

Simulación de Monte Carlo del modelo de Ising 2D

Esteban Pellegrino - Año 2011

1. Introducción

En este trabajo se introduce el modelo de Ising en 2D para ser utilizado en el estudio de las propiedades de un sistema ferromagnético en 2 dimensiones analizando su magnetización y energía en función de la temperatura. Asimismo, se evalúa la temperatura crítica a la cual el sistema presenta una transición de fase. Finalmente, se calculan los exponentes críticos del sistema mediante el cómputo de cumulantes en función de la dimensión de la grilla.

1.1. Descripción del modelo

En la mayoría de los materiales ordinarios, los dipolos magnéticos asociados a los átomos presentan una orientación aleatoria. De hecho, esta distribución de dipolos se refleja a nivel macroscópico como un momento magnético nulo. Sin embargo, en algunos casos (como el hierro) se produce un momento magnético como consecuencia de un alineamiento preferencial de los dipolos a nivel microscópico.

Este fenómeno está basado en dos principios fundamentales y opuestos que compiten entre ellos: la *minimización de la energía* y *maximización de la entropía*. La temperatura es un mediador que en última instancia determina cual de los dos es el dominante.

1.2. Modelo

El modelo de Ising en 2 dimensiones está compuesto por un conjunto de spines con una fuerte anisotropía uniaxial distribuidos en una grilla regular. La grilla es cuadrada de lado L dando lugar a $N = L \times L$ spines. En su forma más simple, la interacción entre los spines está restringida a los sitios inmediatamente adyacentes lo que produce un Hamiltoniano para un sitio específico i , con spin s_i ,

$$H_i = -J \sum_{j_v} s_i s_j , \quad (1)$$

donde la suma sobre j_v se evalúa sobre los vecinos más cercanos a i . La constante J de acoplamiento entre los vecinos define la naturaleza de la interacción: si es positiva significa que el material es *ferromagnético* (alineamiento paralelo) mientras que si es negativa el material es *antiferromagnético* (favorece un alineamiento opuesto entre los spines). En este trabajo se supone que un spin hacia “arriba” toma el valor de $+1$ y hacia “abajo” el de -1 . Además, se considera a la constante J como positiva y tal que $\frac{J}{k} = 1$, donde k es la constante de Boltzmann.

Para maximizar la interacción de los spines en los bordes de la grilla y evitar efectos de “borde” indeseados se impone como primeros vecinos a los sitios geoméricamente opuestos en la grilla, lo que resulta en una condición periódica de borde.

1.3. Problema computacional

Dada la energía de cada estado α posible del sistema, la distribución de Boltzmann

$$P(\alpha) = \exp \frac{E(\alpha)}{kT} \quad (2)$$

representa la probabilidad de que el sistema se encuentre en dicho estado para una temperatura T . Por lo tanto, los observables macroscópicos se pueden calcular haciendo una suma de probabilidades sobre dicha distribución. Para un estado fijo α , la magnetización es proporcional al exceso de spines hacia “arriba” (o “abajo”) mientras que la energía está dada por el Hamiltoniano.

En consecuencia, los valores esperados de dichas magnitudes vienen dados por,

$$\langle M \rangle = \sum_{\alpha} (N_{arriba}(\alpha) - N_{abajo}(\alpha)) P(\alpha) = \sum_{\alpha} M(\alpha) P(\alpha) , \quad (3)$$

$$\langle E \rangle = \sum_{\alpha} H(\alpha) P(\alpha). \quad (4)$$

El cómputo de estas magnitudes posee un drástico problema desde una perspectiva práctica. Consideremos un sistema de N spines con dos orientaciones posibles; lo que da a lugar un sistema con 2^N estados posibles. Para cada uno de dichos estados se debe evaluar la magnetización y la energía del sistema para resolver las sumatorias de las expresiones 3 y 4. Es evidente que, conforme N toma valores grandes, este esquema resulta muy ineficiente ya que se invierte la misma “energía computacional” en el cálculo de los estados más probables como de los altamente improbables.

Una mejor solución es realizar una simulación numérica para generar *estados* en la región del espacio de la fases más representativa del problema y computar las magnitudes promedio sobre esos estados. Para llevar a cabo dicho objetivo se utiliza en algoritmo de Metrópolis que será descripto en la siguiente sección.

