

Fenòmens Col·lectius i Transicions de Fase

Pràctica 3

Simulació MC del model d'Ising
2D: evolució temporal i promitjos

Objectius

Millorarem el codi `MC1-millorat.f` i escriurem un codi `MC1-millorat2.f` per poder estudiar evolucions temporals a diferents TEMP

Construirem el codi `MC2.f` per tal d'obtenir promitjos de quantitats d'interès.

- incloent promitjos sobre `NLLAV` llavors
- descartant `MCINI` passes inicials
- promitjant cada `MCSTEP` passes de MC

NOM DE L'ARXIU DE SORTIDA

C234567

IMPLICIT NONE

C DECLARACIO DE VARIABLES

INTEGER*4 L

PARAMETER (L=32)


REAL*8 TEMP

INTEGER*4 SEED

INTEGER*4 MCTOT

CHARACTER*29 NOM

Declarem una
variable character



.....

C INSTRUCCIONS EXECUTABLES


TEMP = 2.0D0

SEED = 234567

MCTOT = 10000

NOM="SIM-L-032-TEMP-2000-MCTOT-10K"

Definim el nom de
l'arxiu



C234567

OBRIR,
ESCRIURE
I TANCAR

```
open (UNIT=12,FILE=nom//".out")
```

```
...
```

```
IMC=0
```

```
WRITE(12,*) IMC, ENE, ENEBIS, MAG
```

```
...
```

```
DO IMC=1,MCTOT
```

```
...
```

```
WRITE(12,*) IMC, ENE, ENEBIS, MAG
```

```
ENDDO
```

```
.....
```

```
CLOSE(12)
```

