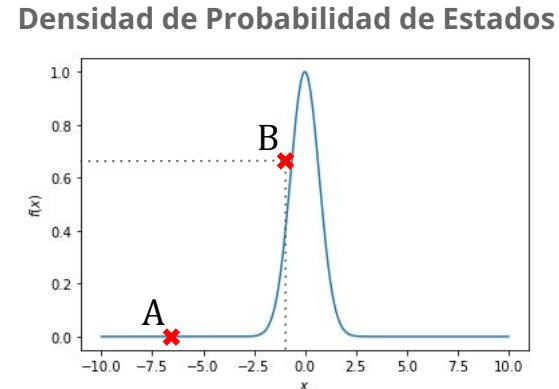
$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma\}} A_\sigma \exp(-\beta E_\sigma)$$

Muchos estados!!

Idea: Usar **muestreo simple**



...pero....

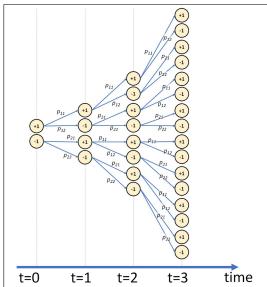


¡Hay estados con probabilidad MUY baja!

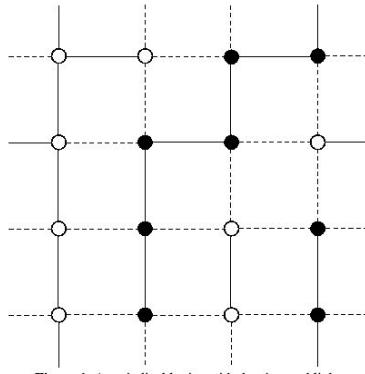
Método de Metropolis:

La solución es el **muestreo por importancia**.

Generamos una cadena de Markov de estados.



Modelo de Ising



- El siguiente estado en la cadena solo puede ser añadido bajo cierta probabilidad .
- Dos condiciones para la **convergencia**

Ergodicidad

"De cualquier lado a cualquier otro"

Balance detallado

$$\frac{P_{ij}}{P_{ji}} = \frac{P(\sigma_i)}{P(\sigma_j)}$$



$$P_{ij} = \begin{cases} \exp[-\beta(E_j - E_i)] & \text{if } E_i \leq E_j \\ 1 & \text{if } E_j < E_i \end{cases}$$

...pero....

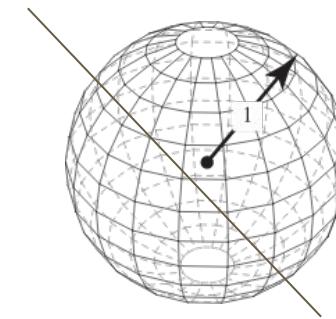
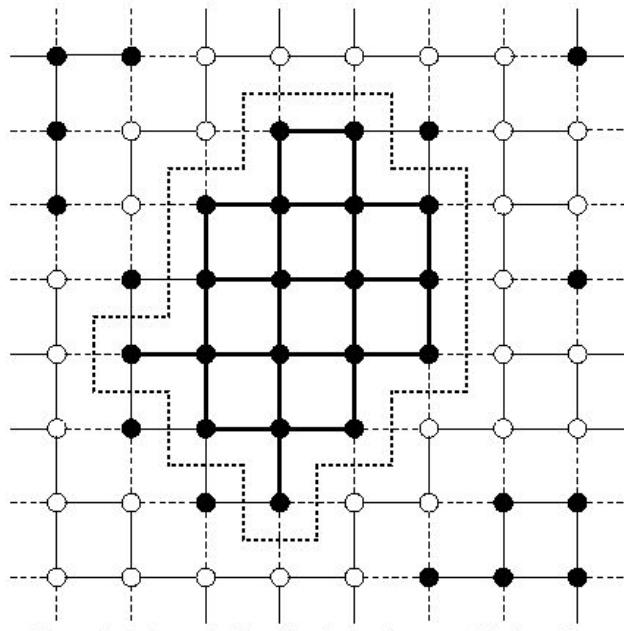
Ralentizamiento crítico

- El **tiempo de autocorrelación** se relaciona con la longitud de autocorrelación por:

$$\tau \propto L^z$$

El tiempo de autocorrelación es muy grande!!

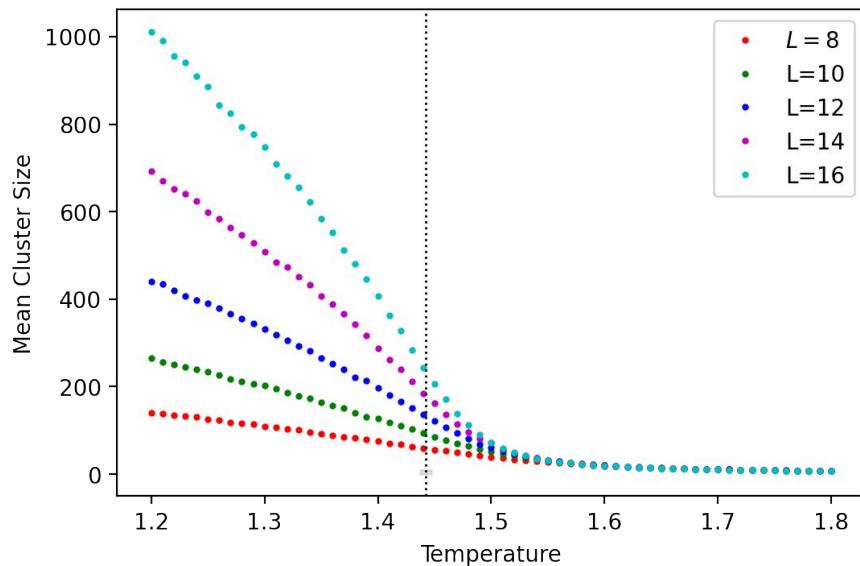
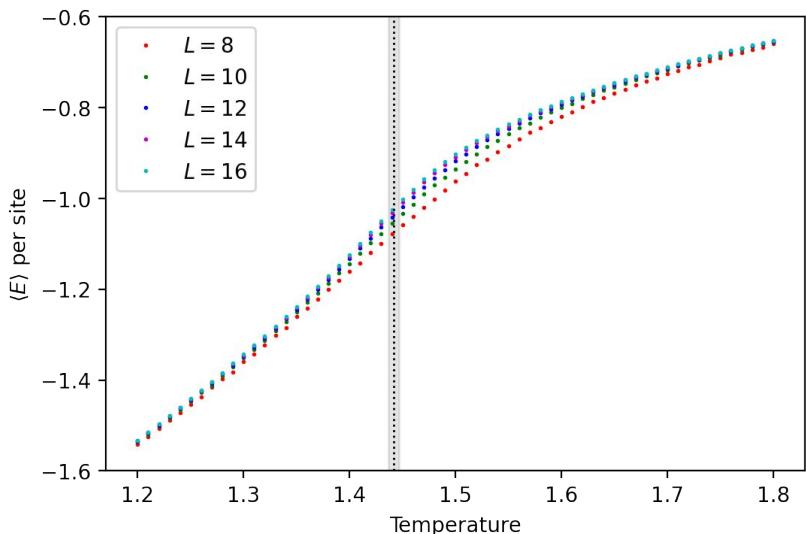
Algoritmo Single-Cluster de Wolff



Receta para un Cluster:

1. Escoger un vector unitario \mathbf{r} con dirección aleatoria.
2. Escoger un espín m también al azar.
3. Añadir al espín vecino n al cluster con cierta probabilidad
$$p_{mn} = 1 - \exp[\min\{0, -2\beta J(\vec{r} \cdot \vec{s}_m)(\vec{r} \cdot \vec{s}_n)\}]$$
4. Repetir con los vecinos de los vecinos; y así hasta quedarse sin vecinos.
5. Reflejar todos los espines con respecto al plano definido por \mathbf{r} .