1.4. Algoritmo de Metrópolis

El promedio térmico de una magnitud $\phi(x)$ se define como,

$$\langle \phi(x) \rangle_T = \frac{1}{Z} \int e^{-\beta H(x)} \phi(x) dx , \quad (5)$$

donde x es un vector en el espacio de las fases y $\beta = 1/kT$. La función de partición Z está dada por,

$$Z = \int e^{-\beta H(x)} dx, \quad (6)$$

mientras que el factor de Boltzmann normalizado viene dado por,

$$P(x) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(x)}. \quad (7)$$

Esta probabilidad representa el peso estadístico con el cual el estado x ocurre en la configuración de equilibrio térmico. En el caso discreto, en el cual sólo se muestrea una porción del espacio de las fases, el promedio térmico toma la forma,

$$\langle \phi(x) \rangle = \frac{\sum_{l=1}^M e^{-\beta H(x_l)} \phi(x_l)}{\sum_{l=1}^M e^{-\beta H(x_l)}}. \quad (8)$$

En el límite en que $M \rightarrow \infty$, la ecuación 8 se reduce a la 5. El problema en tomar una muestra de esta naturaleza es que no hay forma de garantizar de que la distribución de probabilidades con la cual se muestrean los estados tenga su “pico” en la porción más representativa del espacio de las fases.

Por lo tanto, es necesario plantear una técnica de muestreo con la cual se puedan seleccionar puntos x_l , con una determinada probabilidad $P(x_l)$, que cubran la porción más importante del espacio de las fases del problema bajo consideración. La estimación del promedio térmico de una magnitud para un conjunto dado de puntos x_l reduce la expresión 8 a

$$\langle \phi(x) \rangle = \frac{\sum_{l=1}^M e^{-\beta H(x_l)} \phi(x_l) / P(x_l)}{\sum_{l=1}^M e^{-\beta H(x_l)} / P(x_l)}. \quad (9)$$

La opción más razonable para $P(x_l)$ es tal que $P(x_l) \propto e^{-\beta H(x_l)}$. Esa construcción produce un simple promedio aritmético para la ecuación 9 simplificando los factores de Boltzmann,

$$\langle \phi(x) \rangle = \frac{1}{M} \sum_{l=1}^M \phi(x_l). \quad (10)$$

En otras palabras, lo que se trata de lograr con ese esquema es reducir la distribución de probabilidades en equilibrio del espacio de fases a una distribución representativa dada por un conjunto finito de puntos x_l del mismo espacio. Para generar dicha distribución se utiliza el algoritmo de Metrópolis, que se basa en la idea de usar un proceso de Markov donde cada estado x_{l+1} se construye a partir del estado x_l con una probabilidad de transición $W(x_l \rightarrow x_{l+1})$ adecuadamente elegida. Para implementar esta idea exitosamente, se debe imponer una condición de balance detallado,

$$P_{eq}(x_l) W(x_l \rightarrow x_{l'}) = P_{eq}(x_{l'}) W(x_{l'} \rightarrow x_l). \quad (11)$$

La expresión anterior prescribe que, en el equilibrio térmico, la probabilidad de $x_l \rightarrow x_{l'}$ es igual a la de $x_{l'} \rightarrow x_l$. Si tomamos el cociente entre las probabilidades de transición resulta evidente que un movimiento de $x_l \rightarrow x_{l'}$ o el inverso $x_{l'} \rightarrow x_l$ sólo depende de la diferencia de energía $\delta H = H(x_{l'}) - H(x_l)$,

$$\frac{W(x_l \rightarrow x_{l'})}{W(x_{l'} \rightarrow x_l)} = e^{-\delta H \beta} \quad (12)$$

Sin embargo, esto no sirve para especificar la probabilidad de transición $W(x_l \rightarrow x_{l'})$. Para

esto, se introduce la siguiente función,

$$W(x_l \rightarrow x_{l'}) = \begin{cases} e^{-\delta H \beta} & \text{si } \delta H < 0, \\ 1 & \text{en otro caso.} \end{cases} \quad (13)$$

Se puede demostrar que, utilizando la probabilidad de transición dada por 13, la distribución $P(x_l)$ de estados generados mediante la cadena de Markov tiende a la distribución de equilibrio conforme $M \rightarrow \infty$.

