Simulación de Montecarlo del Modelo de Ising bidimensional

Pablo Lechón Alonso

May 29, 2019

1 Acerca del Modelo de Ising

Este modelo estudia, el comportamiento de sistemas ferromagneticos. El modeloque se define para este estudio en 2D consiste en una red en la que en sus nodos, los espines pueden tomar valores -1 o +1.

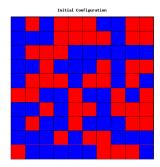


Figure 1: Modelo de Ising 2D.

El hamiltoniano del sistema es

$$H = -J\sum_{\langle ij\rangle} S_i S_j - H\sum_i S_i \tag{1}$$

La ventaja de este modelo tan simple es que gracias a la universalidad, permite predecir el comportamiento macroscópico de otros modelos mas complejas. Este modelo no representa pues, sistemas reales. A lo sumo, podría representar la superficie de un sistema real, pero no uno completo. Es su comportamiento macroscópico y su universalidad lo que nos interesa realmente. Debido a que esta universalidad se mantiene en los exponentes críticos, se van a calcular estos, teniendo en la cabeza que pueden servir para otros sistemas más complejos.

2 Tiempo de Autocorrelación

En la tablas tablas siguientes se adjuntan los valores de tiempos de autocorrelación para ambos algoritmos

HB	nbloque	lbloque	$ au_E$	$\Delta \tau_E$	$ au_\chi$	Δau_{χ}
L = 8	10	100000	4.529	0.048	6.213	0.076
L = 16	10	100000	14.33	0.27	26.10	0.65
L = 32	10	100000	48.8	1.7	117.0	6.2
L = 64	10	100000	171	11	580	68
L = 128	10	100000	480	52	1900	410

Table 1: Tiempos de autocorrelación de la energía y la magnetización para el algoritmo de baño caliente

En las figuras 2a, y 2b podemos observar la función de correlacion C(t) en función del tiempo transcurrido, para la Energía (E) y la Magnetización (M). La función de correlación mide cuánto se aleja la magnitud de la media. Observamos que ambas magnitudes *olvidan* la configuración inicial pasado un cierto tiempo.

Podemos observar que el tiempo que tardan las magnitudes en *olvidar* la configuración inicial es mayor cuanto mayor es el retículo. Esto es, el tiempo de autocorrelación de los retículos con menor tamaño es menor.

Si dibujamos en escala bilogaritmica los diferentes tiempos de autocorrelación como función de L, obtenemos una recta con pendiente positiva. Efectivamente, para mayores valores de L, el sistema tarda más en termalizar

SW	nbloque	lbloque	$ au_E$	$\Delta \tau_E$	τ_{χ}	Δau_{χ}
L = 8	10	100000	2.597	0.021	2.553	0.020
L = 16	10	100000	3.263	0.029	3.115	0.027
L = 32	10	100000	4.064	0.041	3.706	0.035
L = 64	10	100000	5.028	0.056	4.369	0.045
L = 128	10	100000	5.719	0.067	4.838	0.052

Table 2: Tiempos de autocorrelación de la energía y la magnetización para el algoritmo de Swendsen-Wang.

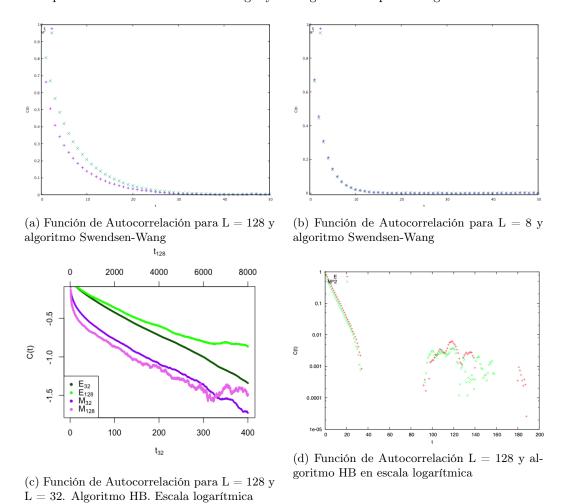


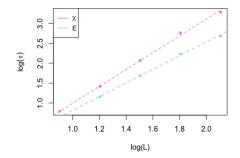
Figure 2

por el simple hecho de ser más grande. La forma lineal de la gráfica 3 se debe a que para el tiempo de correlación integrado, tenemos que se cumple la relación

