

RESOLUCIÓ DEL MODEL D'ISING EN 2D AMB EL MÈTODE DE MONTECARLO

INTRODUCCIÓ TEÒRICA

El model que es planteja a resoldre durant les pràctiques utilitzant mètodes numèrics és el model d'Ising en 2D que consisteix en un model reticular, en el nostre cas amb una xarxa regular bidimensional, on cada nus de la xarxa pot prendre els valors $S=\pm 1$ i el seu hamiltonià ve donat per:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - h \sum_i S_i$$

on J es pot interpretar com una energia de bescanvi que mesura la interacció entre els spins que són primer veïns i h és el camp extern aplicat, que en el nostre cas serà nul.

El mètode numèric que nosaltres vàrem utilitzar per resoldre el model d'Ising és el mètode de Montecarlo que es basa en generar estats (i,j) mitjançant un procés estocàstic amb la distribució de probabilitat adequada:

$$\pi(i) = \exp\{-\beta E_i\} / Z$$

on Z és la funció de partició canònica.

Per fer els càlculs dels valors esperats hem de samplejar l'espai fàsic (Ω) i per fer aquest procés de sampleig efectiu hem de donar més importància als estats amb contribucions dominants a les quantitats que volem determinar la mitjana, això s'aconsegueix generant seqüències d'estats d'acord amb el procés de Markov on la probabilitat de transició a un estat no depèn de cap estat anterior a l'estat inicial de la transició.

Per aconseguir que el en límit el sistema arribi a la distribució de probabilitat donada, es condició suficient que compleixi l'equació de balanç:

$$\frac{\pi(i)}{\pi(j)} = \exp [-\beta \{E(i) - E(j)\}]$$

per aconseguir això fem servir l'algoritme de metròpolis un cop hem creat una configuració inicial. Aquest algoritme consisteix en:

- i) Agafar un estat aleatori de la configuració inicial
- ii) Calcular ΔE si giréssim el spin.
- iii) Si $\Delta E < 0$ acceptem el canvi de l'espí i si $\Delta E > 0$ només acceptem el canvi amb una probabilitat $\exp(-\beta \Delta E)$

Per minimitzar efectes de dimensió finita considerarem condicions de contorn periòdiques. També, per evitar que hi hagi correlacions degudes a la llavor, farem la mitjana sobre 200 llavors diferents.

Un cop hem fet suficients passos de Montecarlo el sistema anirà a l'equilibri independentment de la configuració inicial ja que satisfà l'equació de balanç i és un procés de Markov.

EVOLUCIÓ TEMPORAL A DIFERENTS TEMPERATURES

Primer, estudiarem l'evolució temporal de l'energia i la magnetització per diferents temperatures per poder comparar el comportament a altes i baixes temperatures.

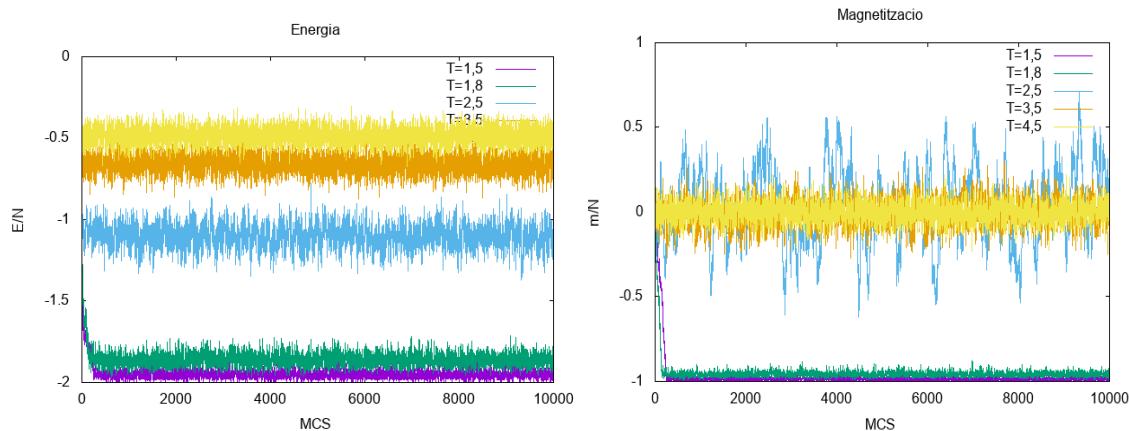


Figura 1. Evolució temporal de l'energia per partícula per diferents valors de temperatura.