Los cambios en la distribución de probabilidades son gobernados por la siguiente expresión,

$$\frac{dP(x, t)}{dt} = - \sum_{x'} W(x_l \rightarrow x_{l'}) + \sum_{x'} W(x_{l'} \rightarrow x_l). \quad (14)$$

En el límite térmico, cuando $P(x_l) = P_{eq}(x_l)$, la ecuación de balance detallado 11 entra en juego, lo que resulta en $\frac{dP(x, t)}{dt} = 0$ como es esperable. Si consideramos a cada paso de montecarlo como una “*unidad de tiempo*”, podemos calcular el promedio temporal de una magnitud cómo,

$$\langle \phi(t) \rangle = \frac{1}{M} \sum_{t=1}^M \phi(x(t)). \quad (15)$$

En conclusión, el muestreo mediante el algoritmo de Metrópolis se puede interpretar como un promedio temporal a lo largo de una trayectoria estocástica (controlada por la ecuación 13) en el espacio de la fases.

1.5. Cálculo de observables

Los observables de interés de este problema se pueden computar a partir de las magnitudes $\langle E \rangle$, $\langle E^2 \rangle$, $\langle |M| \rangle$ y $\langle M^2 \rangle$ que se calculan a partir de las siguientes expresiones,

$$\langle M \rangle = \frac{1}{N} \sum_i^N M_i, \quad (16)$$

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2} \left\langle \sum_i^N H_i \right\rangle = \frac{1}{2} \left\langle -J \sum_i^N \sum_{j_v} s_i s_j \right\rangle. \quad (17)$$

En la temperatura crítica del sistema es esperable una fluctuación de estas magnitudes, que puede ser cuantificada a partir de la varianza $(\Delta \phi)^2 = \langle \phi^2 \rangle - \langle \phi \rangle^2$. Otras magnitudes a calcular son la susceptibilidad magnética χ y el calor específico C , que se expresan como,

$$C = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{(\Delta E)^2}{kT} = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{kT}, \quad (18)$$

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial T} = \frac{(\Delta M)^2}{kT} = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{kT}. \quad (19)$$

Por último, para la obtención de los exponentes críticos del sistema, se calcula el cumulante de Binder para distintos tamaños de la grilla,

$$g = \frac{1}{2} \left(3 - \frac{\langle M^4 \rangle_L}{\langle M^2 \rangle_L^2} \right). \quad (20)$$

2. Implementación computacional

Se realizaron tres programas que simulan el modelo de Ising 2D descrito en las secciones previas con el objetivo final de calcular los observables relevantes del sistema.

El primero fue programado en el lenguaje C++ resultando en un código secuencial que sirvió como base para estudiar los problemas relacionados con la implementación numérica del modelo de Ising. La segunda versión resulta de una mejora de la primera para aprovechar el paralelismo de los procesadores multi-cores modernos añadiendo directivas al compilador del estándar OpenMP. Finalmente, se desarrolló una tercer versión en CUDA-C para ser ejecutada en GPUs (Unidades de Procesamiento Gráfico) NVIDIA que soportan dicha tecnología.

Las tres versiones son congruentes desde un punto de vista físico ya que los resultados obtenidos con todas ellas son equivalentes. Con respecto a la *performance*, a modo de resumen, se listan los resultados obtenidos:

1. *Versión OpenMP*: Se verificó un aumento en la performance (2x a 4x en un core i7 con 8 *threads*) para sistemas en los cuales el lado de la grilla es mayor o igual a 512. En los casos donde $L < 512$, como consecuencia del *overhead* debido al lanzamiento y a la administración de múltiple hilos de programación, no se observa una disminución en el tiempo de la simulación. De hecho, para grillas muy pequeñas (< 48) es preferible utilizar la versión secuencial.
2. *Versión CUDA*: El problema es altamente paralelizable y por lo tanto apto para ser ejecutado en una arquitectura de tipo SIMT (Single Instruction Multiple Thread) como las de la GPUs. En este caso, para sistemas con $L > 256$ se observan *speed-ups* de 30x a 40x (con respecto al código en CPU) lo que posibilita hacer simulaciones de sistemas grandes con buena estadística en tiempos razonables. Por otro lado, para sistemas con $L < 256$ el speed-up obtenido se encuentra entre los 10x a los 30x.

La actualización de los spines en cada paso de Monte Carlo se realiza de acuerdo al esquema del “tablero de ajedrez”. Es decir, se divide la grilla en casilleros *blancos* y *negros* de modo que cada conjunto se pueda actualizar secuencialmente de forma independiente y en paralelo. Por lo tanto, un paso de Monte Carlo está dado por una actualización de los spines correspondientes a los casilleros blancos seguido de una actualización de los asociados a los casilleros negros.