$$\tau^{int} = aL^z \tag{2}$$

donde z es el **exponente dinámico**, a una constante multiplicativa y L la dimensión del retículo. Esta expresión es válida en el punto crítico, porque la longitud de correlación en esta zona es del orden del tamaño del sistema, L. En general, el tiempo de autocorrelación vendría dado por $\tau \propto (min(\xi,L))^z$. Si estuvieramos alejados del punto crítico, $\xi < L$, pero como estamos calculando en el punto crítico, la longitud de correlación es del orden del tamaño del sistema. Por eso empleamos L. En el caso de estar alejados del punto crítico, i.e. $K < K_c$ hay un límite termodinámico para la longitud de correlación, que se alcanza cuando el tamaño del sistema es lo suficientemente grande. Esto es lo que se puede apreciar en la figura 5a y 5b, donde vemos que para ambos algoritmos, los tiempos de correlación tienden a valores constantes. Cuanto más cercana sea K a K_c , más grande deberemos hacer L para llegar al límite termodinámico. Sin embargo, en el punto crítico, la longitud de correlación crece como L. Por tanto el tiempo de correlación también crece con L indefinidamente. Tomando logaritmos podemos transformar la expresión exponencial en una lineal, y tomar z como la pendiente del ajuste en escala logaritmica a los datos obtenidos. Esto se ha hecho en la figura 3.

Estos resultados se han calculado para los observables E y M, y para cada algoritmo SW y HB. De entre



	Magnetización	Energía
S-W	$z = 0.294 \pm 0.014$	0.237 ± 0.014
H-B	$z = 2.118 \pm 0.027$	1.715 ± 0.031

Figure 3: Ajuste lineal al tiempo de correlación en función del tamaño del sistema en escala bilogarítmica

Table 3: Valores de z obtenidos

los tiempos de autocorrelación para cada magnitud, se ha cogido el mayor tiempo de correlación, debido a que para considerar un sistema termalizado, todas sus magnitudas han estarlo.

En el punto crítico el tiempo de correlación crece indefinidamente, podemos observar que para el algoritmo SW el tiempo de autocorrelación integrado crece mucho más despacio que para el algoritmo HB. Esto hace del SW un algoritmo más eficiente.

Como podemos ver en la tabla 3 , se observan resultados incompatibles para el exponente dinámico de la energía y de la magnetización. Podríamos explicar esto como correcciónes de tamaño finito si al quitar los retículos más pequeños, los números incompatibles se fueran acercando. Esto se ha hecho para ambos algoritmos, y los resultados no han convergido apreciablemente a un mismo valor. En el baño caliente el tiempo que tarda la información en propagarse una longitud de correlación va como ξ^2 (L^2 en el punto crítico, ya que la longitud de correlación es del orden del tamaño del retículo en este punto). Esto es, z = 2. La consecuencia de este exponente es que el tiempo crítico aumenta con la longitud del retículo de manera cuadrática. De esta manera, no podemos aumentar mucho el retículo, ya que si lo hacemos, $L \propto L_{bloque}$, y no tendremos termalización. Este no es el caso del algoritmo SW, que, con un exponente dinámico menor, permite que hagamos cálculos con retículos muy grandes con bastante precisión, ya que aseguramos que hay termalización. Esta limitación queda bien reflejada en la figura 2c. En ella, se han comparado el decaimiento de la función de autocorrelación para el retículo más grande, L = 32. Podemos apreciar cómo para este último tamaño de retículo, la función de autocorrelación decaen a un ritmo muy parecido (la zona exponencial, son rectas paralelas), mientras que para el retículo L = 128 no ocurre esto. Si quisiéramos ver