Figura 2. Evolució temporal de la magnetització per partícula per diferents valors de temperatura.

Podem observar com per altes temperatures l'energia és més petita i que per baixes temperatures augmenta fins el valor -2 (sempre considerant que l'energia és negativa). En canvi, per la magnetització podem observar que per altes temperatures oscil·la per valors al voltant del 0 però per baixes temperatures té un valor mig de -1 que equival a dir que tots els spins s'han orientat en la mateixa direcció. Això es pot interpretar sabent que un sistema magnètic el paràmetre d'ordres és la magnetització i per tant, per temperatures majors a T_c correspon a un valor mitjà del paràmetre d'ordre nul, per temperatures menors a T_c a un valor finit del paràmetre d'ordre i per la temperatura crítica les fluctuacions es faran anòmals cosa que es pot observar per $T=2,5$ que és un valor proper a la temperatura crítica del sistema.

RESOLUCIÓ DEL MODEL PER L=32

La primera part del estudi de les dades obtingudes amb el codi MC2.f consisteix en estudiar el comportament de l'energia, la magnetització, la capacitat calorífica i la susceptibilitat per partícula d'un sistema de mida $L=32$.

Del codi podem obtenir la magnetització i l'energia. I, les altres magnituds termodinàmiques les obtenim a partir de les expressions:

$$c_V = N \frac{\langle e^2 \rangle - \langle e \rangle^2}{T^2}$$

$$\chi = N \frac{\langle m^2 \rangle - \langle |m| \rangle^2}{T}$$

Els resultats que presentarem s'han obtingut amb les següents dades de la simulació:
 $L=32$, $mctot=40000$, $nllav=200$, $llav0=117654$, $temp0=1.4$, $ntemp=200$, $dtemp=0.01$