2.1. Energía y magnetización

En la figura 1 se muestra la energía por spín $e = \frac{E}{N}$ de un sistema de 96×96 en función de la temperatura para 10^6 pasos de Monte Carlo. Se observa que a bajas temperaturas, la energía se estabiliza en un valor de $E/N = -2J = -2$, lo que indica que los spines están paralelos. En cambio, como es de esperar, a altas temperaturas la energía se mantiene alta como consecuencia de un ordenamiento aleatorio de los spines.

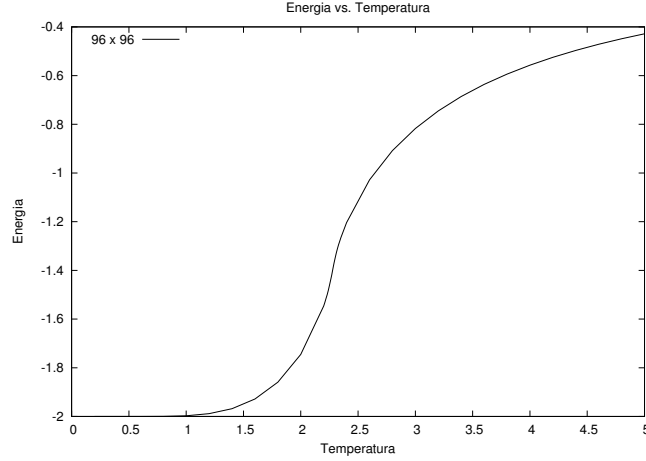


Figura 1. Energía por spin en función de la temperatura para 10^6 pasos de Monte Carlo.

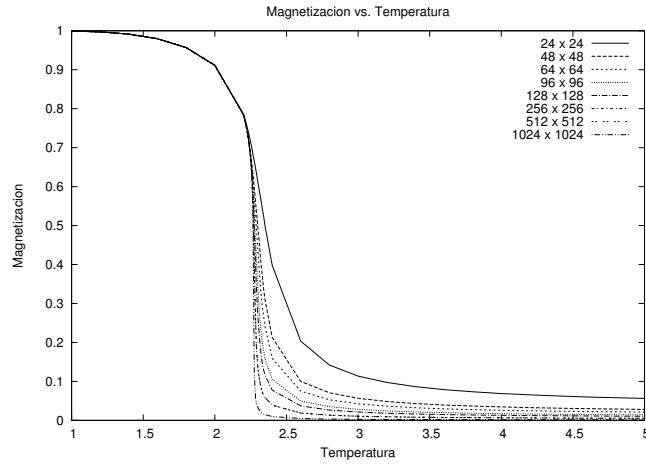


Figura 2. Magnetización por spin en función de la temperatura para 10^6 pasos de Monte Carlo.

Por otro lado, en la figura 2 se muestra la magnetización por spin $m = |M|/N$ en función de la temperatura para distintos tamaños de la malla. Como se puede observar, conforme el tamaño de la malla aumenta, el gradiente de la magnetización se hace mayor en la zona en torno a $T \approx 2,25$. Esto sugiere que estamos en presencia de una transición de fase. La temperatura crítica a la cual ocurre dicha transición se calcula más adelante.

Asimismo, se puede apreciar que a altas temperaturas la magnetización tiende a cero debido al ordenamiento aleatorio de los spines, en contraste al caso de bajas temperaturas donde se encuentran alineados.

2.2. Calor específico y susceptibilidad magnética

El al figura 3 se muestra en calor específico por spin en función del tamaño de la grilla. Como se puede apreciar en puntos cercanos al correspondiente a la temperatura crítica, hay un aumento progresivo del máximo de la curva conforme aumenta el tamaño de la malla. Consideraciones

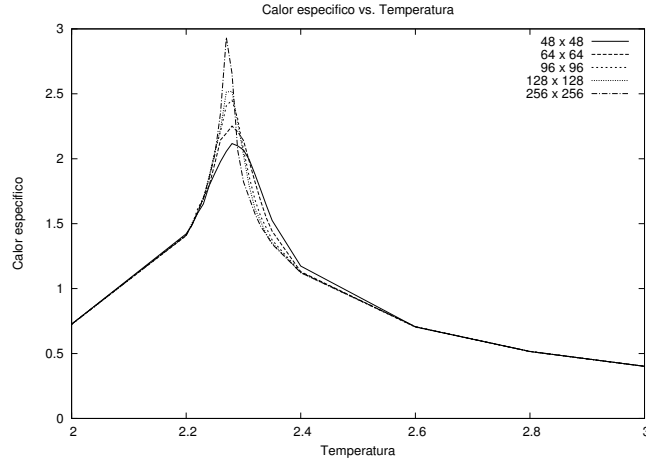


Figura 3. Calor específico por spin en función de la temperatura para 10^6 pasos de Monte Carlo.