MC1-millorat.f

Correu el codi MC1-millorat2.f, per $L=32$ i 4 o 5 temperatures

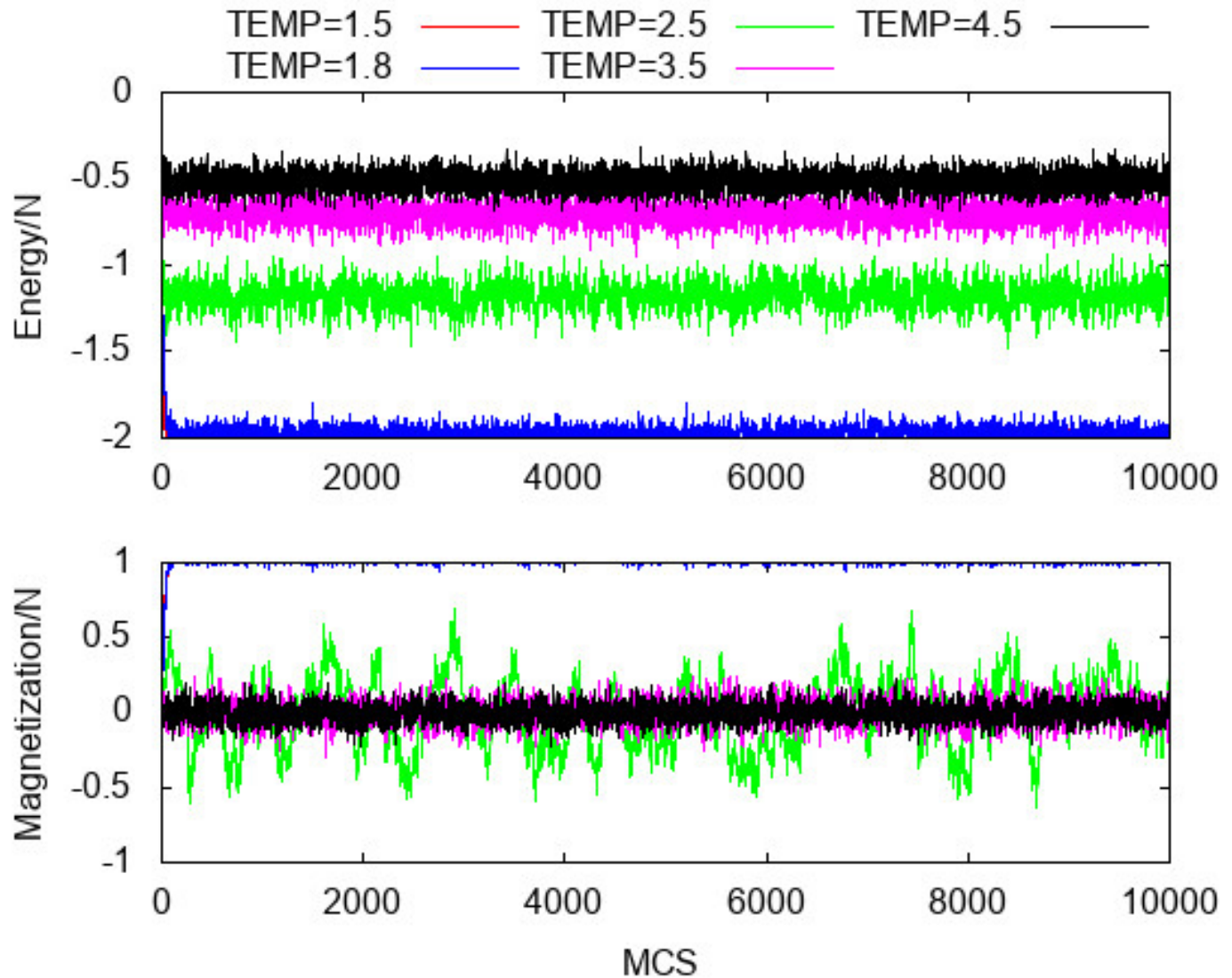
TEMP = 1.5, 1.8, 2.5, 3.5, 4.5

Dibuixeu amb gnuplot l'evolucio temporal de ENE i MAG per cada temperatura i compareu els resultats