Concretando; para un retículo L=128, tendríamos que

$$\tau_{int,HB} = a \ 128^{z_{HB}} \approx 2260 \tag{3}$$

$$\tau_{int,SW} = a \ 128^{z_{sw}} \approx 6 \tag{4}$$

De esto deducimos que para el algoritmo HB no se cumple que $\tau^{MC} >> \tau_{int,HB}$, y por tanto no deberíamos fiarnos de los resultados obtenidos. En el caso del algoritmo SW, vemos que $\mathcal{L}_{bloque} >> \tau_{int,SW}$, así que es un algorimto más fiable, y podemos asegurar la termalización de los observables.

Podemos ademas realizar una estimación del tiempo de correlación exponencial, apartir de los datos en escala logarítimica de la función de correlación de los observables E y χ para ambos algoritmos.

La observación más evidente es que el tiempo de autocorrelación exponencial asociado al algoritmo HB es, como ya habíamos predicho, mucho mayor que el asociado a SW. Ademas, el ajuste lineal es mucho más preciso para el segundo algoritmo que para el primero. Los ajustes lineales a SW tienen mayor calidad que los realizados para HB. No se puede ser más preciso a la hora de analizar la calidad del ajuste, porque en cantidades como C(t), que proceden de la misma simulación, la correlación estadística es enorme, y no resulta fácil determinar la calidad de un fit sólo con el valor de chi².

Otra observación de interés es comprobar que para el algoritmo HB, el tiempo de autocorrelación exponencial para la energía es algo menor que para la magnetización. La energía termaliza antes que la magnetización aparentemente. Sin embargo, lo que realmente está ocurriendo es que los modos altos de la energía desaparecen muy rapido. El modo más lento (el que decae con $e^{-t/\tau_{exp}}$) es igual para ambas magnitudes.

Por otra parte, nótese que en el caso del algoritmo HB, el ajuste lineal a la energía se ha efectuado desde t=1000, no desde t=0. Esto se ha elegido así debido a que un ploteo aproximativo inicial reveló un decaimiento muy rápido para t<1000 que no se ajustaba debidamente a una ley exponencial (puntos grises en la figura 4a) De hecho, podemos apreciar en la figura 2c que a tiempos cortos, la energía evoluciona muy rapido hacia la termalización. Esto se debe a la naturaleza del algoritmo HB. Este algoritmo hace cambios en los espines a escalas pequeñas. Por tanto, funciona bien a tiempos cortos (a escala 2 es perfecto). La energía pues termaliza

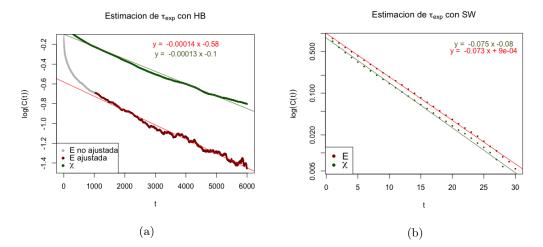


Figure 4: Estimación de los tiempos de correlación exponenciales a partir de la función de correlación C(t) en escala logarítmica para cada algoritmo. En ambos casos L=128

muy rapidamente al principio del algoritmo. Sin embargo cuando esperamos el tiempo suficiente se empiezan a formar dominios que van creciendo, que tienen una repercusión en la energía. Esta se manifiesta en que al principio parece termalizar muy rápido, y luego el decaimiento se estabiliza a una recta con la misma pendiente que la magnetización. Por el contrario, a la magnetización no le pasa esto. Así pues, la importante conclusión que tenemos que sacar de esto es que porque una magnitud aparentemente termalice más rápido, esto no es razón para pensar que todas las demas lo van a hacer así de rápido.

