

FENÒMENS COL·LECTIUS I TRANSICIONS DE FASE

Simulació del model d'Ising 2D

Jordi Sabatés de la Huerta

Gener 2021

1. Introducció

En aquest treball hem volgut analitzar el comportament de diferents variables termodinàmiques. Per fer-ho, hem utilitzat una simulació del model d'Ising 2D per un sistema reticular amb camp extern nul $h = 0$ per simplificar els nostres càlculs. El hamiltonià del sistema pren l'expressió següent: $H\{S_1, S_2, \dots, S_N\} = -J \sum_{i,j} S_i S_j$

Per poder estudiar el model d'Ising en dues dimensions construirem una simulació Monte Carlo per una xarxa quadrada, on hi generarem una seqüència d'estats $\{S(i,j)\}$ corresponents a una cadena de Markov que, després d'un cert nombre inicial de passes, recorrerà l'espai de les fases amb els pesos corresponents a l'equilibri. Concretament, farem servir l'algoritme de Metrópolis.

Aquest és un mètode de Monte Carlo en cadena de Markov usat per obtenir una seqüència de mostres aleatòries a partir d'una distribució de probabilitat on el mostreig directe és complicat d'obtenir. L'algoritme escull un spin a l'atzar d'entre tots els de la matriu $\{S(i,j)\}$. Un cop escollit, calcula el canvi d'energia que es produiria si aquest spin es girés $S_i \rightarrow -S_i$. L'energia del sistema ve donada a partir del hamiltonià anteriorment descrit agafant només els 4 primers veïns. Si l'energia disminueix, acceptem el canvi. I si l'energia augmenta, en funció d'una distribució de probabilitats que depèn de la temperatura del sistema, acceptarem o no el canvi.

El mètode Metrópolis que fem servir, diem que és una cadena de Márkov, ja que és una sèrie d'esdeveniments, en la qual la probabilitat que passi un esdeveniment depèn de l'esdeveniment immediat anterior. Això fa que aquestes cadenes tinguin memòria i condiciona les possibilitats dels esdeveniments futurs. Per això necessitarem generar molts nombres aleatoris que estiguin molt descorrelacionats.

Per generar aquesta gran quantitat de nombres aleatoris descorrelacionats, de manera ràpida i amb una precisió elevada utilitzarem el generador mt19937. Aquest generador es basa en una tècnica anomenada "Mersenne Twister" de M. Matsumoto i T. Nishimura.

El nostre mètode per fer la simulació del model d'Ising és de l'ordre de 10^{19} vegades més petit que el model d'Ising per un sistema real. Això comporta que el nostre sistema estigui molt més afectat pels contorns ($\propto 10^9$) que el sistema real que volem estudiar. Per minimitzar aquest problema farem servir les condicions periòdiques de contorn. Aquestes condicions modifiquen el sistema per donar-li forma toroidal. Simulem un sistema infinit però periòdic. Es considera que el sistema simulat està envoltat de còpies idèntiques en totes les direccions.

Per fer la nostra simulació hem agafat una caixa de mida N ($L \times L$) i li hem aplicat 40.000 passes del nostre mètode Monte Carlo. Per evitar correlacions amb els nombres aleatoris agafats, hem repetit aquest procés 200 vegades, una per cada llavor diferent utilitzada per generar els nombres aleatoris. I això ho hem fet per a 200 temperatures diferents, per estudiar les variables en funció de la temperatura a la qual estigui el sistema i veure com aquest evoluciona en augmentar o disminuir-ne la temperatura.

Un cop feta la simulació, la repetirem per diferents mides del sistema, per tal d'observar els diferents canvis en el comportament de les magnituds. Un cop obtingut el comportament de les diferents variables a estudiar, analitzarem les dades per poder calcular la temperatura crítica i els diferents exponents crítics que prediu la teoria.

2. Evolució temporal

En aquesta simulació, quan parlem d'evolució temporal, no ens referirem als segons que tardem a completar la simulació, sinó que prendrem com a unitat de temps cadascuna de les passes Monte Carlo. Utilitzarem aquest índex per comparar diverses simulacions i mesurar-ne la qualitat a l'hora d'obtenir una solució més aproximada al valor buscat. Sempre i quan les configuracions estiguin descorrelacionades, més passes significaran millors resultats.

Per estudiar l'evolució temporal construïrem un codi MC a diferents temperatures i veurem com es comporten les variables energia i magnetització al llarg de les passes de MC. En el nostre cas utilitzarem la llavor 234567, la mida de la xarxa quadrada $L=32$, i les temperatures 1.5, 1.8, 2.5, 3.5 i 4.5 i 4.5