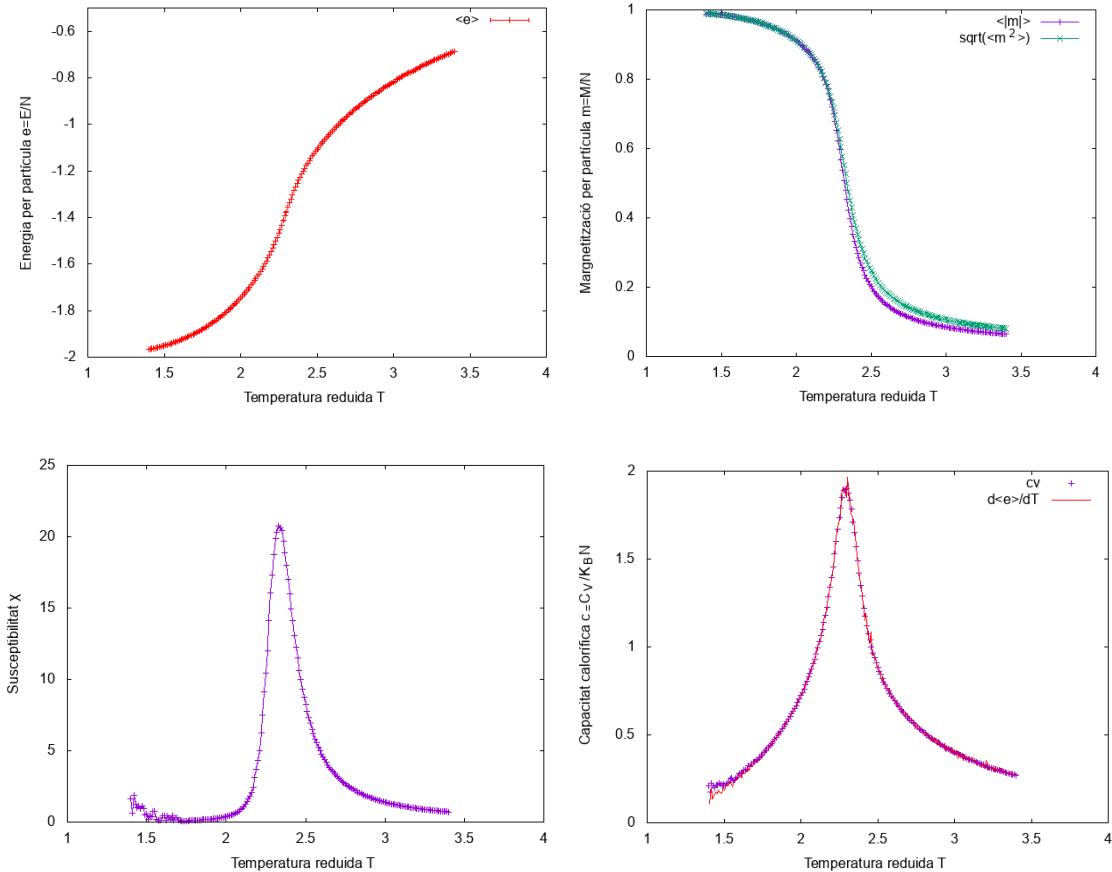


Figura 3. Energia per partícula en funció de la temperatura del sistema.

Figura 4. Magnetització per partícula en funció de la temperatura del sistema
obtinguda amb el mòdul de la magnetització i amb l'arrel quadrada de la
magnetització al quadrat.

Figura 5. Susceptibilitat en funció de la temperatura del sistema.

Figura 6. Capacitat calorífica en funció de la temperatura del sistema i fluctuacions de
l'energia calculades com $\frac{d\langle e \rangle}{dT}$.

Podem observar que tan l'energia com la magnetització presenten un punt d'inflexió a la mateixa temperatura, aquesta correspondrà amb la temperatura crítica. D'altra banda podem veure que la susceptibilitat i la capacitat calorífica tenen un màxim associat a la mateixa temperatura, T_c , que més tard veurem que depèn de la mida del sistema i per tant l'haurem d'anomenar T_{cL} .

Cal destacar que la capacitat calorífica presenta el mateix comportament que les fluctuacions d'energia amb la temperatura com es pot observar en la Figura 6.

EFFECTE DE VARIAR LA MIDA

Fins ara hem estudiar un sistema de mida finita amb mida $L=32$, per simular bé el model d'Ising hauríem considerar un sistema infinit. Per això, primer farem un estudi comparatiu entre els resultats trobats per diferents mides del sistema per posteriorment intentar extrapoljar al sistema infinit.

Aquests resultats corresponen a les simulacions de $L=8, 16, 32$ i 64 on els paràmetres de simulació són els mateixos que en el cas de 32 menys per $L=64$ on el rang de temperatures estudiad només és de 2 K a 3 K degut al temps que requereix adquisició les dades és més elevat i hem disminuït el rang de temperatures al voltant de la temperatura crítica.