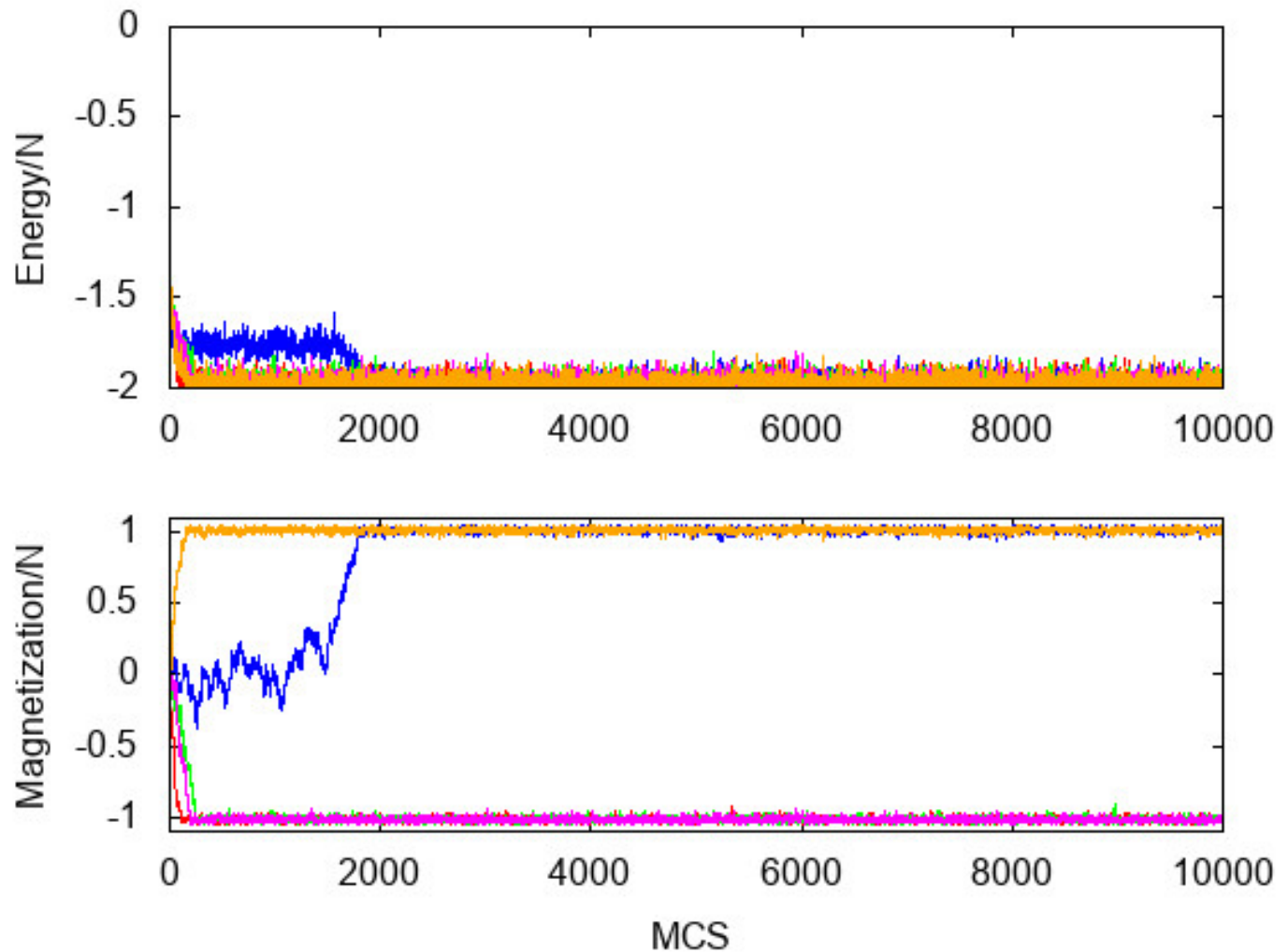
Estudieu

- Valors de E i M per a diferents temperatures
- Quan triguen les variables M i E a "estabilitzar-se"?
- Com varien les fluctuacions?
- A baixa T, que passa si canvieu la llavor?

Efecte de la T ($L=32$)



Efecte de la llavor (L=32 T=1.8)



Promitjos sobre l'espai de les fases

Un cop tenim l'algorisme MC1.f que genera configuracions a l'espai de les fases d'acord amb el pes de Boltzmann, ara cal obtenir els promitjos de les quantitats d'interès:

Ens centrarem en 5 quantitats (i les seves combinacions)

imantació per partícula $m = M/N$

$$\langle m \rangle, \langle |m| \rangle, \langle m^2 \rangle$$

energia per partícula $e = E/N$

$$\langle e \rangle, \langle e^2 \rangle$$

VARIABLES PELS PROMITJOS

```
SUM=0.0D0  
SUME=0.0D0  
SUME2=0.0D0  
SUMM=0.0D0  
SUMM2=0.0D0  
SUMAM=0.0D0
```

...

```
SUM=SUM+1.0D0  
SUME=SUME+ENE  
SUME2=SUME2+ENE*ENE  
SUMM=SUMM+MAG  
SUMAM=SUMAM+ABS(MAG)  
SUMM2=SUMM2+MAG*MAG
```

...

```
SUME=SUME/SUM  
SUME2=SUME2/SUM  
SUMM = SUMM/SUM  
SUMAM=SUMAM/SUM  
SUMM2=SUMM2/SUM  
VARE = SUME2-SUME*SUME  
VARM = SUMM2-SUMM*SUMM
```

Les posarem a zero a l'inici

SUM és un contador

A cada passa de MC que
volguem promitjar,
afegirem les quantitats
corresponents a la suma

Al acabar normalitzarem
els promitjos i
calcularem els
estimadors de les
variances

Correlacions temporals entre configuracions

La cadena de Markov presenta correlacions temporals molt fortes amb l'estat inicial (durant les primeres passes de MC) i entre configuracions consecutives. Aquestes correlacions depenen de la **TEMP** i la mida del sistema **L**

Per fer promitjos i que les estimacions de l'error siguin correctes, necessitem configuracions descorrelacionades