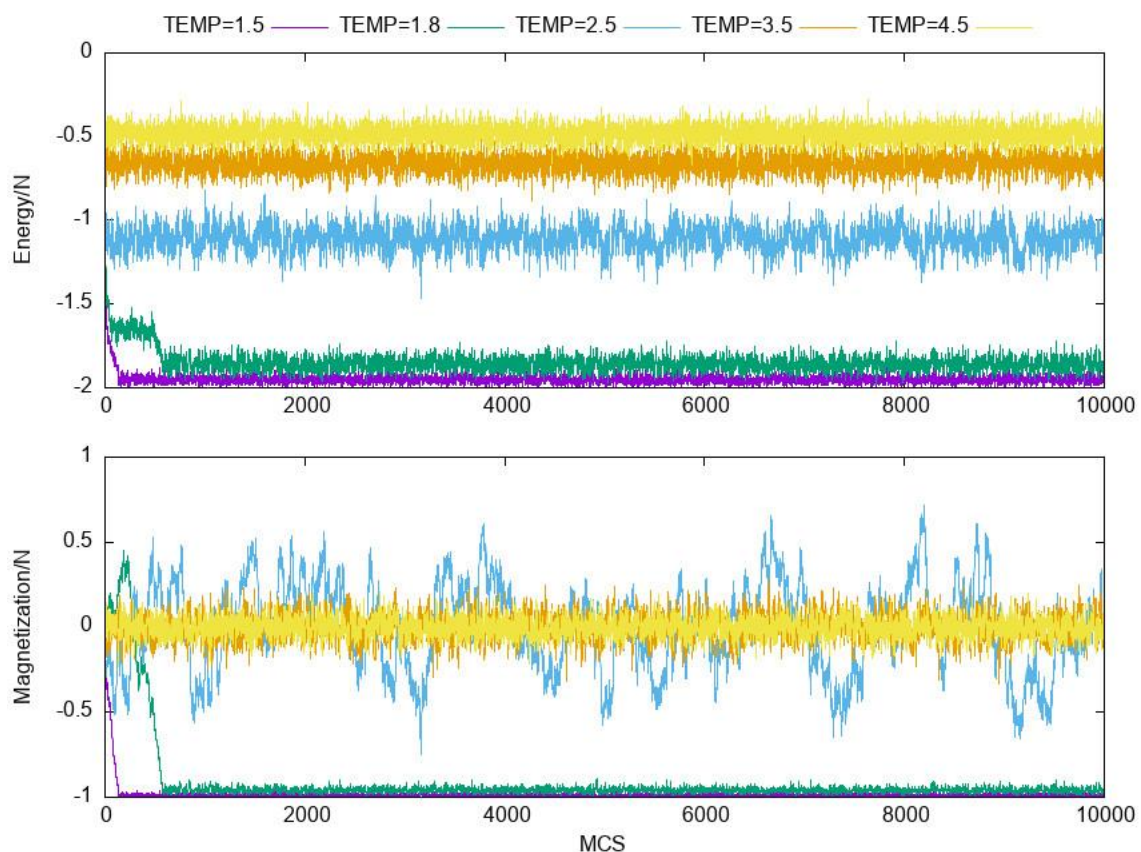


Figura 1: Evolució temporal de l'energia i la magnetització per diverses temperatures.

A la figura 1 podem veure els valors que prenen les variables energia i magnetització en funció de les passes de MC per diferents temperatures que van des de $T=1.5$ fins a $T=4.5$. Veïem com l'energia pren diferents valors en funció de la temperatura estudiada. A primera aproximació, podríem suposar que com major sigui la temperatura, major serà l'energia obtinguda. Pel que fa a la magnetització, veïem com les temperatures més elevades tendeixen a una magnetització nul·la, i les temperatures més baixes tendeixen a una magnetització igual a -1.

Tant els valors de l'energia com els de la magnetització tarden al voltant de l'ordre de 10^3 passes del programa Monte Carlo en "estabilitzar-se".

Els valors de les dues variables no prenen un valor constant, sinó que fluctuen al voltant del valor esperat que prendria la variable en aquella temperatura. Un exemple clar és el de la magnetització per a les temperatures $T=3.5$ i $T=4.5$. El seu valor esperat és 0, però la magnetització oscil·la al voltant d'aquest valor. Aquest fenomen prové del mateix algorisme de Metròpolis, el qual, com hem explicat abans, fa variar la configuració del sistema (així doncs, també varia l'energia i la magnetització) triant un valor q a l'atzar. Per tant, l'aleatorietat és qui fa fluctuar els valors.

En canvi, per la temperatura $T=2.5$, veiem un comportament diferent dels altres. L'energia d'aquesta temperatura tendeix a un valor aproximat de -1, però, la magnetització va variant entre $M>0$ i $M<0$. Veiem que fluctua al voltant del 0 amb una amplitud molt més gran que les altres. Podem dir que aquesta temperatura presenta un comportament inestable en la magnetització al voltant del 0. Més endavant veurem perquè és degut aquest comportament.

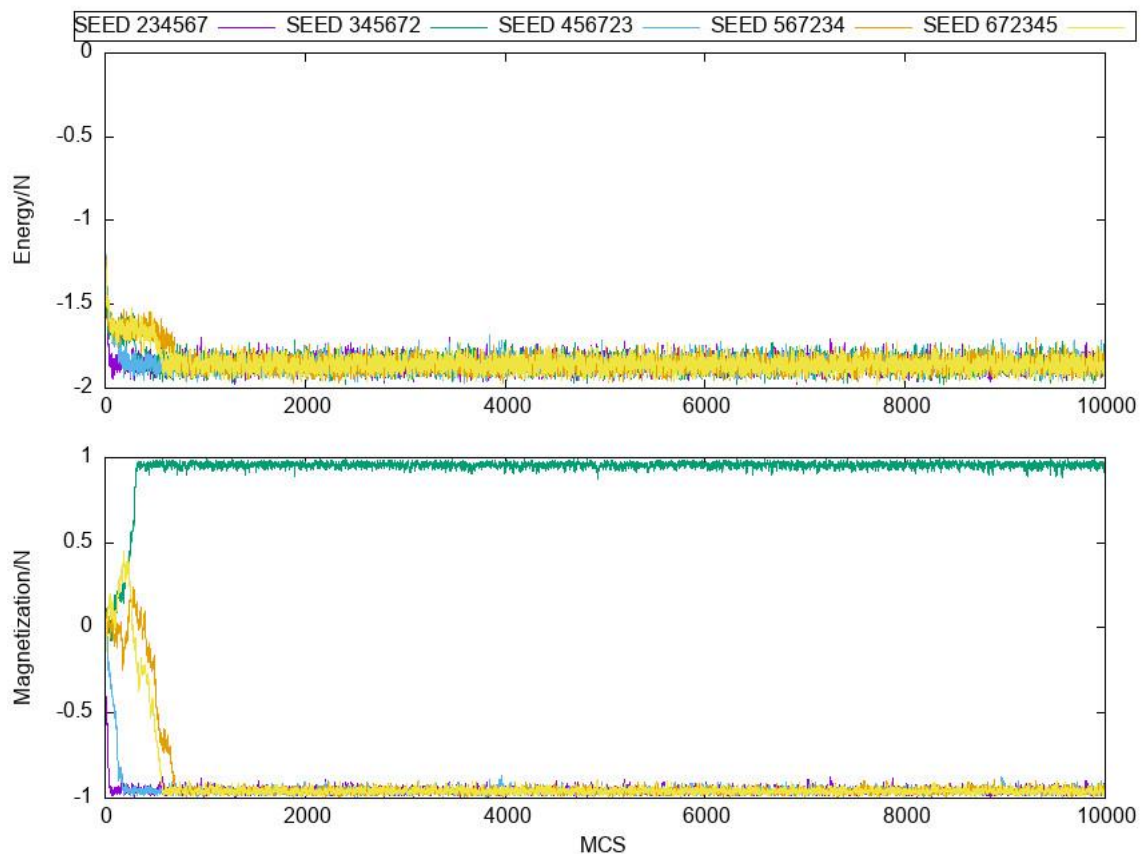


Figura 2 Evolució temporal per l'energia i la magnetització per diferents llavors.