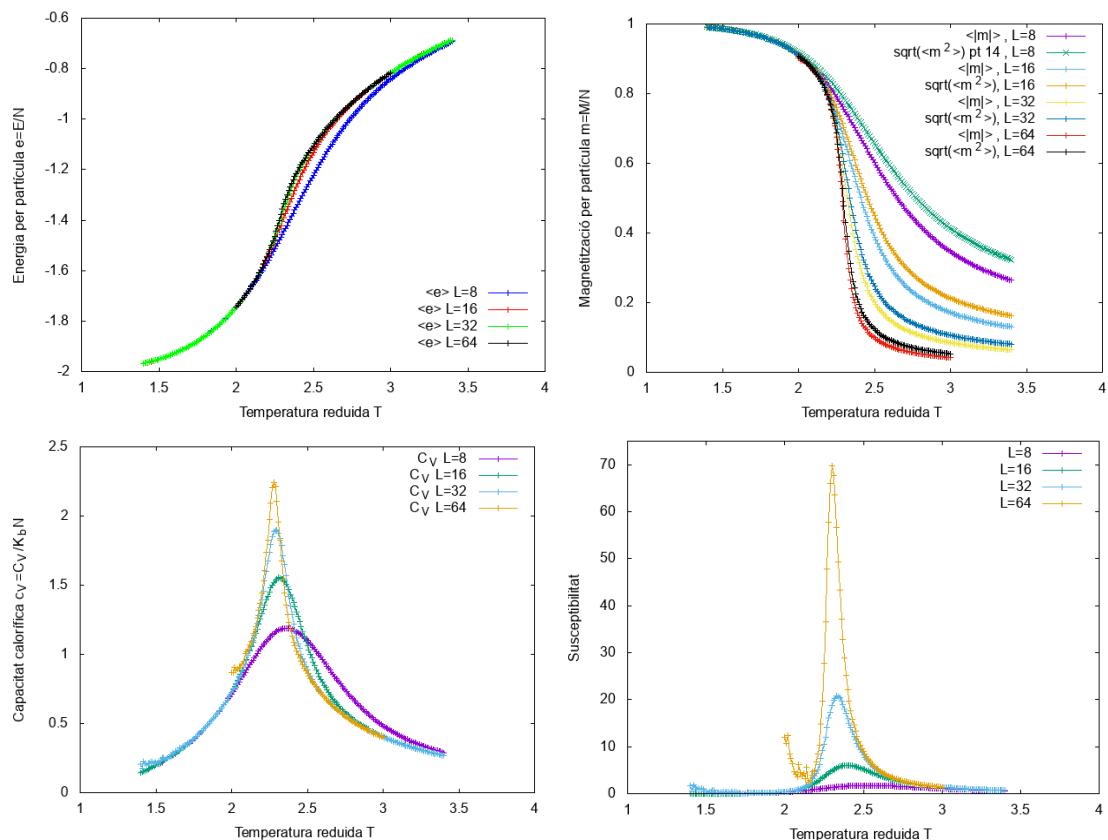


Figura 7. Energia en funció de la temperatura reduïda per configuracions amb diferents mides, $L=8, 16, 32$ i 64 .

Figura 8. Magnetització en funció de la temperatura reduïda per configuracions amb diferents mides, $L=8, 16, 32$ i 64 .

Figura 9. Capacitat calorífica en funció de la temperatura reduïda per diferents mides de la configuració.

Figura 10. Susceptibilitat en funció de la temperatura reduïda per diferents mides de la configuració.

Observant les gràfiques es pot veure fàcilment que la temperatura corresponent al punt crític no és la mateixa si considerem sistemes de diferents mides.

Això implicarà que com més petita sigui la mida del sistema més error trobarem en el la determinació de la temperatura crítica i que a mesura que la mida augmenti ens aproparem més al valor correcte d'aquesta.

Això és degut a que per sistemes de mida finita no pot haver una singularitat en una temperatura diferent de zero el que indicaria que no es produeix una transició de fase encara que de manera pràctica podrem considerar que si que es produeixen i prova d'això es demostra en la teoria de 'finite size scaling' que comprovarem més endavant.

DETERMINACIÓ DE T_c I DEL EXPONENTS CRÍTICS

Un cop tenim l'estudi fet per diferents mides del sistema, intentarem extrapoluar el sistema al infinit per trobar la temperatura crítica, T_c . Per fer això primer hem de determinar quina temperatura crítica correspon a cada sistema de mida L que anomenarem T_{cL} .