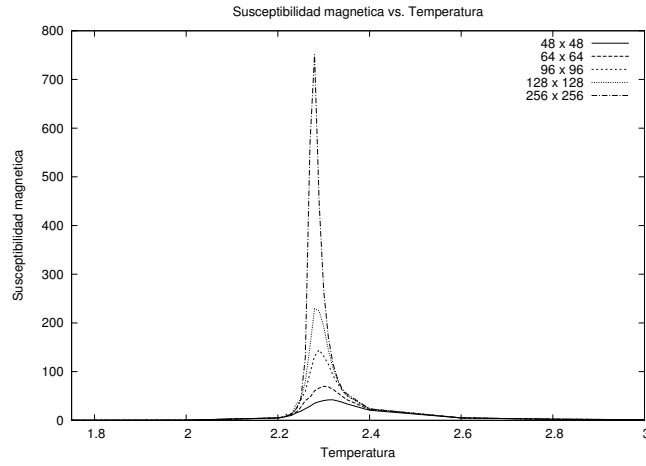


Figura 4. Susceptibilidad magnética en función de la temperatura para 10^6 pasos de Monte Carlo.

similares se aplican al caso de la susceptibilidad magnética por spin, que se presenta en la figura 4.

2.3. Temperatura y exponentes críticos

Una de las limitaciones del modelo de Ising desarrollado es el tamaño finito de la grilla que conforma el sistema. Este hecho resulta en un problema al tratar de reconocer el punto específico en donde ocurre la transición de fase. En dicho punto hay una divergencia teórica que no se observa en los gráficos presentados anteriormente ya que están limitados a sistemas de tamaño finito. Por lo tanto, es necesario utilizar un método que posibilite la extrapolación de ciertas magnitudes para un sistema infinito a partir de resultados obtenidos con grillas finitas.

Se puede demostrar que las magnitudes presentadas en la sección 1.5 escalan con el tamaño de lado L (en torno a la temperatura crítica T_c) de acuerdo a las siguientes leyes exponenciales,

$$M(T) \sim (T_c - T)^\beta \rightarrow L^{-\beta/\nu} \quad (21)$$

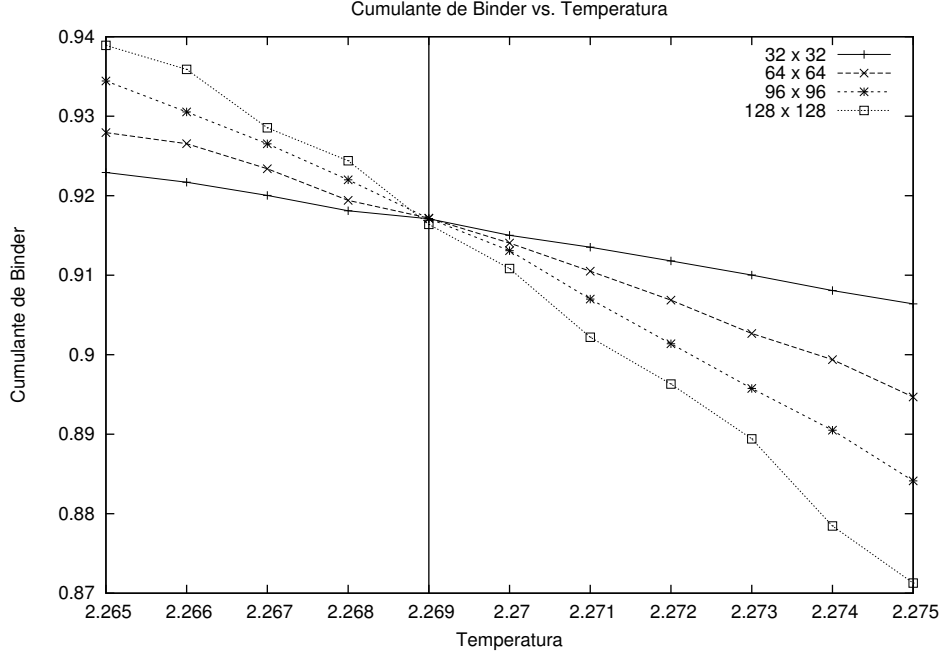


Figura 5. Cumulante de Binder en función de la temperatura del sistema para varios tamaños de grilla con 5×10^7 pasos de Monte Carlo.

$$C(T) \sim |T - T_c|^{-\alpha} \rightarrow L^{\alpha/\nu} \quad (22)$$

$$\chi \sim |T - T_c|^{-\gamma} \rightarrow L^{\gamma/\nu} \quad (23)$$

donde T_c, β, α y γ son parámetros que se deben determinar.