Això ho aconseguirem amb tres estratègies diferents:

- 1) saltant unes quantes passes inicials **MCINI**
- 2) agafant configuracions cada un cert nombre de passes **MCD**
- 3) barrejant configuracions generades amb diferents configuracions inicials **NLLAV**

Saltem MCINI i promitgem cada MCD

```
MCTOT=10000  
MCINI=1000  
MCD=10
```

A les dades incials afegim
MCINI i MCD

...

```
IF ( ( IMC.GT.MCINI ) .AND. ( MCD*( IMC/MCD ) .EQ. IMC ) ) THEN
```

```
    MAG=MAGNE ( S , L )
```

```
    SUM=SUM+1.0D0
```

```
    SUME=SUME+ENE
```

```
    SUME2=SUME2+ENE*ENE
```

```
    SUMM=SUMM+MAG
```

```
    SUMAM=SUMAM+ABS ( MAG )
```

```
    SUMM2=SUMM2+MAG*MAG
```

```
ENDIF
```

Quan acaba cada MC, preguntem si
toca promitjar o no. Si toca fer-ho,
aleshores promitgem.

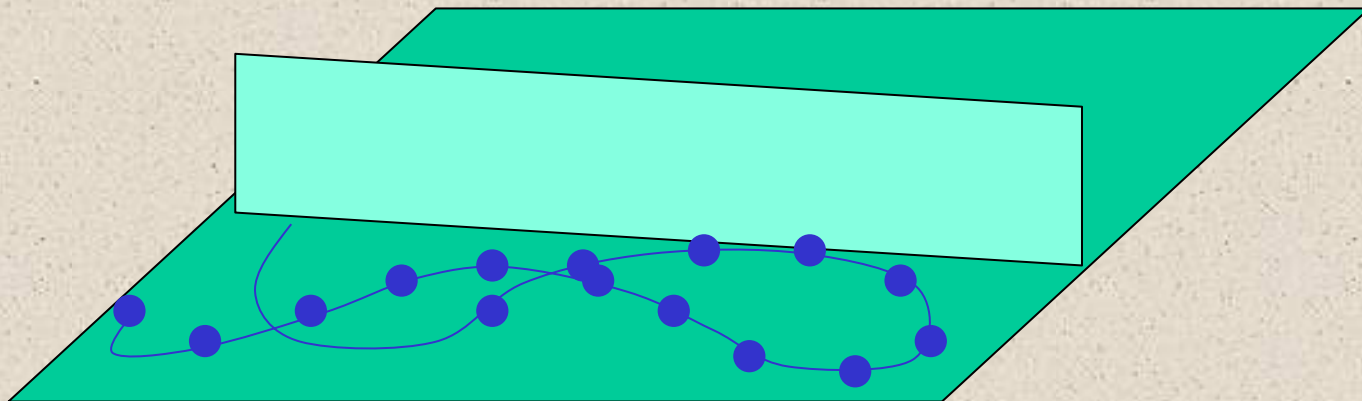
No cal calcular quants promitjos
fem, perquè la variable SUM
s'encarrega de fer el recompte.

Eliminarem el càlcul de ENEBIS.
Arrossegarem el càlcul de ENE i
calcularem MAG només quan
calgui, dins de l'IF.

Promitjos sobre llavors (1)