T_{cL} correspon als punts d'inflexió de l'energia i la magnetització i als màxims de la capacitat calorífica i la susceptibilitat de les figures 7-9. Per simplicitat, determinarem aquesta temperatura a partir dels màxims de C_V i χ . Com els valors que trobem no són exactament els mateixos, calcularem el valor mitjà entre els dos trobats.

Si fem la representació de T_{cL} en funció de l'invers de la mida, en ajustar les dades a una recta el valor a l'origen correspondria amb un sistema infinit on $L^{-1}=0$ i per tant $L=\infty$.

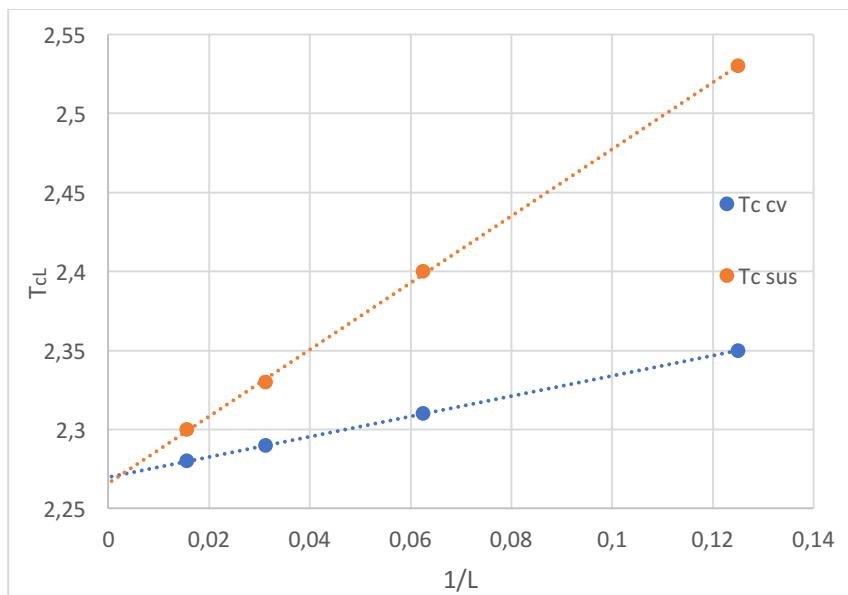


Figura 11. Ajust lineal de la temperatura crítica obtinguda per cada L en funció de l'invers de la mida, aquest ajust està fent amb les temperatures crítiques obtingudes de la gràfica de la capacitat calorífica i de la gràfica de la susceptibilitat.

Trobem que per la susceptibilitat: $T_{cL} = 2,1148 \frac{1}{L} + 2,2661$

Per la capacitat calorífica: $T_{cL} = 0,64 \frac{1}{L} + 2,2701$

Doncs, la temperatura crítica correspon a

$$T_c = 2,26805$$

que comparat amb el valor teòric $T_{c,teòric} = 2,269185$ dóna un error del 0,05%.

Un cop hem determinat la temperatura crítica, a partir d'aquesta i les temperatures crítiques per les diferents mides de L podem determinar els exponents crítics del model.

Exponent ν :

L'exponent ν està relacionat amb la longitud de correlació del sistema.

$$\xi = A|T - T_c|^{-\nu}$$

Si tenim en compte que la temperatura T_{cL} està definida com

$$T_{cL} = T_c + DL^{-\frac{1}{\nu}}$$

Podem fer una regressió logarítmica per tant d'identificar l'exponent ν com la inversa de la pendent. De manera anàloga a la temperatura crítica, farem l'ajust partint dels resultats de la capacitat calorífica i de la susceptibilitat i després trobarem el valor mitjà.