A la figura 2 tenim els diferents valors que prenen l'energia i la magnetització per una temperatura $T=1.8$ i una mida de xarxa quadrada $L=32$. En aquesta gràfica hem pres diferents valors de la llavor a l'hora de calcular l'algorisme Metròpolis i així veure com es comporten aquestes dues variables en funció de la llavor escollida.

L'energia tendeix sempre al mateix valor independentment de la llavor que escollim, en canvi, la magnetització si varia. Depenent de la llavor que escollim per executar el programa MC, la magnetització tendirà a $M=1$ o bé $M=-1$. Això és degut al fet que la cadena de Markov presenta correlacions temporals molt fortes amb l'estat inicial (en les primeres passes de MC) i entre

configuracions consecutives. Aquestes correlacions depenen de la temperatura i de la mida del sistema. A baixa temperatura l'espai de les fases està separat en dues regions simètriques, que corresponen a $M>0$ i $M<0$ i que estan separades per barreres energètiques molt difícils de saltar en poques passes de MC com les que fem servir nosaltres. La cadena, és teòricament irreduïble, però calen moltes passes per aconseguir accedir a l'altre costat de l'espai de les fases.

Per obtenir millors mitjanes i que les estimacions de l'error siguin correctes, necessitem que les configuracions siguin descorrelacionades. Així doncs, per arreglar aquest problema farem promitjos sobre les llavors començant amb diferents configuracions a l'atzar. Estadísticament, la meitat de les configuracions sortiran a $M>0$ i l'altra meitat a $M<0$

3. Comportament de l'energia, el paràmetre d'ordre, la capacitat calorífica i la susceptibilitat en funció de la temperatura per $L=32$

En aquest apartat estudiarem com es comporten les diferents variables en funció de la temperatura per una mida del sistema donada. En aquest cas serà $L=32$. Correrem el programa MC3.f per temperatures entre $T=1.40, 1.41, 1.42, \dots, 3.40$, $L=32$, 40000 passes Monte Carlo i promitjades per 200 llavors per cada temperatura.

En total ens surten 380000 configuracions diferents per cada una de les 200 temperatures que estudiem.

3.1. Energia

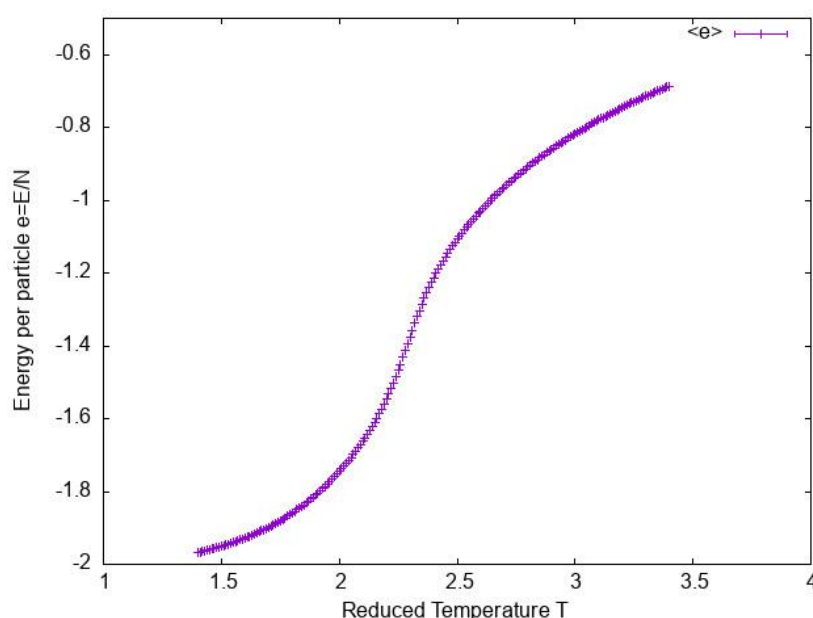


Figura 3: Energia per partícula en funció de la temperatura reduïda

Com podem veure a la figura prèvia, l'energia mitjana per partícula tendeix a -2 per a baixes temperatures, tal com prediu la teoria, ja que tots els spins estarien orientats d'igual manera. A mesura que augmentem la temperatura també ho fa l'energia. A l'arribar a aproximadament $T=2.3$ la corba experimenta un canvi de curvatura, un punt d'inflexió, a causa d'un possible canvi de fase del sistema en aquesta temperatura. A partir d'aquí, l'energia tendeix lentament cap a zero per a temperatures altes, cosa que també esperàvem, ja que a altes temperatures, el sistema tindrà equiprobabilitat entre spins up-spins down.

3.2. Magnetització

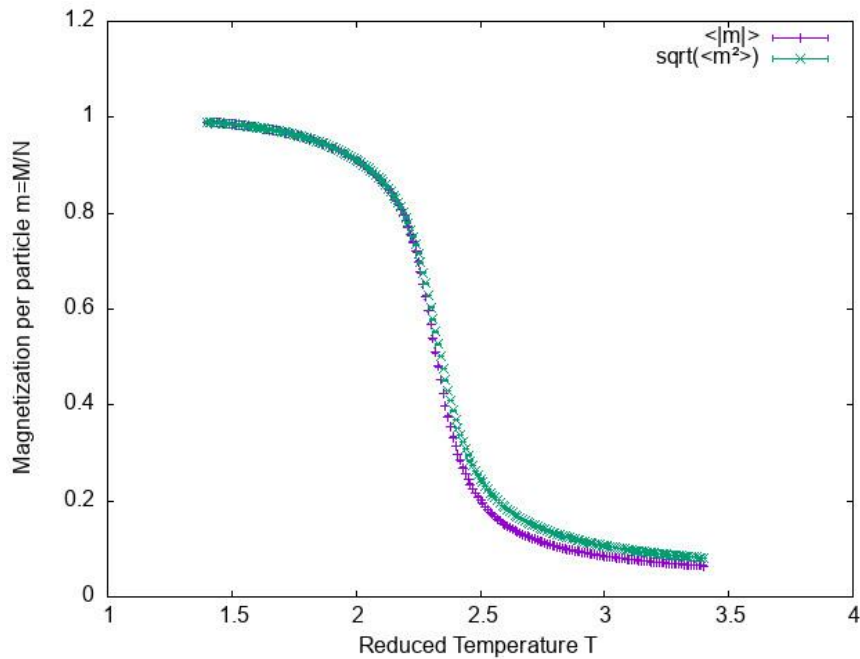


Figura 4: Magnetització per partícula en funció de la temperatura reduïda

Per la magnetització (paràmetre d'ordre del sistema) estudiarem la variable $\langle |m| \rangle$ (també $\sqrt{\langle m^2 \rangle}$). Si estudiéssim simplement $\langle m \rangle$ obtindríem una magnetització mitjana igual a zero. Això passa en fer servir N llavors per córrer el nostre programa, com hem explicat prèviament.