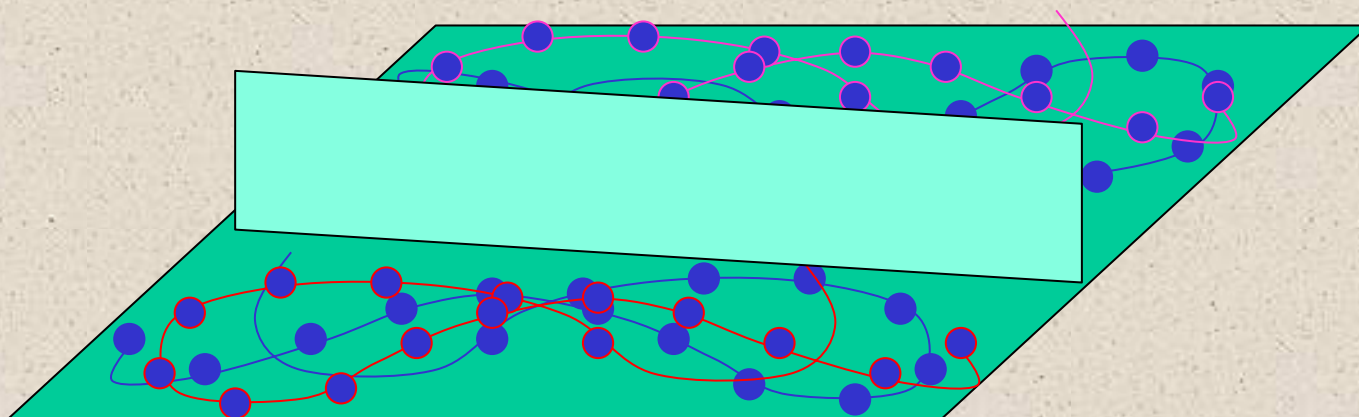
Encara que saltem $MCINI$ passes, a baixa temperatura, la cadena de Markov presenta encara correlacions amb l'estat inicial. Això passa perquè a baixa $TEMP$ l'espai de les fases està separat en dues regions simètriques que corresponen a $M > 0$ i $M < 0$ i que estan separades per barreres energètiques molt difícils de saltar (caldríen moltes passes MC).

La cadena, és teòricament irreduïble, però calen moltes passes per aconseguir accedir a l'altre costat de l'espai de les fases.



Promitjos sobre llavors (2)

Per arreglar aquest problema farem promitjos sobre llavors, començant amb diferents configuracions a l'atzar. Estadísticament, la meitat sortiran a un costat i la meitat a l'altra.



Promitjos sobre NSEED llavors

```
TEMP=1.0D0  
NSEED=1000  
SEED0=117654  
MCTOT=10000  
MCINI=1000  
MCD=10
```

A les dades incials eliminem SEED i afegim NSEED i SEED0,

```
DO SEED=SEED0,SEED0+NSEED-1,1  
  WRITE (*,*) 'LLAVOR = ', SEED  
  
  CALL init_genrand(SEED)
```

Cal posar un bucle que englobi tot el programa, incloent el CALL init_genrand(SEED) i la generació de la matriu inicial

Aqui genero la matriu inicial
Aqui calculo la energia inicial

```
DO IMC=1,MCTOT
```

```
...
```

```
ENDDO
```

Aqui va el bucle de MC, que inclou els promitjos que es fan després de cada MC.

```
ENDDO
```

Aqui normalitzo els promitjos

La normalitzacio del promitjos es fa fora del bucle de llavors

OPCIONAL: entrada de dades amb NAMELIST

```
NAMELIST /DADES/ NOM, TEMP, NSEED, SEED0, MCTOT, MCINI, MCD
```

```
NOM="MC-L-032-TEMP-1000"
```

```
TEMP=1.0D0
```

```
NSEED=100
```

```
SEED0=117654
```

```
MCTOT=10000
```

```
MCINI=1000
```

```
MCD=10
```

```
OPEN(UNIT=10, FILE="MC2.dat")
```

```
READ(10, DADES)
```

```
CLOSE(10)
```

L'estructura NAMELIST permet llegir dades des de un arxiu inicial

Aquests són els valors per defecte de les variables d'entrada. La variable NOM es una CHARACTER*18 que serveix per donar nom a l'arxiu de sortida de dades

L'arxiu MC2.dat ha de tenir aquesta estructura. Els valors que conté modifiquen els valors per defecte.

```
&DADES
```

```
NOM="MC-L-032-TEMP-2400",
```

```
TEMP=2.400D0,
```

```
NSEED=10,
```

```
SEED0=12763,
```

```
MCTOT=50000,
```

```
MCINI=1000,
```

```
MCD=10
```

```
&END
```