La temperatura de transición T_c se puede determinar utilizando el cumulante de Binder,

$$g = \frac{1}{2} \left(3 - \frac{\langle M^4 \rangle_L}{\langle M^2 \rangle_L^2} \right) \sim \tilde{G} \left[L^{1/\nu} (T - T_c) \right]. \quad (24)$$

En la figura 5 se presenta un gráfico de g en función de T para sistemas de distintos tamaños con 5×10^7 pasos de Monte Carlo. Se realizó un proceso iterativo en función de los pasos de Monte Carlo hasta que todas las curvas se intersecten en el punto $\tilde{G}(0)$ correspondiente a $T = T_c$. Este procedimiento, ilustrado en la figura 5, posibilita la estimación de la temperatura crítica a $T_c \simeq 2,269$ en acuerdo a resultados teóricos.

Por otra parte, graficando el cumulante de Binder en función de $L^{1/\nu}[T - T_c]$ y seleccionado cuidadosamente el exponente ν se puede lograr que todas las curvas colapsen a una sola, como se puede observar en la figura 6. De esa forma, se muestra que el exponente ν es igual a 1 de acuerdo a resultados teóricos.

Por último, haciendo uso de la expresión 21, en la figura 7 se muestra el valor de la magnetización por spin evaluados en la temperatura crítica $T_c \approx 2,269$ estimada anteriormente para distintos

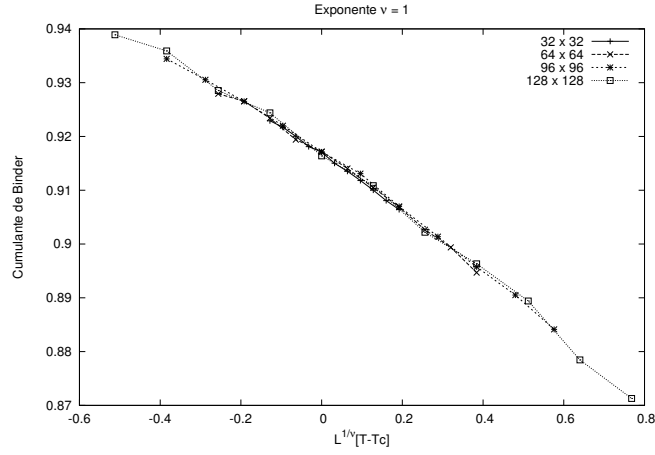


Figura 6. Escaleo de tamaño finito del cumulante de Binder para $T_c = 2,269$ y $\nu = 1$.

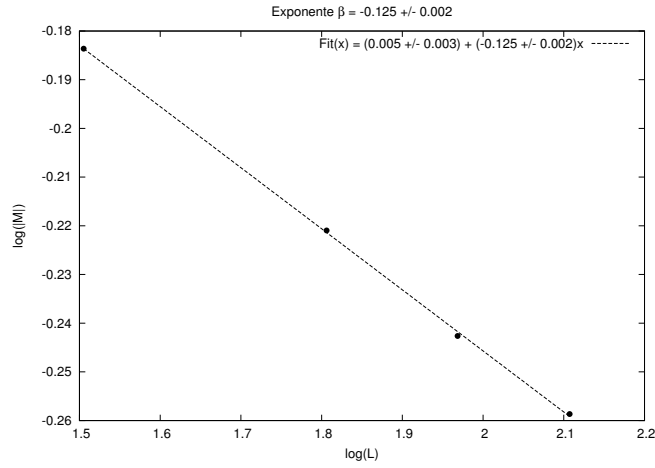


Figura 7. Ajuste del valor absoluto de la magnetización por spin en función del tamaño de la grilla.

tamaños de grilla en escala $\ln - \ln$. Se realiza un ajuste lineal a dicho conjunto de puntos y la pendiente resultante es igual a $\beta/\nu = -0,125 \pm 0,002$. Como sabemos que $\nu = 1$, el valor estimado para el exponente $\beta = -0,125 \pm 0,002$ en congruencia con resultados teóricos.