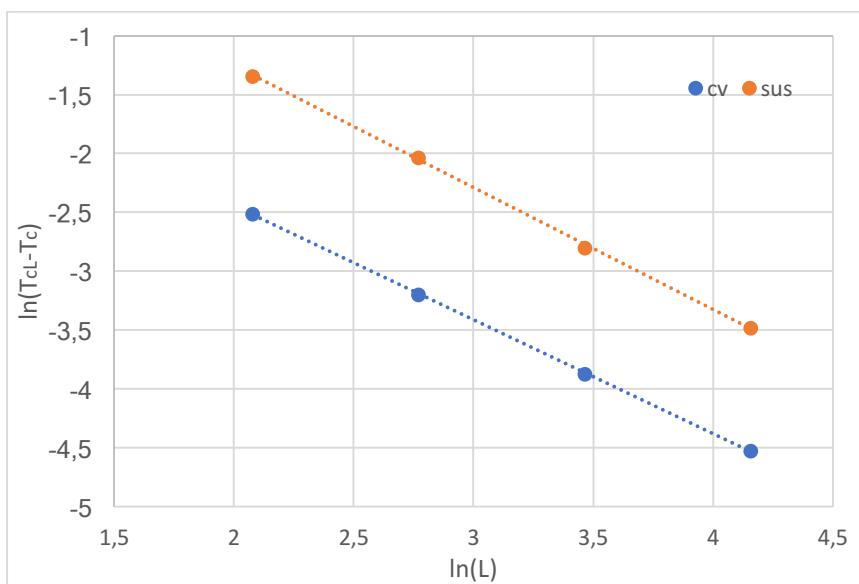


Figura 12. Representació logarítmica de $T_{cL}-T_c$ en funció de la mida del sistema.

Els valors que obtenim són:

$$\nu_{cv} = 0,96628 ; \nu_{sus} = 1,03348$$

Per tant, trobem que l'exponent ν és

$$\nu = 0,99988$$

I, comparant aquest resultat amb el teòric $\nu_{teòrica} = 1$ dóna un error del 0,011%.

Exponent γ :

L'exponent γ està relacionat amb la susceptibilitat del sistema

$$\chi = A|T - T_c|^{-\gamma}$$

tenint en compte la relació utilitzada anteriorment, $T_{cL} = T_c + DL^{-\frac{1}{v}}$, podem representar la susceptibilitat associada en la temperatura T_{cL} en funció de la mida del sistema.

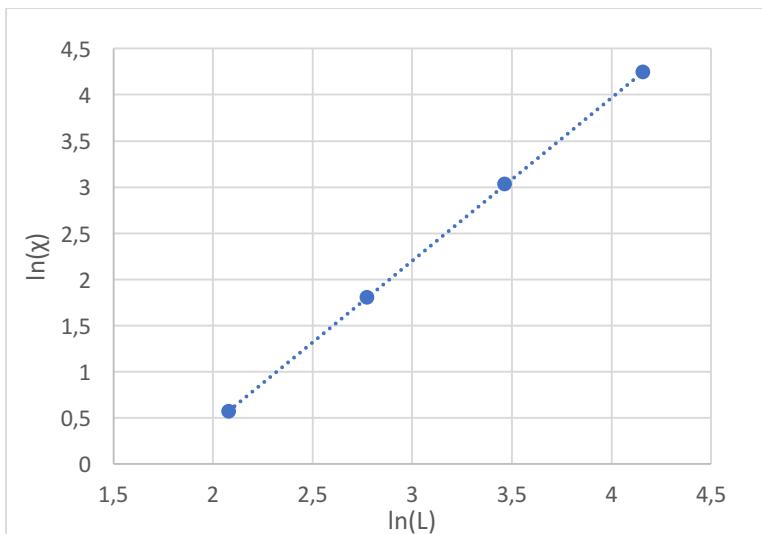


Figura 13. Representació logarítmica de la susceptibilitat donada a cada T_{cL} en funció de la mida L .