Altres detalls: sortida de dades

```
c
c  Normalitzacio de promitjos
c
```

```
SUME=SUME/SUM
SUME2=SUME2/SUM
SUMM = SUMM/SUM
SUMAM=SUMAM/SUM
SUMM2=SUMM2/SUM
VARE = SUME2-SUME*SUME
VARM = SUMM2-SUMM*SUMM
```

```
c
c  Sortida de dades
c
```

```
OPEN(UNIT=13,FILE=NOM//".res")
WRITE(13,*)    L,TEMP,SUM,SUME,SUME2,VARE,SUMM,SUMAM,SUMM2,VARM
CLOSE(13)
```

Acabats de normalitzar els promitjos, treiem les dades a l'arxiu NOM.res

Ho fem en una sola línia que inclou la informació de la temperatura, la mida del sistema i el nombre de configuracions promitjades
SUM

Aquestes línies les anirem copiant a un arxiu de resultats que després em permetrà dibuixar amb el gnuplot, resultats en funció de la temperatura.

Altres detalls: control del temps

Inicialització de les dades d'entrada

```
c
c      Control de temps de CPU inicial
c
c      CALL CPU_TIME(TIME1)
c
c      ....
```

Tot el codi

```
...

c
c      Control de temps de CPU final
c
c      CALL CPU_TIME(TIME2)
c
c      Data i hora final
c
c      CALL FDATE(DATE)

WRITE (*,*) DATE
WRITE (*,*) 'CPUTIME = ', TIME2-TIME1
```

Per poder estimar quan trigaran les simulacions es interessant medir el temps de CPU per a diferents L's MCTOT, etc..

Això es pot fer amb la subrutina CPU_TIME(TIM)

TIM és real*4

També podeu treure la data amb FDATE(DATE)

DATE és character*30

MC2 . f

A partir d'una còpia del codi MC1-millorat2.f programeu el codi MC2 . f , preparat per fer promitjos sobre moltes configuracions.

Ha d'incloure:

- Promitjos sobre NSEED llavors

- Saltar les primeres MCINI passes

- Promitjar cada MCD passes

- Calcular $\langle E \rangle$, $\langle E^2 \rangle$, $\langle M \rangle$, $\langle M^2 \rangle$ i $\langle |M| \rangle$ i treure-ho a un arxiu

Escolliu una mida intermitja ($L=32$) i per a la propera pràctica feu simulacions en funció de la temperatura en un rang $TEMP=1.5-4.5$

Opcionalment podeu incloure un bucle de temperatures per evitar tenir que anar compilant i corrent cada TEMP per separat. (MC3 . f)

Vigileu on poseu el bucle!

MC2.f- resultats

L'objectiu es estudiar el comportament en funció de la temperatura de les següents quantitats i els seus errors

Número de configuracions independents promitjades

$$\langle e \rangle = \frac{\langle E \rangle}{N}, \quad \varepsilon_e = \frac{1}{N} \frac{\sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}}{\sqrt{\text{SUM}}} \quad \leftarrow$$

$$\langle m \rangle = \frac{\langle M \rangle}{N}, \quad \langle |m| \rangle = \frac{\langle |M| \rangle}{N}, \quad \sqrt{\langle m^2 \rangle} = \sqrt{\frac{\langle M^2 \rangle}{N^2}}, \quad \varepsilon_m = \frac{1}{N} \frac{\sqrt{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}}{\sqrt{\text{SUM}}}$$

També la capacitat calorífica i la susceptibilitat

$$C_v^* = \frac{C_v}{k_B} = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{T^2} \quad C_v^* = \frac{C_v}{Nk_B} = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{NT^2} = N \frac{\langle e^2 \rangle - \langle e \rangle^2}{T^2}$$

$$X^* = \frac{X}{k_B} = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{T} \quad \chi^* = \frac{X}{Nk_B} = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle |M| \rangle^2}{NT} = N \frac{\langle m^2 \rangle - \langle |m| \rangle^2}{T}$$