También hemos de notar que para el caso del HB se hicieron 50000 iteraciones. Teniendo en cuenta el tiempo exponencial obtenido, de entorno a 8000, sólo hemos esperado del orden de 6 τ para la termalización. Sin embargo, para hacer unos cálculos decentes, el mínimo tiempo que deberíamos esperar es 10 τ . Es por esta razon que en lo que sigue de informe, se usará siempre el algoritmo SW

El algoritmo SW, lo que hace es trazar dominios y después los va volteando de manera aleatoria. Bloques muy grandes, que tenían signos diferentes, los pone con el mismo signo y viceversa. Esto significa un movimiento no local que hace que la magnetización cambie muchísimo en pocas iteraciones. Por el contrario, a la energía no le pasa eso. Esta sólo cambia debido a los espines de la frontera, de manera que esta evoluciona más lentamente, y su tiempo exponencial es un poco mayor.

Teniendo en cuenta la expresión
$$C_0(t) = A_0 e^{-t/\tau_{exp}} \tag{5}$$

Podemos estimar los tiempos de autocorrelación exponenciales τ_{exp} para cada magnitud y algoritmo, simplemente hallando el inverso de la pendiente de los ajustes de las figuras 4a y 4b

	НВ	SW
E	6900 ± 11	13.7363 ± 0.0025
γ	7900 ± 11	13.2979 ± 0.0050

Table 4: Tiempos exponenciales

Podemos preguntarnos cómo cambian los tiempos de autocorrelación para distintos valores del retículo, y valores de K más pequeños que K_c . A continuación se presentan dos gráficas que recojen las conclusiones obtenidas.

La conclusión más importante que podemos sacar de esto a la vista de las gráficas 5a y 5b es que tienden a un valor constante, y no aumentan. La explicación de esto se encuentra en la primera página de este informe.

En todos estos casos, hay una tendencia general en la que para el algoritmo HB, el tiempo de correlación de la energía es menor que el de la magnetización. Esto es al revés para el algoritmo SW.

La magnetización está asociada al parámetro de orden en la fase paramagnética. Los espines se alinean en esta fase a grandes distancias. Esto quiere decir que cuando tenemos un algoritmo capaz de realizar cambios en areas grandes, como es el caso de SW, podemos hacer que la magnetización evolucione muy rápido. Sin embargo, cuando tienes un algoritmo que modifica areas en escalas pequeñas, como es el caso del baño caliente, esto

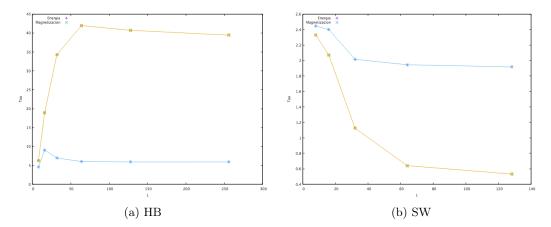


Figure 5: Tiempo de autocorrelación de E y M en función de L para un valor de $K < K_c$, y para ambos algoritmos.

no pasa. Esto explica que en el algoritmo SW la magnetización termalize antes que la energía. Para explicar porqué esto ocurre al reves para el algoritmo de baño caliente, me remito al párrafo bajo la figura 4

3 Medidas de valores medios

A continuación se midieron los distintos observables para distintas L y distintas K. En concreto, se emplearon L=(8,16,32,64,128). La tendencia general es que en el punto crítico algunas magnitudes divergen. A medida que aumentamos L, es decir, a medida que nos acercamos a la condición teórica de sistema infinitamente grande, el pico es más acusado. Además, este pico aparece al aumentar L cada vez más cerca de la K donde tiene lugar teóricamente el punto crítico.

En concreto, E y M no divergen. Por otra parte, el calor específico, la susceptibilidad, y la longitud de correlación sí divergen en el punto crítico. Vemos unos picos que evolucionan con L de la manera que ya se ha explicado. Ademas de los datos de la simulación, se han superpuesto para la Energía, Magnetización y Calor específico, las curvas teóricas del modelo de Ising en 2 dimensiones. Las expresiónes analíticas se han sacado del libro de Binney et. al.