Per tant, podem obtenir que els coeficients crítics del model són:

$$\gamma = 1,7685$$

I, comparant amb el valor teòric $\gamma_{teòric} = 1,75$ veiem que té un error del 1,06%.

Exponent α :

L'exponent α està associat a la capacitat calorífica del sistema

$$C_V = A|T - T_c|^{-\alpha}$$

següint un procediment anàleg al exponent anterior.

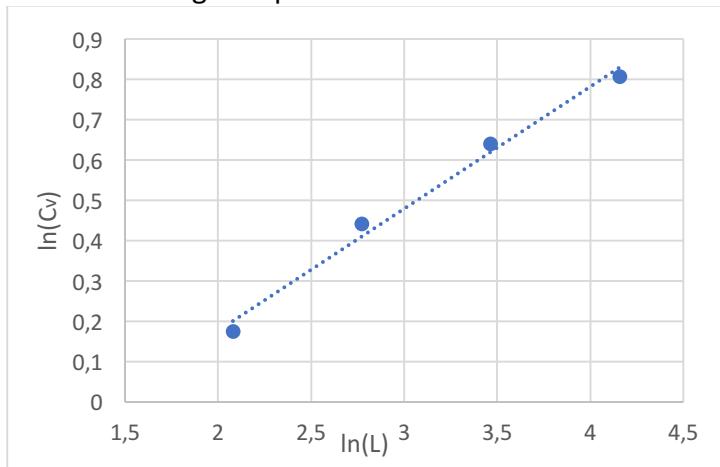


Figura 14. Representació logarítmica de la capacitat calorífica donada cada T_{cL} en funció de la mida L .

Doncs,

$$\alpha = \mathbf{0,3025}$$

En aquest cas podem veure que l'error comès és força elevant ja que el valor teòric d'aquest exponent crític correspon a $\alpha_{teòrica} = 0$.

Exponents β :

L'exponent β ve donat per la magnetització del sistema:

$$m = A(T - T_c)^{-\beta}$$

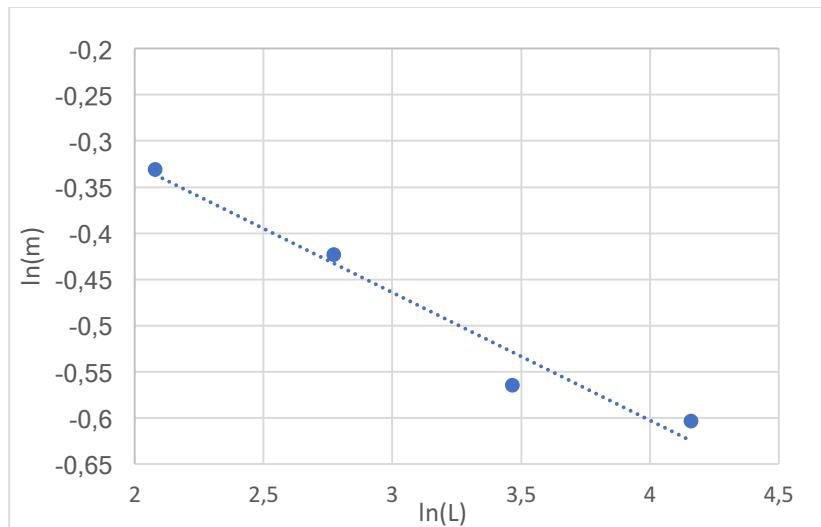


Figura 15. Representació logarítmica del valor absolut de la magnetització donada cada T_{cL} en funció de la mida L .

Trobem que el valor obtingut de les nostres dades és:

$$\beta = \mathbf{0,1386}$$

El qual comparat amb $\beta_{teòrica} = 0,125$ presenta un error del 10,87%.