A baixes temperatures la magnetització tendeix a 1, ja que tenim tots els spins en la mateixa direcció. Si augmentem la temperatura, la magnetització disminueix cap a 0. Tots els spins tenen la mateixa probabilitat d'estar cap amunt o cap avall, per tant la meitat contribueix positivament i l'altra meitat negativament, donant com a resultat una magnetització nul·la. Com passa també amb l'energia, a $T \approx 2.3$ trobem el punt d'inflexió ocasionat pel canvi de fase.

3.3. Capacitat Calorífica

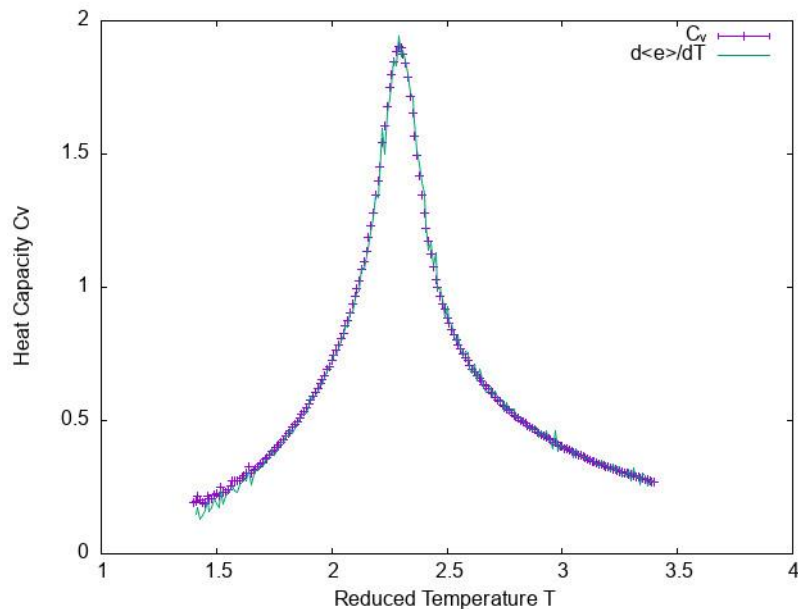


Figura 5: Representació de la capacitat calorífica i de la derivada de l'energia en funció de la temperatura reduïda

La capacitat calorífica l'obtidrem mesurant les fluctuacions de l'energia com $C_v^* = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{NT^2}$ i també a partir de la derivada de l'energia respecte a la temperatura.

Com veiem a la figura 5, la capacitat calorífica presenta un pic al voltant de la $T=2.3$, cosa que confirma la sospita d'una temperatura crítica prop d'aquell punt. Això revela que el sistema pateix un canvi de fase per aquesta temperatura.

Podem també observar com el valor de la derivada s'assimila al de la capacitat calorífica per totes les temperatures estudiades. Això és un indicador que el nostre programa MC està ben equilibrat. Per a temperatures més baixes podríem tenir problemes a l'hora d'obtenir els resultats.

3.4 Suszeptibilitat

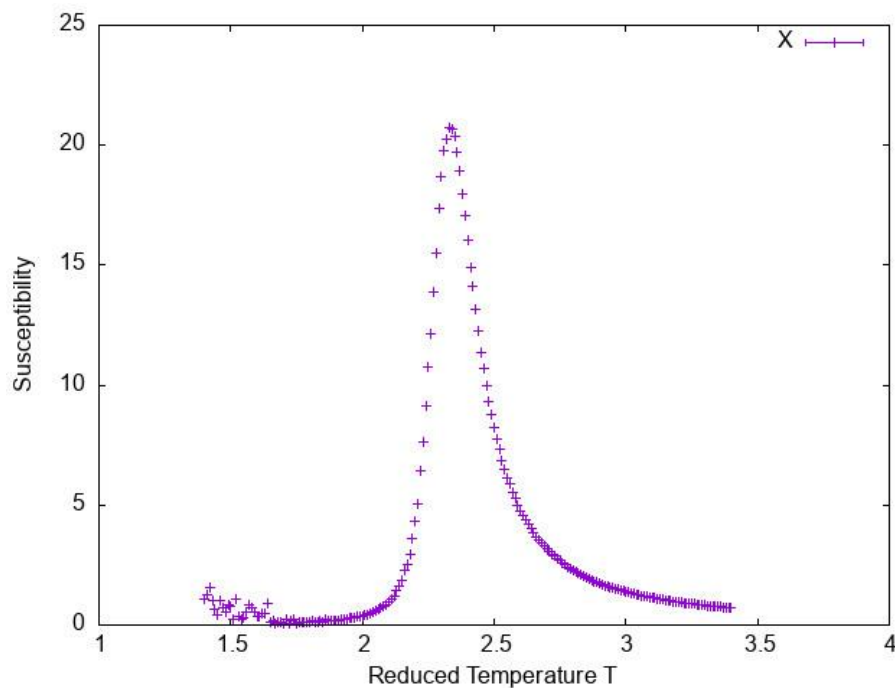


Figura 6: Representació de la susceptibilitat magnètica en funció de la temperatura reduïda

La susceptibilitat la calcularem a partir de les fluctuacions de la imantació: $\chi^* = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{NT}$. També observem com presenta un pic aproximadament a $T=2.3$, confirmant així també la presència d'un punt crític.