Para el caso de la magnetización tenemos

$$M(K) = \left[1 - (\sinh 2K)^{-4}\right]^{1/8} \tag{6}$$

Cabe destacar en el gráfico de la figura 6b que hubo que modificar la precisión con que gnuplot pinta las gráficas debido a que un exponente de 1/8 hace que con poco que aumentemos en el eje x, haya un gran aumento en el eje y. Esto se hizo con el comando set samples 10000. Esta función solo vale para K mayores que K_c , de manera que para $K < K_c$ es 0. Como vemos, los datos obtenidos mediante la simulación ponen de manifiesto el caracer finito del retículo que se ha empleado en la misma. La fórmula es exacta para volumen infinito. Como puede observarse, en los puntos mas cercanos a K_c tenemos mayor diferencia entre los datos a volumen finito y la expresión a volumen infinito.

En el caso del calor específico y la energía tenemos

$$c(K) = \frac{4k_B}{\pi K^2} \left(K \coth 2K \right)^2 \left[K(k) - E(k) - \operatorname{sech}^2(2K) \left(\frac{\pi}{2} - (1 - 2 \tanh^2 2K) K(k) \right) \right]$$
 (7)

У

$$u(K) = -\coth 2K \left(1 - \left[1 - 2\tanh^2 K\right] \frac{2}{\pi} K(k)\right) \tag{8}$$

En estas ecuaciones se tiene que K(k) y E(k) son las integrales elípticas completas de primer y segundo orden respectivamente. Por otra parte K se corresponde con $\beta\epsilon$

$$K(k) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\phi}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \phi}}$$
 (9)

$$E(k) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\phi \sqrt{1 - k^2 \sin^2 \phi}$$
 (10)

$$k = \frac{2\sinh 2K}{\cosh^2 2K} \tag{11}$$

Cabe destacar que la energía no tiene comportamiento crítico. El calor específico presenta una divergencia en el punto crítico.

A simple vista se comprueba que las curvas se ajustan mejor a los retículos más grandes, que son los que se parecen más al caso del sistema infinitamente grande.

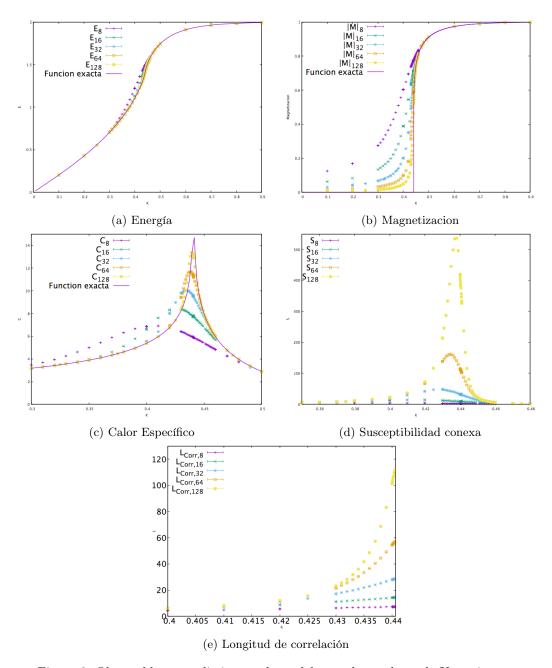


Figure 6: Observables para distintos valores del retículo y valores de K crecientes.

Cabe destacar que para la longitud de correlación sólo se han tomado los valores por debajo de K_c , es decir, la zona paramagnética, debido a que el estimador que se usa para obtenerla no tiene es aplicable a K > Kc. Este estimador es

$$\xi = \frac{\left(\frac{\chi}{F} - 1\right)^{1/2}}{2\sin\frac{\pi}{L}}\tag{12}$$

Este estimador nos da lo que llamamos la susceptibilidad conexa. En el límite termodinámico, la susceptibilidad conexa coincide con la susceptibilidad, en la zona paramagnética. Esto no es así en la zona ferromagnética, por eso no la pintamos en la figura 6e. Además de esto, podemos notar que en el punto crítico, la longitud de correlación tiene valores del orden del tamaño de cada retículo.