Resultados de simulación



Exponentes críticos.

Se promedian las intersecciones de las curvas:

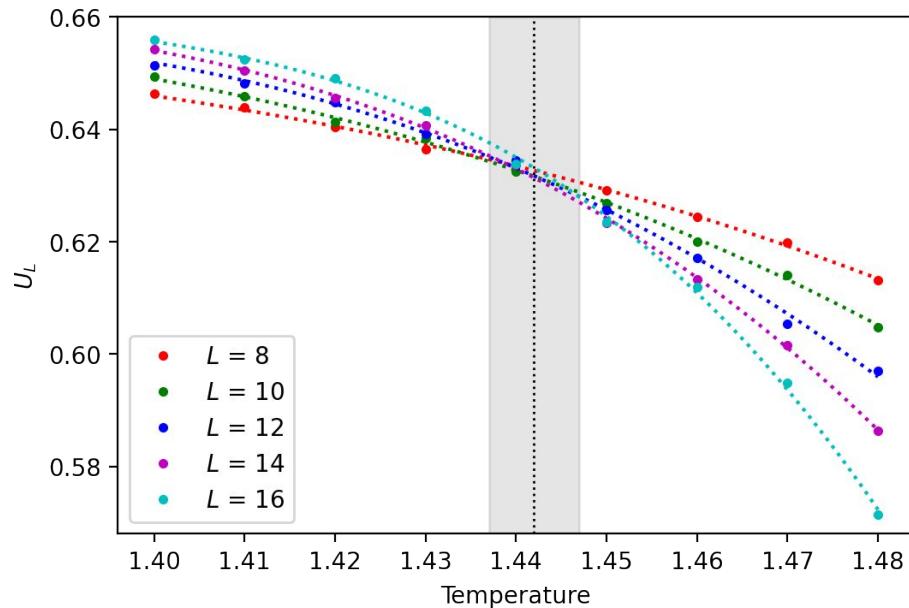
Temperatura crítica por cumulantes de Binder:

$$U_L(T) = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle_L}{3 \langle M^2 \rangle_L^2}$$

Finalmente se identifica $T_C = 1.442 \pm 0.004$

Con un error de

$$\epsilon = 0.4\%$$

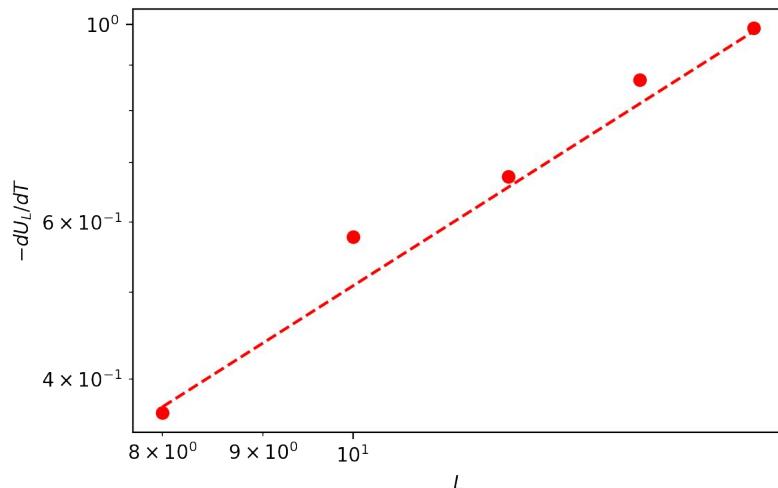


Ahora se halla la derivada de U_B en el punto crítico por diferencias centrales:

$$\frac{dU_B}{dT} \approx \frac{U_B^{(i+1)} - U_B^{(i-1)}}{2T_{step}}$$

Se espera $\nu = 0.71$ y una relación:

$$-\left. \frac{dU_B}{dT} \right|_{T_c} \sim L^{1/\nu}$$



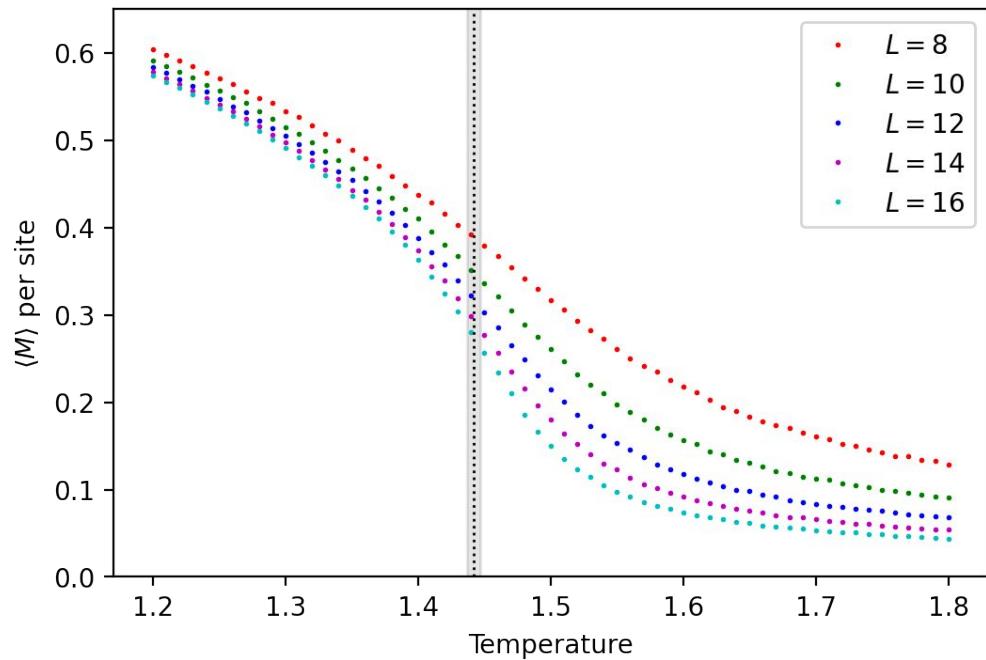
Se encuentra $\nu = 0.72 \pm 0.05$ con un error máximo de