4. Efecte en variar la mida del sistema

La mida del sistema ve definida pel paràmetre L com $N = L \times L$. Com hem dit abans, la cadena de Markov dins del nostre programa presenta correlacions temporals lligades amb l'estat inicial del sistema que depenen tant de la temperatura com de la mida del sistema L . Per tant, en augmentar L obtenim resultats més precisos. Per veure aquest fenomen farem els càlculs amb diferents valors de L : $L=8, 16, 32$ i 64 .

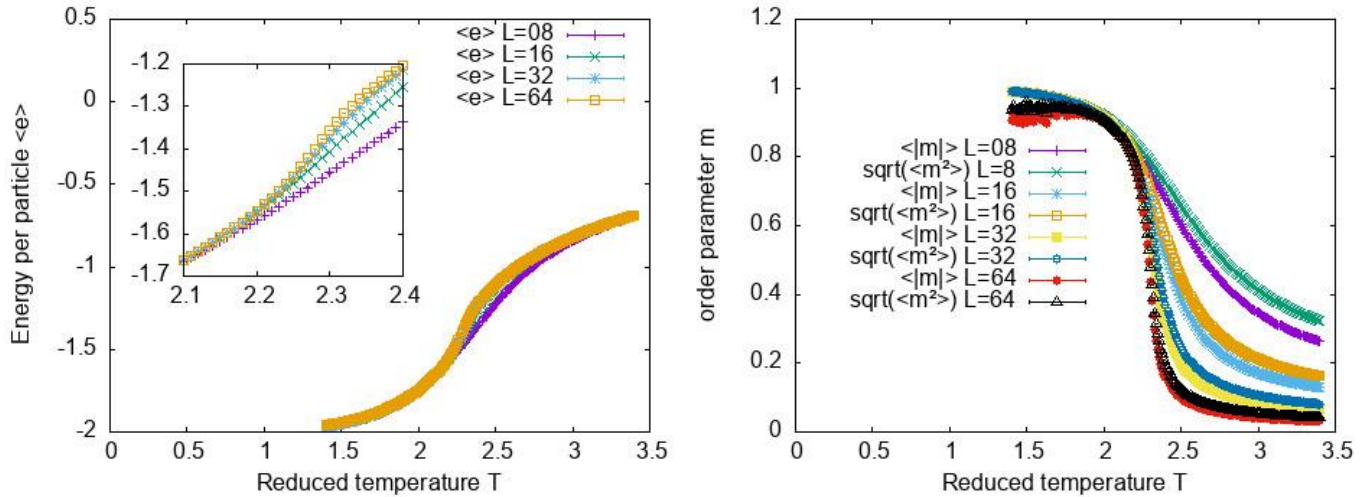


Figura 7: Representació de l'energia i el paràmetre d'ordre m en funció de la temperatura reduïda per diferents valors de L

A la figura 7 podem veure els efectes en canviar la mida del sistema per l'energia i la magnetització. Observem com els canvis de curvatura en passar pel punt d'inflexió són més remarcats per L grans i més suavitzats per L petits. Podem estudiar de manera més precisa la temperatura a la qual fa el canvi de fase.

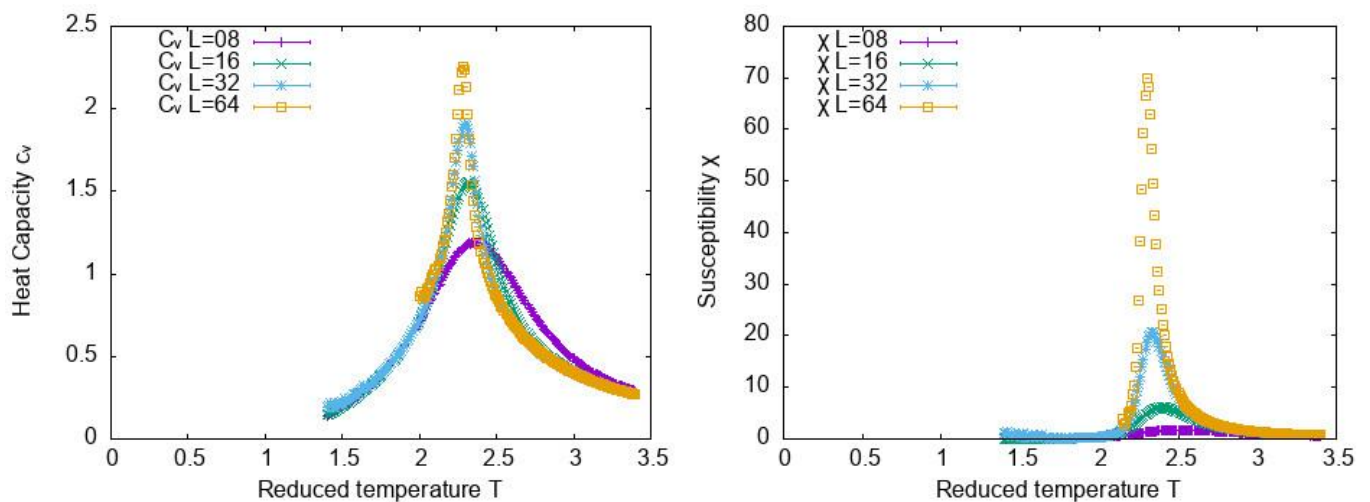


Figura 8: Representació de la capacitat calorífica i de la susceptibilitat en funció de la temperatura reduïda per diferents valors de L

En aquest cas, per la capacitat calorífica i la susceptibilitat, podem veure l'efecte en canviar la mida d'una forma més rellevant. A l'augmentar el valor de L observem que: el pic de les gràfiques esdevé més pronunciat, el valor màxim augmenta i aquest es desplaça lleugerament cap a

l'esquerra. Així, com hem previst abans, en augmentar L obtenim valors més precisos de les variables a estudiar. Per tant, extrapolant els càlculs fins a l'infinit, obtindríem la temperatura crítica exacta. No hem tingut en compte els valors de temperatures baixes per $L=64$, ja que el programa fallava.

5. Determinació de la temperatura crítica

Per obtenir la temperatura crítica, hem d'extrapolar a l'infinit els nostres càlculs. Per fer-ho, agafarem les temperatures pseudo-crítiques obtingudes pels diferents valors de L que hem estudiat. Les temperatures pseudo-crítiques seran causades per aquelles que facin maximitzar la funció susceptibilitat i la capacitat calorífica (agafarem la temperatura dels pics de les gràfiques d'aquestes variables).