COMPROVACIÓ DE FSS

Fins ara, per poder corregir l'efecte de la dimensió finita del sistema el que havíem fet era estudiar diferents mides i extrapoluar fent una regressió lineal al sistema infinit. Però existeix un altre mètode anomenat '*finite size scaling*' que corregeix aquest efecte de la dimensió finita del sistema per poder determinar la temperatura crítica. Aquest mètode consisteix en fer la hipòtesi que una propietat termodinàmica P divergeix en el punt crític com $P_\infty(t) \sim t^{-\rho}$ on $t = \frac{T-T_c}{T_c}$ pels sistemes finits serà analítica i es comportarà com

$$\frac{P_L(t)}{P_\infty(t)} = f_P\left(\frac{L}{\xi_\infty(t)}\right)$$

Per les magnituds que nosaltres hem estudiat, aquest efecte d'escala es veurà reflectit com:

$$\begin{aligned} \chi_L &\propto L^{\gamma/\nu} \psi\left(\frac{T-T_c}{T_c} L^{1/\nu}\right) \\ \langle |m_L| \rangle &\propto L^{-\beta/\nu} \psi\left(\frac{T-T_c}{T_c} L^{1/\nu}\right) \end{aligned}$$

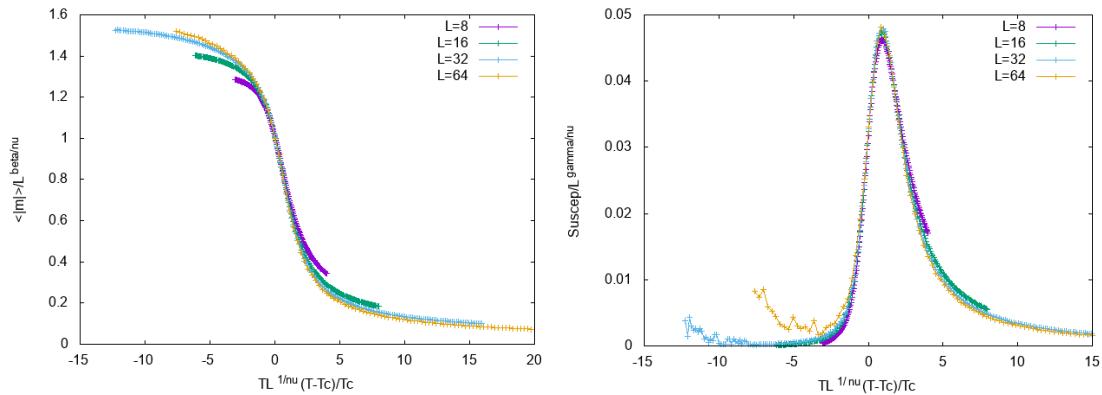
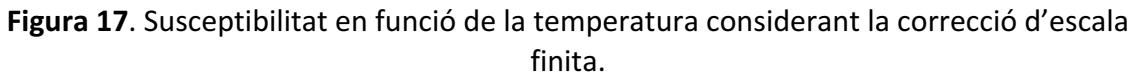


Figura 16. Paràmetre d'ordre en funció de la temperatura considerant la correcció d'escala finita.



Podem veure en les figures 16-17 que afegint aquesta correcció d'escala la temperatura que correspon al punt crític és la mateixa per sistemes de diferent mida i per tant hem comprovat l'efectivitat d'aquest mètode.

CONCLUSIONS

Finalment, podem dir que els resultats obtinguts a partir de les simulacions del model d'Ising 2D amb el mètode de Montecarlo permeten determinar amb un error força petita la temperatura crítica del sistema i alguns dels exponents crítics del model.

D'altra banda, hem pogut comprovar l'eficàcia del mètode de '*finite size scaling*' que permet corregir l'error de considerar un sistema de mida finita.

REFERÈNCIES

LeBellac, Mortessagne, Batrouni, *Equilibrium and non-equilibrium stational thermodynamics*, (pàg 375-388). Cambridge University Press, 2004.

M. Plischke, Biger Bergersen, *Equilibrium statonal physics*, (pàg 277-290). World Scientific 2nd Edition, 2006.