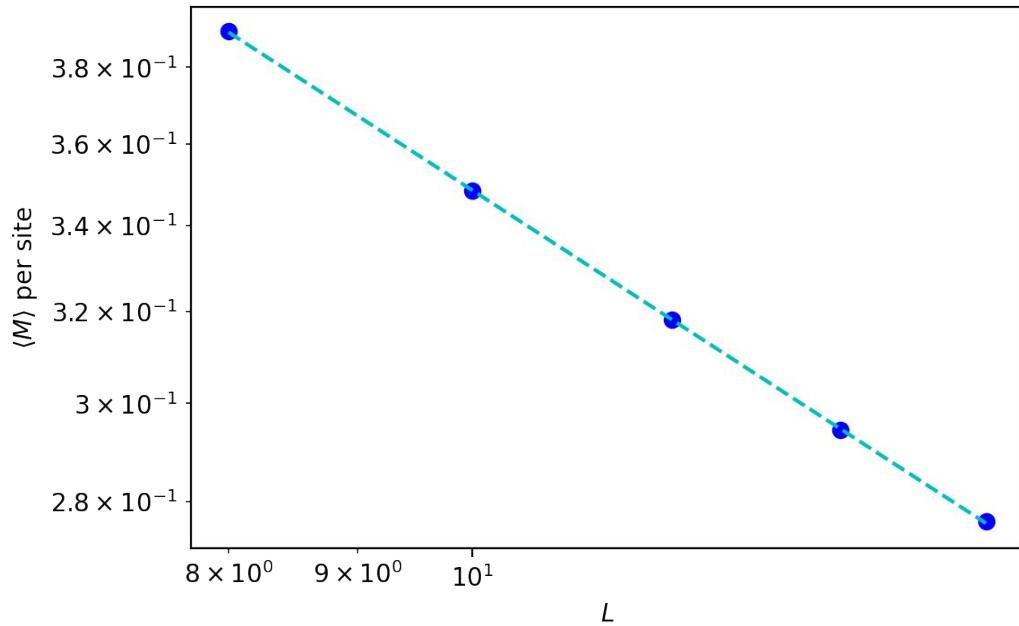
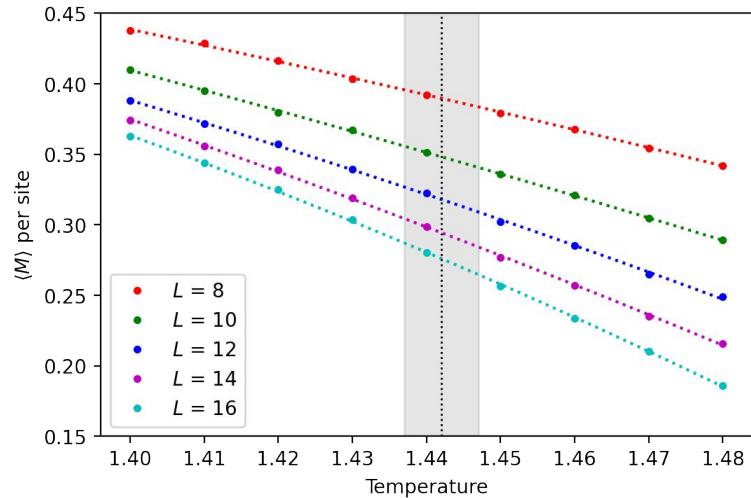
$$\epsilon = 8.5\%$$

- Se interpola linealmente la magnetización por sitio para hallar su valor en la temperatura crítica.

Se espera $\frac{\beta}{\nu} = 0.514$ y una relación

$$\frac{1}{L^d} \langle M \rangle_{T_c} \sim L^{-\beta/\nu}$$

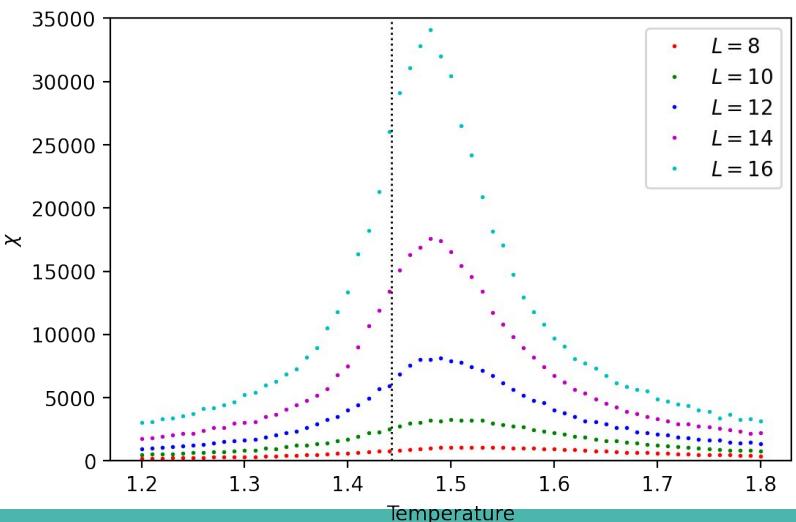
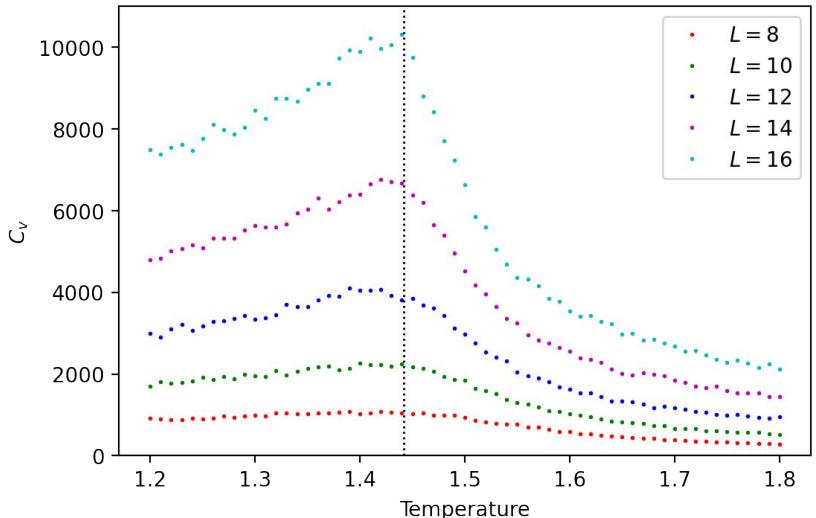




Con lo cual :
$$\frac{\beta}{\nu} = 0.489 \pm 0.002$$

Con un error máximo de:

$$\epsilon = 3.5\%$$

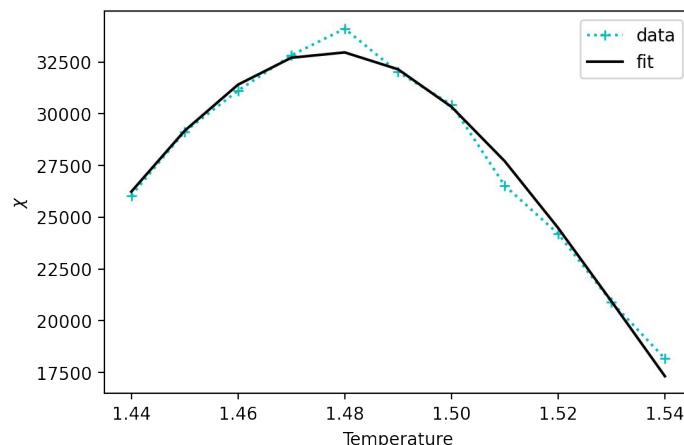


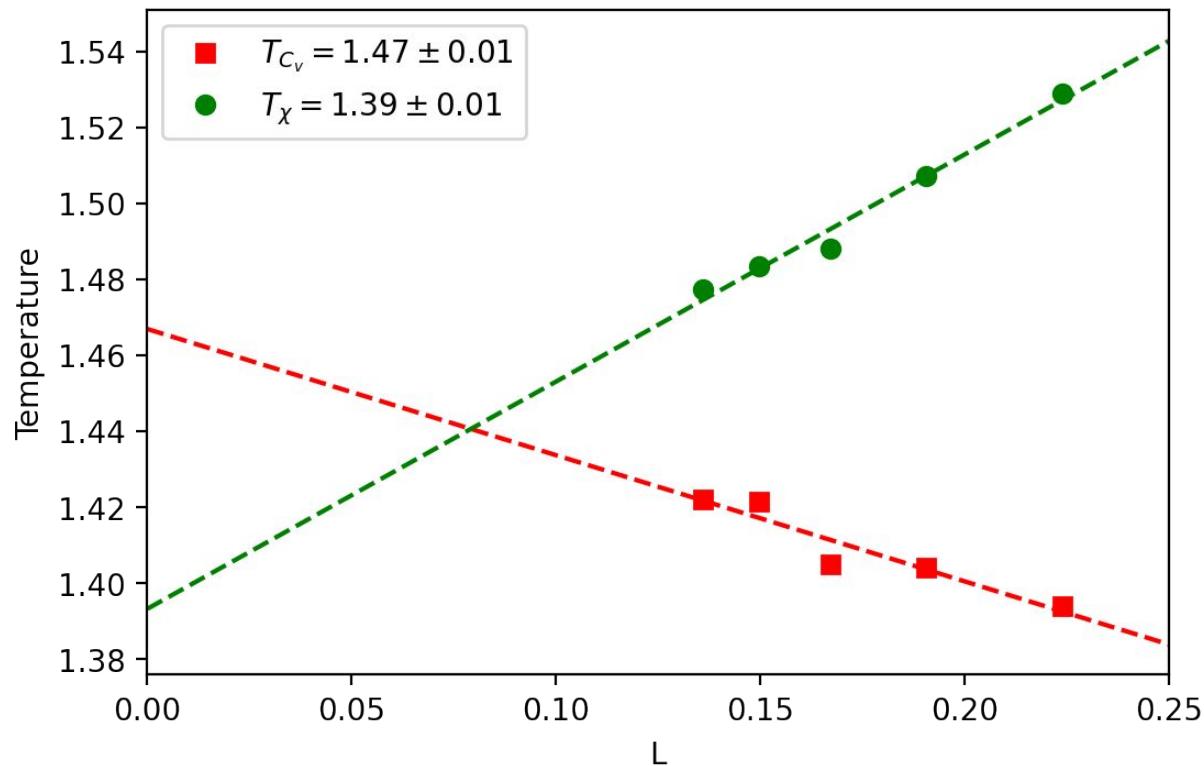
- Se desea verificar dos relaciones:

$$T_{\chi_{max}} \sim T_c + aL^{-1/\nu}$$

$$T_{C_{vmax}} \sim T_c + bL^{-1/\nu}$$

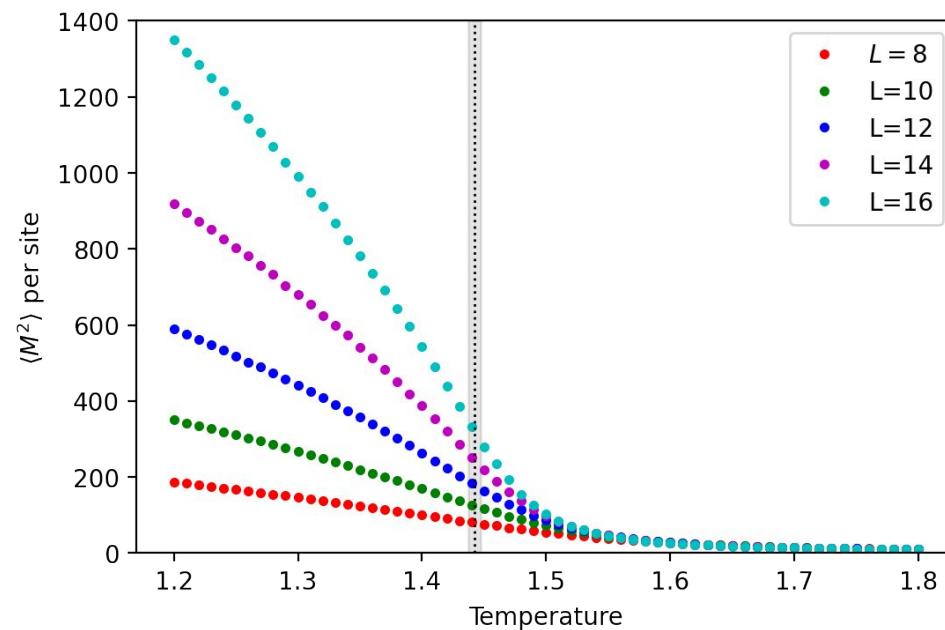
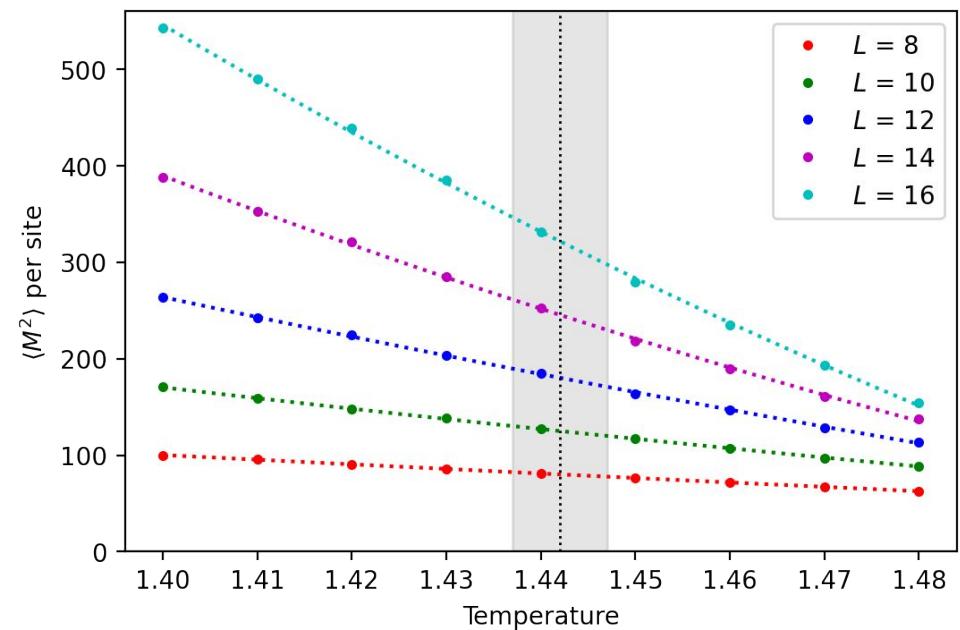
Los máximos de cada curva se identifican como la media de un ajuste gaussiano:



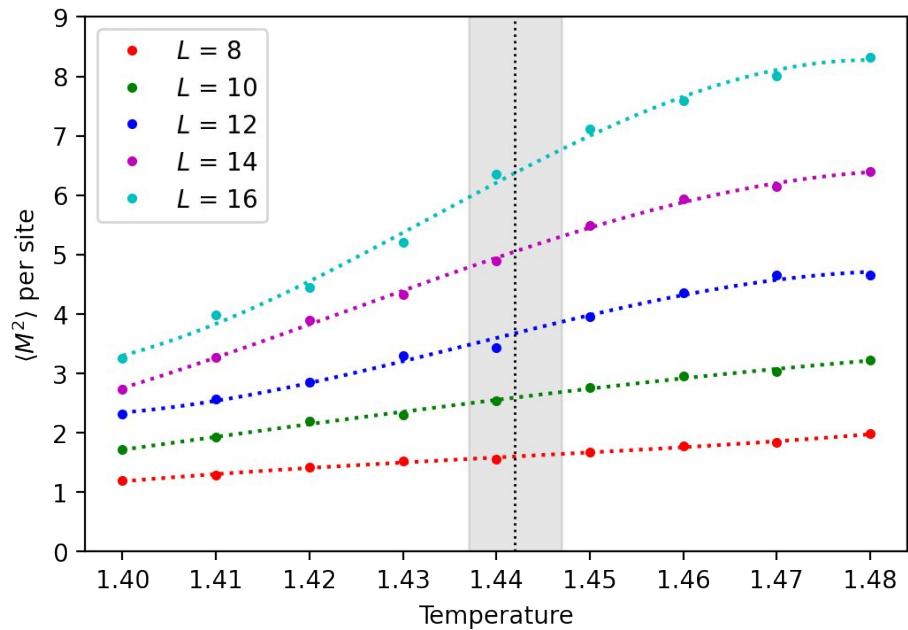
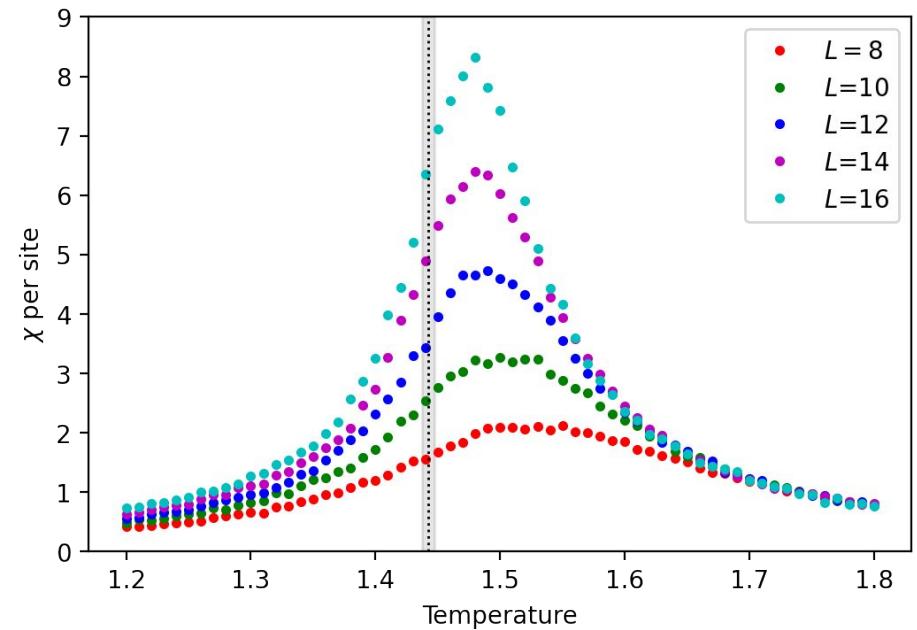