De la teoria veiem com, a través del comportament dels exponents crítics, en surt la relació $T_{cL} = T_c + DL^{-\frac{1}{\nu}}$, la qual pren una tendència lineal, ja que $\nu = 1$. Així doncs, per trobar la temperatura crítica que busquem, haurem de fer una regressió lineal a partir de la gràfica T_{cl} enfront $\frac{1}{L}$ i extrapolar per $L = \infty$

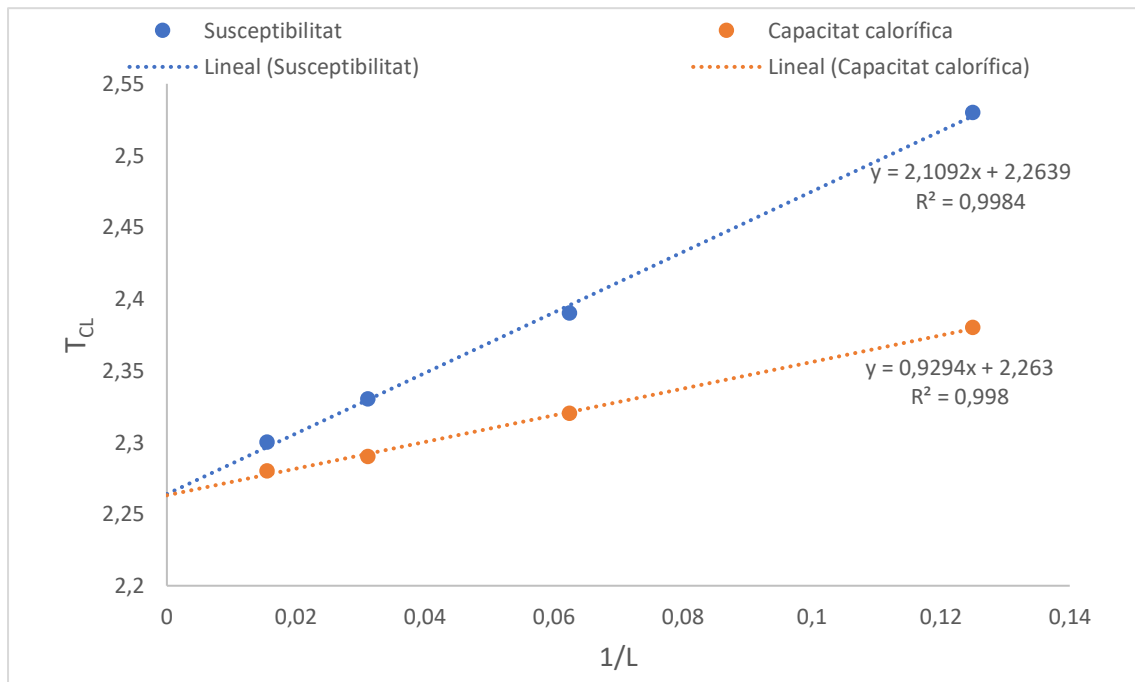


Figura 9: Representació de les temperatures pseudo-crítiques de la susceptibilitat i la capacitat calorífica en funció de $1/L$

Fent l'extrapolació per la susceptibilitat hem obtingut una $T_c = 2,26 \pm 0,01$

Per l'extrapolació de la capacitat calorífica trobem també una $T_c = 2,26 \pm 0,01$

Comparant amb el valor teòric, de $T_c = \frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})} = 2,2691$, veiem que les temperatures críiques obtingues son correctes ja que estan dins del marge d'error.

6. Determinació dels exponents crítics

6.1. Estimació de ν

Un cop hem calculat la T_c podem obtenir un càlcul aproximat de ν a partir de l'equació de T_{cL} . Aplicant logaritmes a cadascuna de les bandes de l'igual, obtenim l'expressió: $\log(T_{cL} - T_c) = -(1/\nu) \log(DL)$. Així doncs, a partir de la gràfica $\log(T_{cL} - T_c)$ vs $\log(DL)$, obtindrem el valor de ν a través del pendent. Per fer els càlculs, utilitzarem la mitjana entre les dues temperatures crítiques abans trobades: $T_c = \frac{2,2639+2,263}{2} = 2,2635$

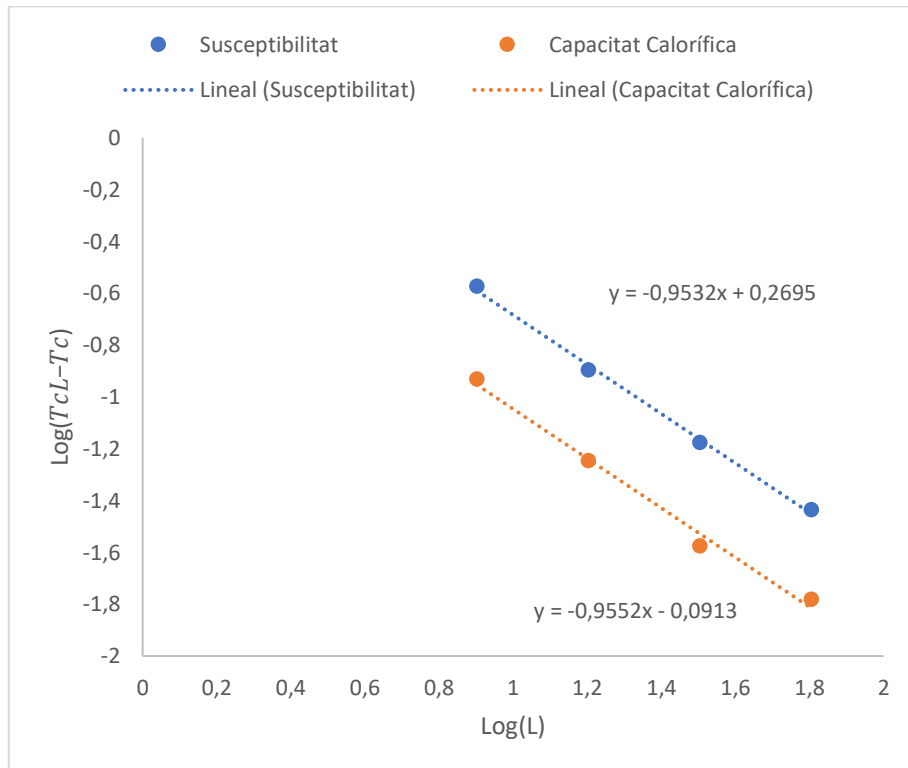


Figura 10: Representació de $\log(T_{cL} - T_c)$ en front de $\log(L)$

Obtenim per a la susceptibilitat un valor de: $-(1/\nu) = -0,95 \pm 0,05$, $\nu_\chi = 1,05 \pm 0,05$

I per la capacitat calorífica: $-(1/\nu) = -0,95 \pm 0,08$, $\nu_{Cv} = 1,05 \pm 0,08$

Veiem que els valors obtinguts són prou propers al valor exacte amb una certa incertesa.