4 Límite termodinámico

Si analizamos las curvas al variar L del inverso de la longitud de correlación, podemos ajustarlas por la ley de potencias

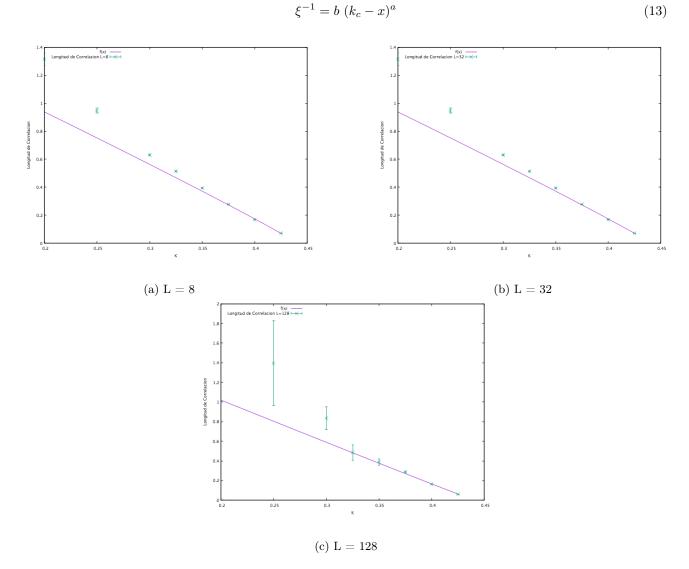


Figure 7: Comparación de las curvas del inverso de la longitud de correlación y la ley de potencias de la ecuación 13

De esta manera obtenemos las graficas de las figuras 7

L=8	0.948 ± 0.029
L = 32	0.947 ± 0.029
L = 128	1.019 ± 0.015

Table 5: Valores de la constante a para distintos tamaños del retículo

Teniendo en cuenta que $\xi \propto |t|^{-\nu}$ y que $|t| \propto |K_c - K|$, el ajuste al inverso de la longitud de correlación nos permite hacer una estimación inicial de el exponente crítico $\nu \approx 1$. Esta estimación se realizará más precisamente en el apartado de finite size scaling

Podemos estudiar cómo crece con L el pico del calor específico y el de la susceptibilidad conexa. Si superponemos en una misma gráfica los datos correspondientes, haciendo una interpolación con splines cúbicos podemos visualizar los picos facilmente y ver su evolución.

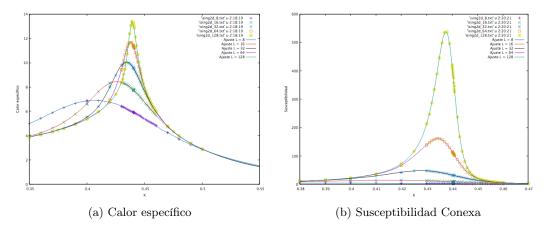


Figure 8: Crecimiento del pico del calor específico y la susceptibilidad conexa a medida que L aumenta.

5 Finite-Size Scaling

La idea de este concepto es que yo tengo una cantidad que diverge en el punto crítico, por ejemplo, el calor específico. En el límite termodinámico tiene que salir infinito. Sin embargo, al ser mi sistema uno de tamaño finito, en K_c no diverge. La pregunta que nos hacemos es, cuál es el efecto de tamaño finito sobre un observable respecto del mismo observable en el sistema infinito. La diferencia entre estos dos observables es una función exclusivamente de la longitud de correlación del sistema en unidades del tamaño. Este Ansatz toma la forma matemática de la ecuación 14