- Para encontrar el último exponente crítico $\frac{\gamma}{\nu} = 1.97$ se usan las relaciones:

$$\frac{1}{L^d} \langle M^2 \rangle_{T_c} \sim L^{\gamma/\nu}$$



$$\frac{1}{L^d} \chi_{T_c} \sim L^{\gamma/\nu}$$

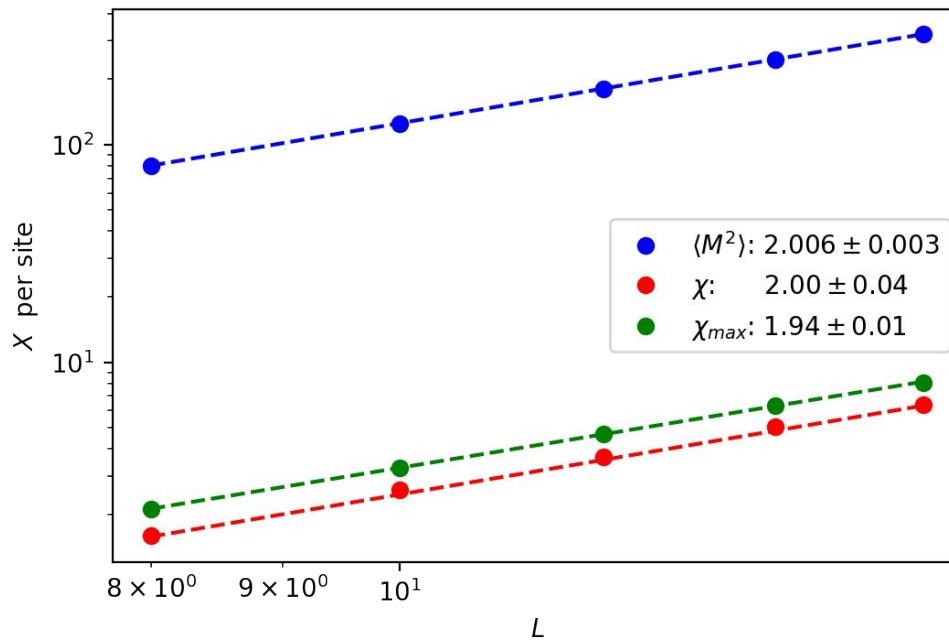


Se encuentra que el exponente es:

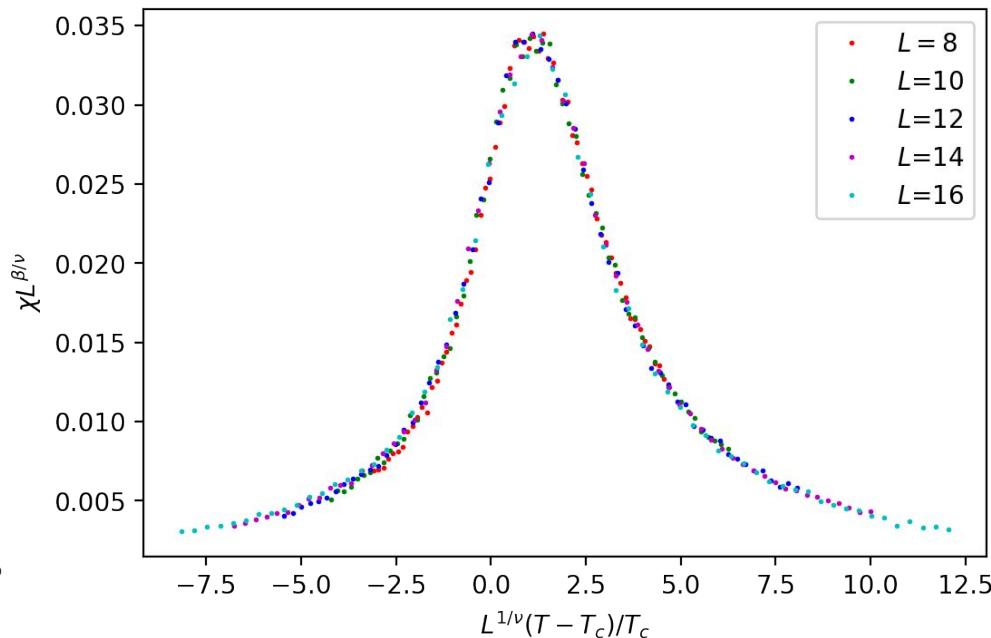
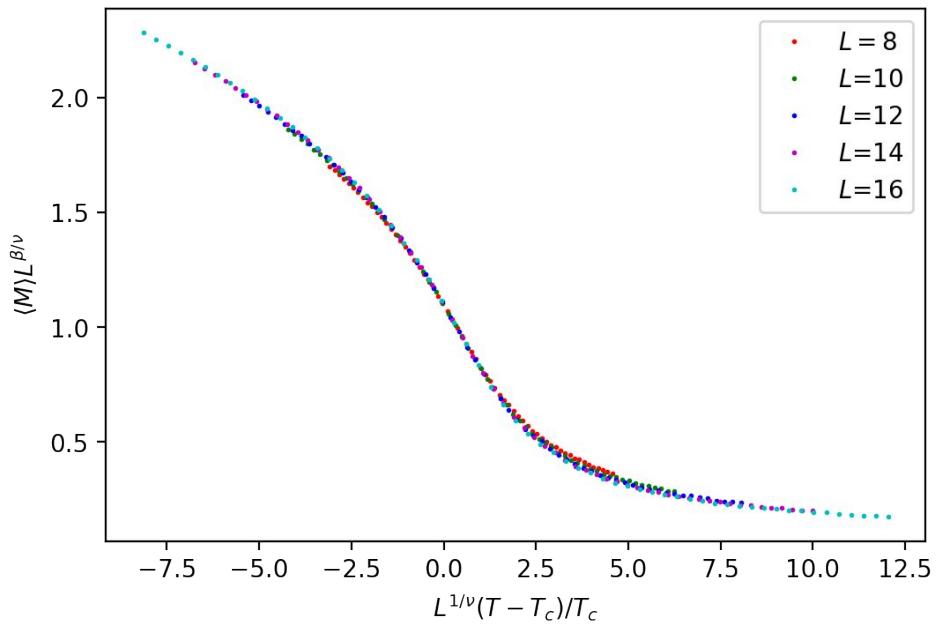
$$\frac{\gamma}{\nu} = 1.98 \pm 0.03$$

Con un error de:

$$\epsilon = 2\%$$



- Con los valores encontrados en los exponentes críticos se re-escalan las curvas de magnetización y susceptibilidad por sitio:



Técnicas de Histograma

Para calcular promedios, se hace necesario
muestrear diferentes temperaturas



Calcular a distintas
temperaturas y extrapolar
los demás!!