6.2. Estimació de γ

Una vegada obtinguts els valors de T_c i ν podem obtenir l'exponent γ a partir del comportament de l'alçada dels pics de la susceptibilitat que hem obtingut ajustant les paràboles. A partir de l'expressió $\chi = A|T - T_c|^{-\gamma}$, obtenim $\chi(T_{cL}) = BL^{\gamma/\nu}$. Aplicant logaritmes obtindrem una expressió per $\frac{\gamma}{\nu}$.

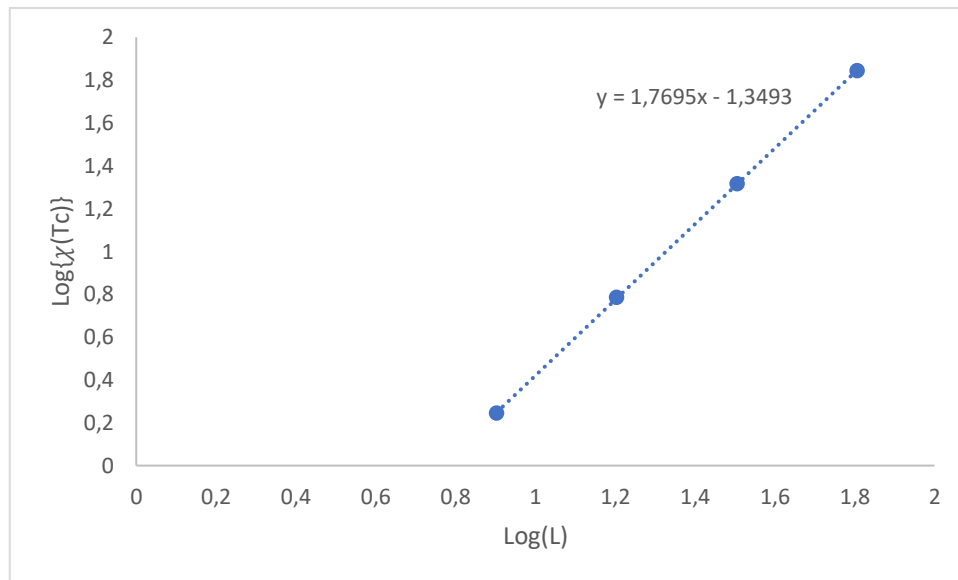


Figura 11: Representació de $\log\{\chi(T_c)\}$ en front de $\log(L)$

Tenim $\frac{\gamma}{\nu} = 1,7695 \pm 0,01$ que s'apropa al valor teòric de $\frac{\gamma}{\nu} = 1,75$

6.3. Estimació de α

Procedim de la mateixa manera que a l'apartat anterior però ara per la capacitat calorífica en comptes de la susceptibilitat.

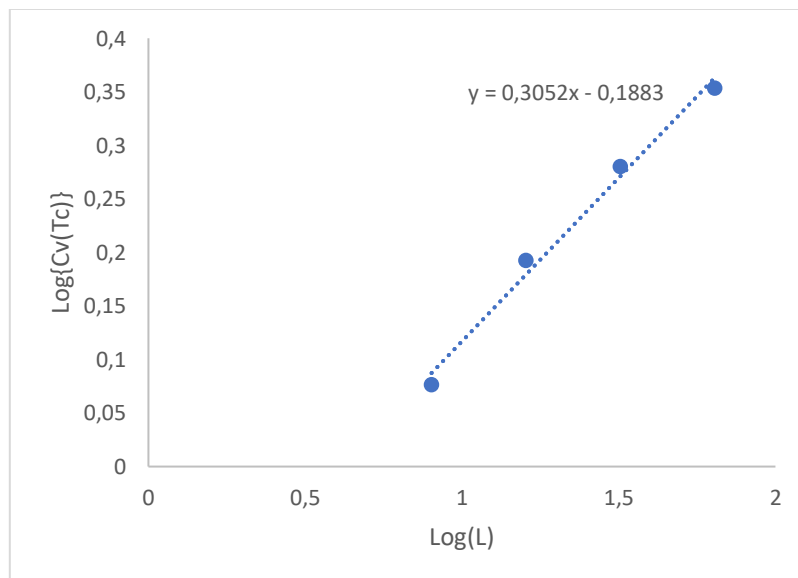


Figura 12: Representació de $\log\{C_v(T_c)\}$ en front de $\log(L)$

Per aquest cas obtenim un valor de $\alpha = 0,3052 \pm 0,01$. Comparant-lo amb el valor teòric $\alpha = 0$ veiem que el nostre valor s'allunya.

6.4. Estimació de β

Per calcular β ho farem de manera similar als anteriors però fixant-nos en la magnetització. Usarem els valors que pren la magnetització quan la temperatura passa pel punt crític. Ens quedarà una equació: $|m|(T_{cL}) = BL^{-\beta/\nu}$ de la qual trobarem $\frac{-\beta}{\nu}$ aplicant logaritmes.