Podemos calcular los promedios térmicos como

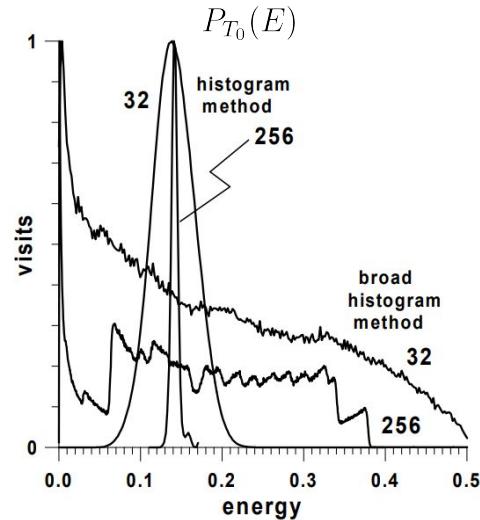
$$\langle Q \rangle_T = \frac{\sum_E Q(E) p_{T_0}(E) f_{T_0,T}(E)}{\sum_E p_{T_0}(E) f_{T_0,T}(E)}.$$

con

$$f_{T_0,T} = \exp\left(-\frac{E}{k_B T} + \frac{E}{k_B T_0}\right)$$

La idea es calcular la degeneración de estados $g(E)$ directamente,
explorando un rango más amplio de E

$$\langle Q \rangle_T = \frac{\sum_E Q(E) g(E) \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right)}{\sum_E g(E) \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right)}$$



Método de Histograma Ancho

Definimos \mathbf{R} como el conjunto de transiciones Γ_1 a Γ_2 , reversibles.

$$\sum_{\Gamma_{I_1}} N_{up} = \sum_{\Gamma_{I_2}} N_{dn}$$

$$\langle N_{dn} \rangle := \frac{1}{g(I_2)} \sum_{x \in \Gamma_{I_2}} N_{dn} \quad \langle N_{up} \rangle := \frac{1}{g(I_1)} \sum_{x \in \Gamma_{I_1}} N_{up}$$

Tomando $I_1 = E$ $I_2 = E + \Delta E$

$$g(E) \langle N_{up} \rangle = g(E + \Delta E) \langle N_{dn} \rangle$$

Ecuación de Histograma Ancho

Broad Histogram Method for Continuous Systems : The XY-Model

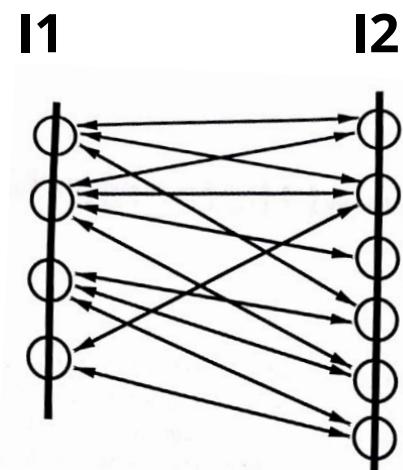
José D. Muñoz^{1,2}, Hans J. Herrmann^{1,3}

(1) Institute for Computer Applications 1, Stuttgart University,
Pfaffenwaldring 27, D-70569 Stuttgart, Germany

(2) Permanent address: Dpto. de Física, Universidad Nacional de Colombia,
Bogotá D.C., Colombia
E-mail: jdmunoz@ica1.uni-stuttgart.de

(3) E-mail hans@ica1.uni-stuttgart.de

September 22th, 1998



Tomando logaritmo a ambos lados y dividiendo por el incremento de energía:

$$\ln[g(E + \Delta E)] - \ln[g(E)] = \ln[\langle N_{up}(E) \rangle] - \ln[\langle N_{dn}(E + \Delta E) \rangle]$$

Esto es
precisamente
beta.

$$\frac{\partial \ln[g(E)]}{\partial E} = \frac{1}{\Delta E} \ln \left[\frac{\langle N_{up}(E) \rangle}{\langle N_{dn}(E + \Delta E) \rangle} \right]$$

Para obtener las cantidades promedio hacemos muestreos por **Monte Carlo**, y luego hacemos **tres** histogramas para las cantidades

$$N_{dn}(E), \ N_{up}(E), \ V(E)$$

Con esto definimos las cantidades promedio (**microcanonicas**) como

$$\langle N_{up}(E) \rangle = \frac{N_{up}(E)}{V(E)} \quad \langle N_{dn}(E) \rangle = \frac{N_{dn}(E)}{V(E)} \quad \langle M(E) \rangle = \frac{M(E)}{V(E)}$$

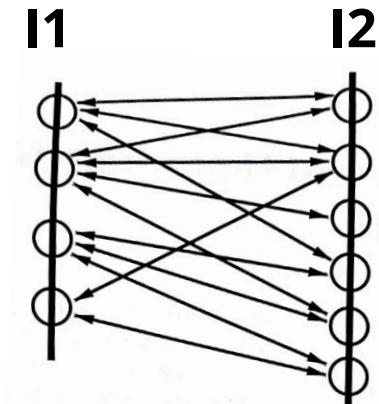
Como el modelo de Heisenberg es continuo necesitamos una forma de calcular

$$N_{dn}(E), \ N_{up}(E), \ V(E)$$

... aún cuando estas cantidades son en principio no contables.

La idea es definir una probabilidad a la transición

$$R(y|x) = \begin{cases} \frac{1}{N(x)} & \text{if } (y|x) \in R, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$



N(x) es el número total de transiciones desde **x**.

Entonces, la probabilidad de ir de **x** a un **y** en **I2** es

$$f_{\mathbf{I}}^x(I) = \sum_{y \in \Gamma_{I2}} R(y|x)$$

$$f_{\Delta \mathbf{I}}^x(\Delta I) = f_{\mathbf{I}}^x(I(x) + \Delta I).$$

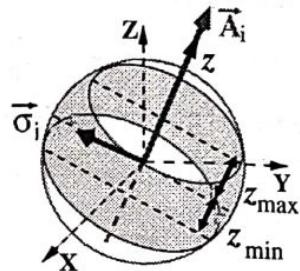
$$N_{up}(x) := f_{\Delta \mathbf{I}}^x(\Delta I_{fix}) , \quad N_{dn}(y) := f_{\Delta \mathbf{I}}^y(-\Delta I_{fix}) ,$$

Para el modelo de Heisenberg:

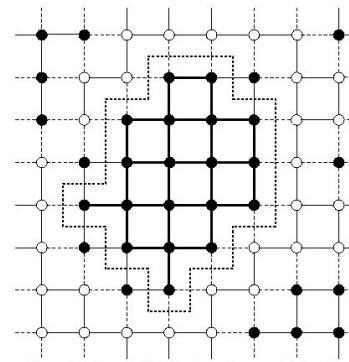
$$f_{\Delta E}^i(\Delta E) = \begin{cases} \frac{1}{2A_i} & ; \text{ if } |\Delta E + \varepsilon_{i,\text{old}}| < A_i \\ 0 & ; \text{ otherwise} \end{cases}$$

¿Cómo tomar muestras sobre un rango amplio de energías?

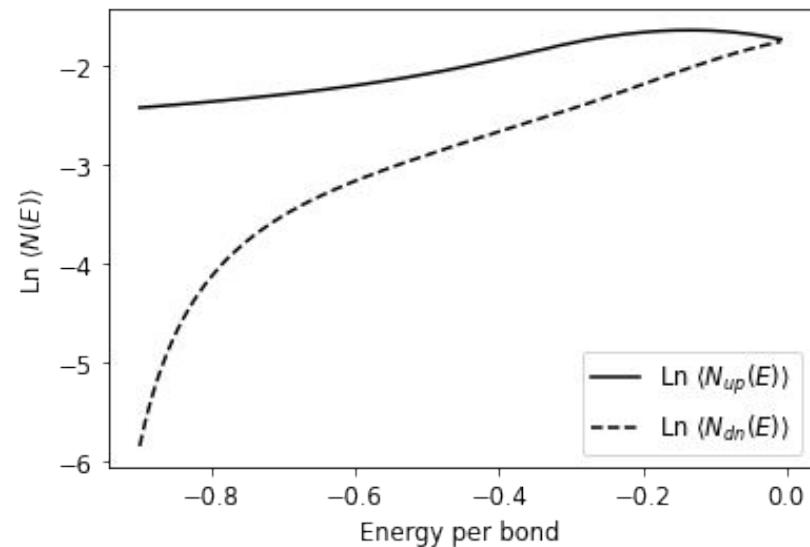
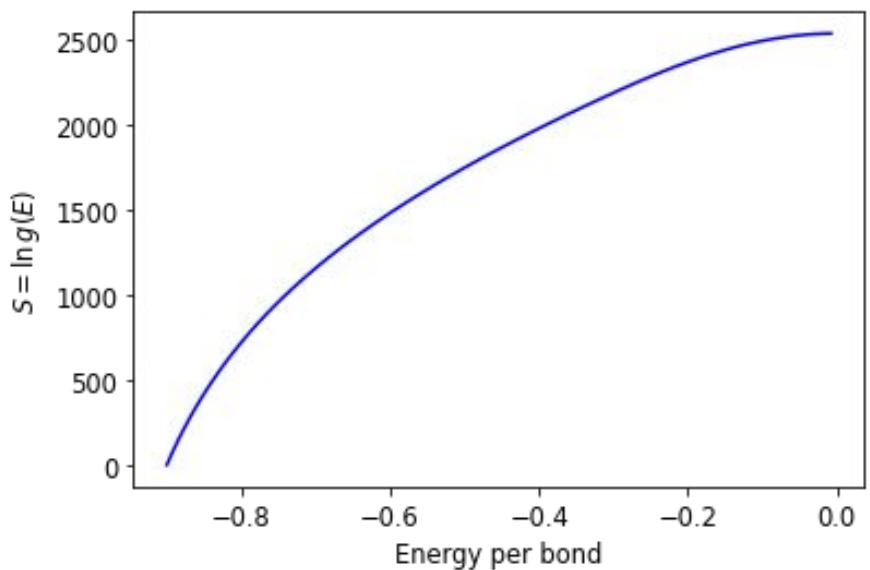
Microcanónico

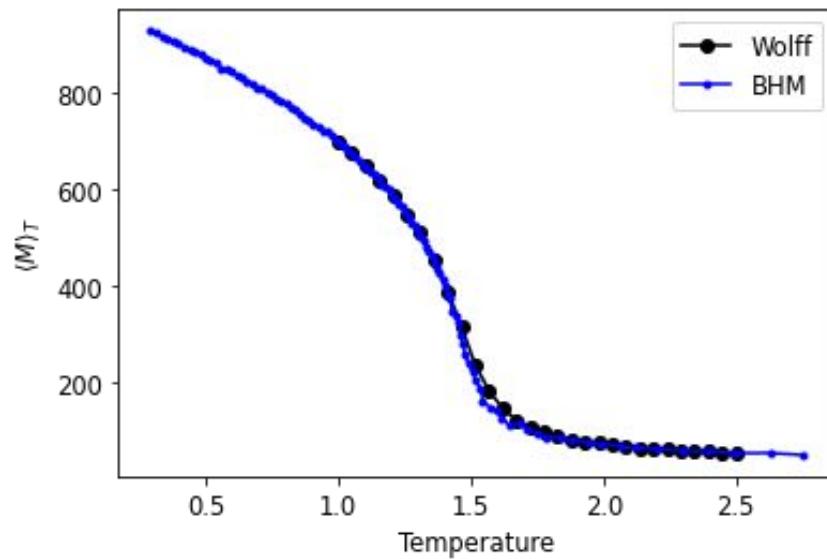
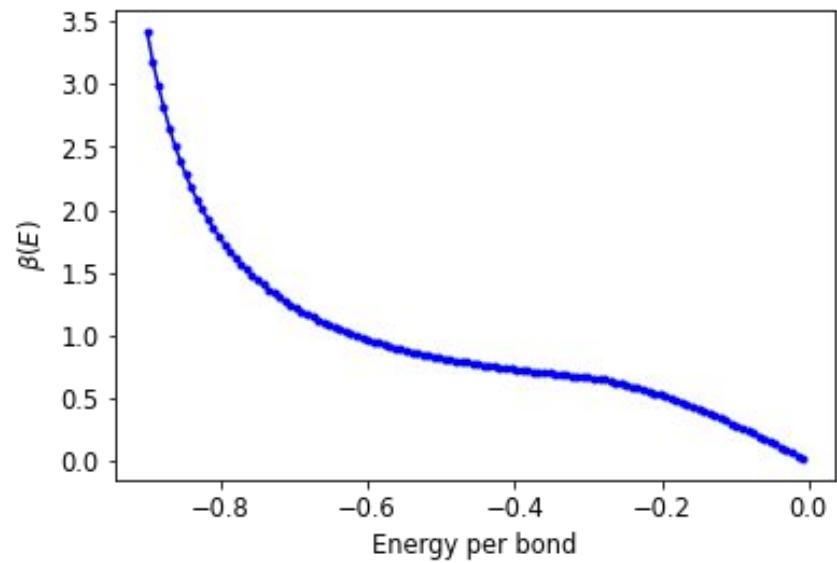