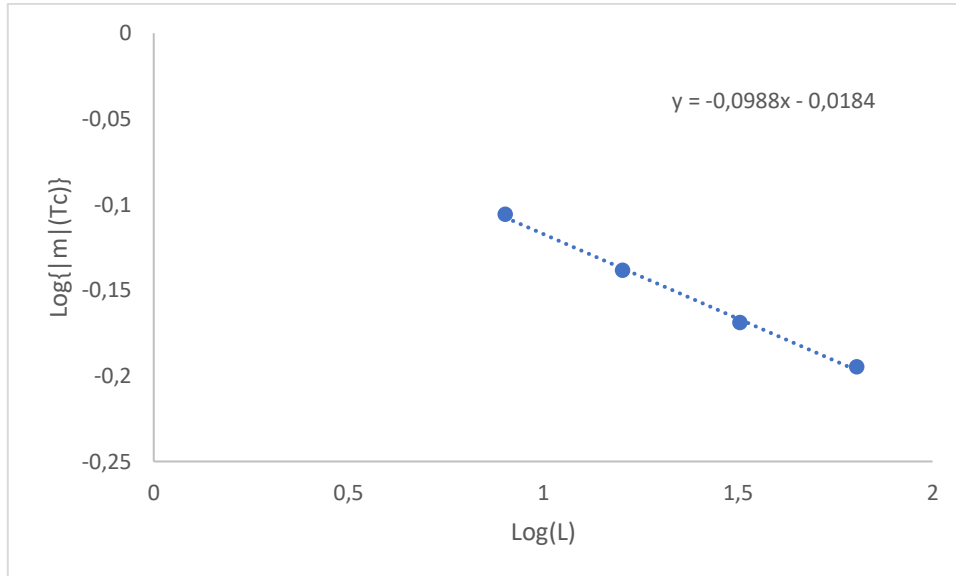


Figura 13: Representació de $\log\{|m|(T_c)\}$ en front de $\log(L)$

Obtenim un valor de $\beta = 0,0988 \pm 0,04$, que s'aproxima dins de la incertesa al valor teòric de $\beta = 0,125$

L'exponent δ no el podem calcular, ja que considerem el cas en què $H = 0$

6.5. Comprovació de FSS

- Susceptibilitat

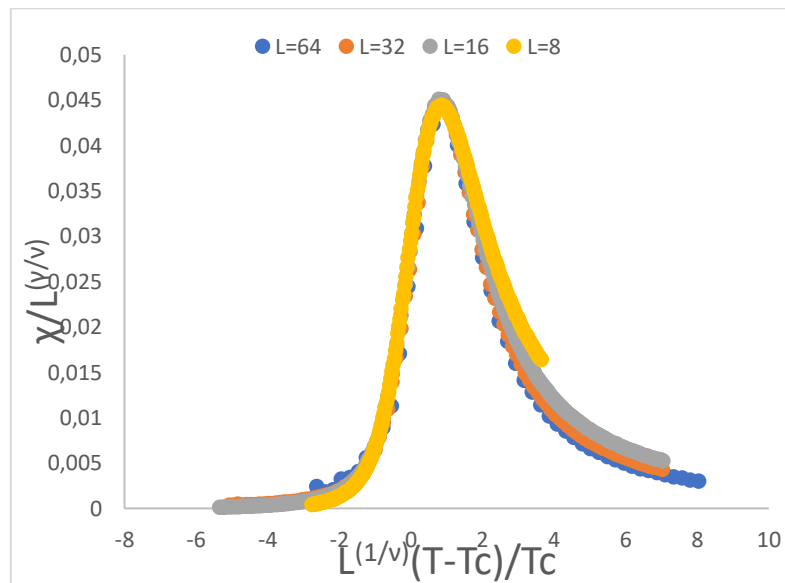


Figura 14: Representació del test de FSS per la susceptibilitat

- **Parametre d'ordre m**

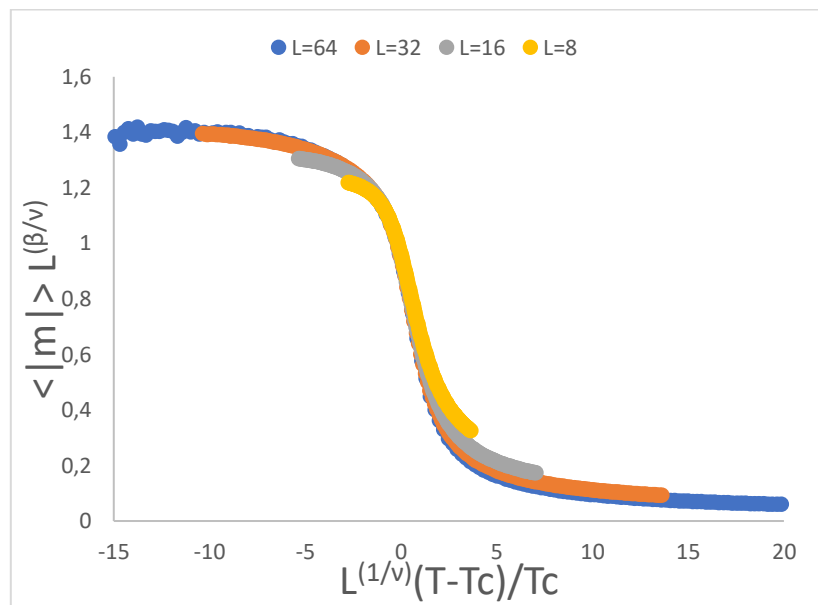


Figura 15: Representació del test de FSS per la magnetització

Comprovem satisfactòriament com les magnituds amb comportaments no analítics en el punt crític com son la susceptibilitat i la magnetització es comporten com prediu la teoria segons el “Finite Size Scaling” FSS

7. Conclusions

En aquest estudi hem utilitzat les simulacions de manera satisfactòria per obtenir uns resultats propers a la teoria. Hem comprovat com varien les diferents magnituds per diverses mides del sistema o per diferents temperatures dins una mateixa mida. Hem arribat a la conclusió que el sistema presenta una desordenació a altes temperatures, associat a un comportament paramagnètic. En canvi, per a baixes temperatures, el sistema es manté ordenat, associat a un comportament ferromagnètic.

Hem determinat satisfactòriament la temperatura crítica i el seu comportament respecte a la mida del sistema. També hem obtingut valors prou aproximats dels exponents crítics ν , γ , α i β .

Referent al programa utilitzat per obtenir les dades, hem vist que les cadenes de Markov s'estabilitzen correctament a partir d'un cert nombre de passes, i que si augmenten la mida del nostre sistema i extrapolem els resultats, podem aproximar-nos de manera precisa als resultats predits per la teoria.

8. Referències

Guions de les sessions de pràctica amb ordinador de l'assignatura fenòmens col·lectius i transicions de fase penjades al campus virtual, tardor 2020

Apunts manuscrits de l'assignatura de l'assignatura fenòmens col·lectius i transicions de fase del professor Jordi Ortín.

Apunts de Física Computacional del professor Bruno Julià.