Canónico

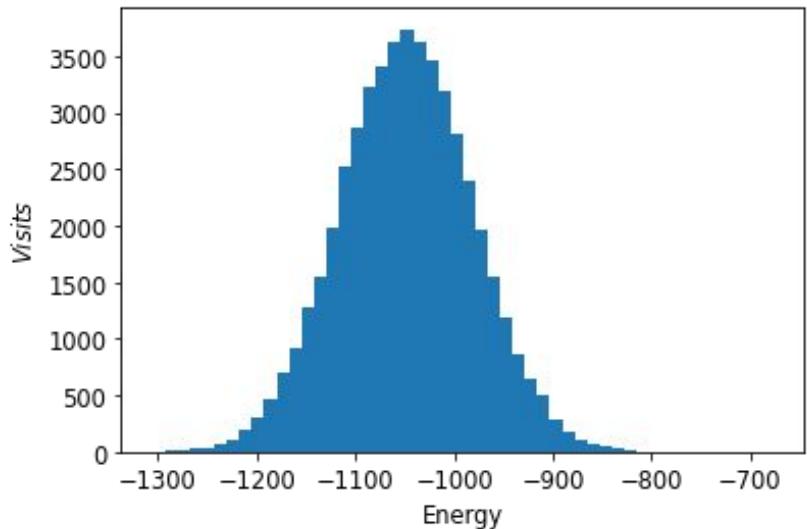


Con muestreo **microcanonico**

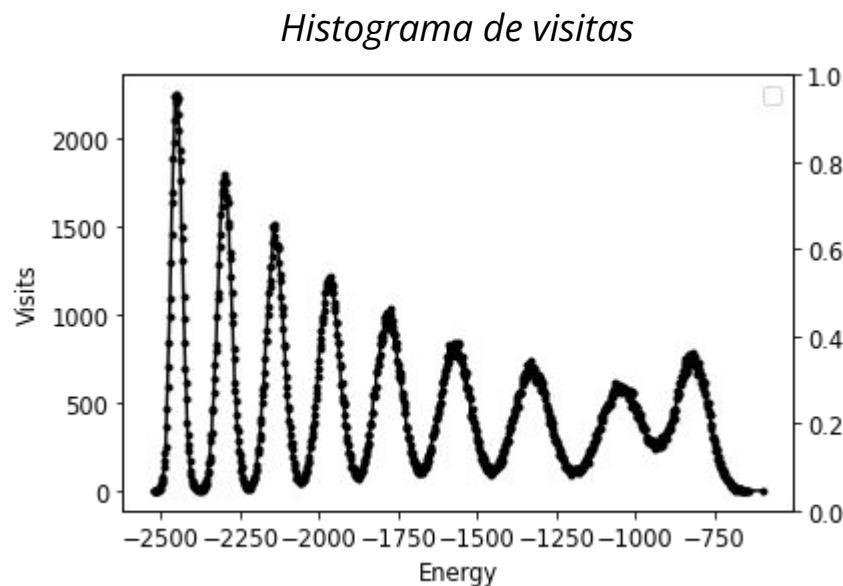




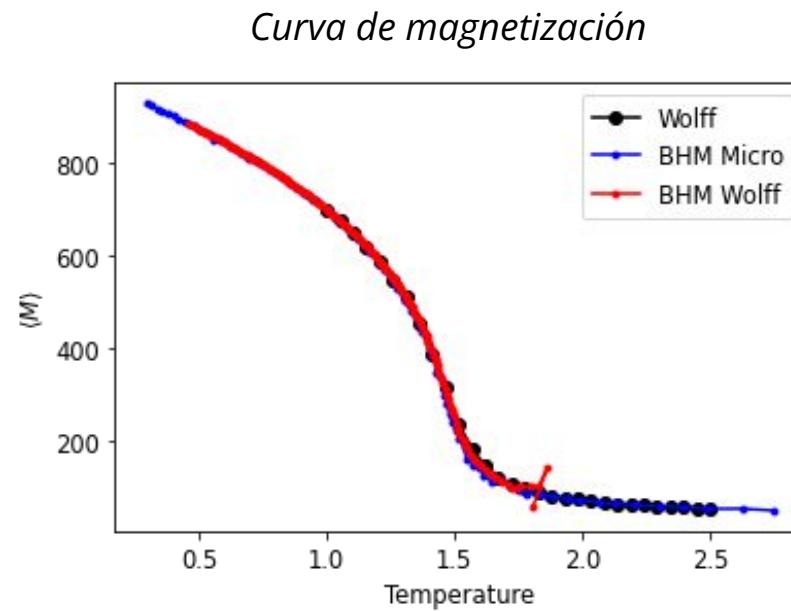
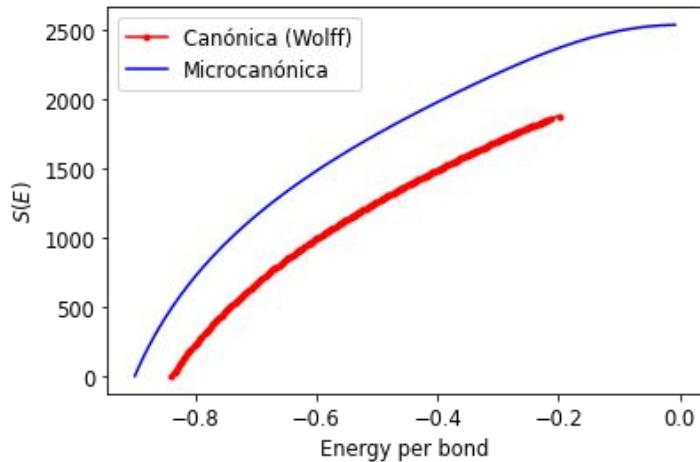
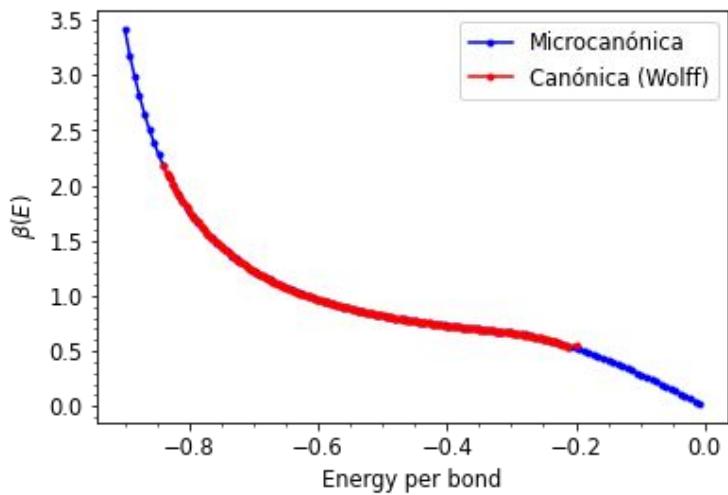
Y con muestreo **canónico**



En la temperatura crítica



Histograma de visitas



Gracias!

¿Preguntas?

Bibliografía principal

- Janke, W. (1996). Monte Carlo Simulations of Spin Systems. In: Hoffmann, K.H., Schreiber, M. (eds) Computational Physics. Springer, Berlin, Heidelberg. https://doi.org/10.1007/978-3-642-85238-1_3 Disponible en:
<https://www.physik.uni-leipzig.de/~janke/Paper/spinmc.pdf>
- Janke, W. (1993) Monte Carlo Study of Topological Defects in the 3D Heisenberg Model. [arXiv:hep-lat/9306020](https://arxiv.org/abs/hep-lat/9306020)

Otras referencias:

- Janke, W. (1996). Monte Carlo Simulations of Spin Systems. In: Hoffmann, K.H., Schreiber, M. (eds) Computational Physics. Springer, Berlin, Heidelberg.
- Andrea. P. (2002) Critical Phenomena and Renormalization-Group Theory. [arXiv:cond-mat/0012164](https://arxiv.org/abs/cond-mat/0012164)
- Böttcher, L., & Herrmann, H. (2021). Computational Statistical Physics. Cambridge: Cambridge University Press
- Stephen B. (2001) Magnetism in condensed matter , Oxford University Press
- Lawrence F. (2017) Theory of the anisotropic heisenberg ferromagnet (<https://core.ac.uk/download/pdf/80654634.pdf>)
- Beiträge zur Theorie des Ferromagnetismus und der Magnetisierungskurve
- Introduction to Statistical Mechanics. Phase Transitions. <https://web.stanford.edu/~peastman/statmech/phasetransitions.html>
- Minimally subtracted six loop renormalization of O(n)-symmetric φ^4 theory and critical exponents) Critical exponents of the O(N)-symmetric φ^4 model from the ϵ 7 hypergeometric-Meijer resummation)
- Thomson, S. J. (2022). A Short Introduction to Renormalisation Group Methods. Dr S J Thomson. Recuperado 11 de octubre de 2022, de https://steventhomson.co.uk/post/rg_guide/
- Oitmaa, J., Hamer, C.Zheng, W. (2006l).Series Expansion Methods for Strongly Interacting Lattice Models (1.). Cambridge University Press.
- E. Luijten:Introduction to Cluster Monte Carlo Algorithms, Lect.Notes Phys. 703, 13–38 (2006) DOI 10.1007/3-540-35273-2 1
- The Wolff Algorithm. (s.f.). Recuperado 7 de octubre de 2022, de <http://latt.if.usp.br/technical-pages/twawesab/Text.html/node1.html>
- M Lau and C Dasgupta 1988 J. Phys. A: Math. Gen. 21 L51