$$O_L(t) = O_{\infty}(t) f_0\left(\frac{\xi_{\infty}(t)}{L}\right) \tag{14}$$

Esta hipótesis se demuestra a partir de teoria del Grupo de Renormalización. Si sabemos cuantificar esta diferencia, podemos hallar los exponentes críticos como si se tratase de un sistema infinito, ya que basta con 'eliminar' los efectos que podemos cuantificar, de la finitud del sistema. En la ecuación 14, t es la temperatura reducida, y O los observables en el sistema finito e infinito. Así pues, los efectos de tamaño finito sólo dependen de la relación entre la longitud de correlación y el tamaño del sistema. Por ejemplo, si tengo un sistema el doble de grande pero cuya longitud de correlación también es el doble de grande, los efectos de volumen finito son los mismos. Asímismo, si disminuyo el volumen del sistema, los defectos de tamaño finito crecen mucho. Puedo hacerlos decrecer si me alejo del punto crítico. Si en la ecuación 14 explicitamos la dependencia en t de la longitud de correlación

$$\xi_{\infty}(t) \propto |t|^{-\nu} \tag{15}$$

Mediante un cambio de variable, y teniendo en cuenta un observable que diverge como $O_{\infty}(t) \propto |t|^{-x}$ podemos escribir la siguiente función

$$O_L(t) \propto L^{x_0/\nu} F_0(tL^{1/\nu})$$
 (16)

Que es una función perfectamente analítica, ya que el valor medio de un observable en un retículo finito es una cosa definida, la suma de funciones exponenciales, que son analíticas. Si en la ecuación de arriba hago t = 0, no se cuanto vale F_0 , pero es una constante, luego tengo que

$$O_L(0) \propto L^{x_0/\nu} \tag{17}$$

y ya se como es el comportamiento. x_0 es el exponente que dice cómo diverge la cantidad medida en el punto crítico.

Empleamos esta última ecuación para todos nuestros observables. Queda un problema, y es que en el caso de la longitud de correlación, $x_0 = \nu$, luego la longitud de correlación crece como L. Esto es trivial, debido a que era la hipótesis de partida. De esta manera, para sacar ν podemos hacer la derivada con respecto a O(t).

$$\left(\frac{d}{dt}\,\xi_L\right)_{t=0} \propto L^{1+1/\nu} \tag{18}$$

Llegados a este punto, podemos calcular los exponentes críticos mediante las siguientes relaciones que se desprenden de la discusión anterior.

$$C \propto L^{\alpha/\nu} \quad M \propto L^{-\beta/\nu} \quad \chi \propto L^{\gamma/\nu} \quad \xi' \propto L^{1+1/\nu}$$
 (19)

Así que lo primero de todo es obtener ν . Si representamos la derivada de la longitud de correlación frente al tamaño del sistema, podemos ajustar la ley exponencial para sacar el exponente b. Teniendo en cuenta que

 $b=1+1/\nu$, y el ajuste de la figura 10a obtenemos que $\nu=1.0190\pm0.0067$. A partir de aquí el resto de los exponentes críticos se obtienen mediante ajustes de leyes de potencias al observable en cuestión. Los valores que se desprenden de estos ajustes se recogen en la tabla 6, donde a su vez son comparados con los teóricos. Puede comprobarse fácilmente que se cumplen las relaciones de escala $\alpha+2\beta+\gamma=2$ y $\frac{2\beta}{\nu}+D=\frac{\gamma}{\nu}$, con D =

	Simulación	Teórico
α	0.27 ± 0.018	0
β	0.126847 ± 0.00022	0.125
γ	1.7879 ± 0.0014	1.75
ν	1.0190 ± 0.0067	1

Table 6: Comparación entre los exponentes críticos obtenidos mediante la simulacion de Monte Carlo con los teóricos para el modelo de Ising bidimensional. Los errores se han obtenido asumiendo idependencia estadística entre los facotres γ/ν , ν ...

2. En la tabla se observan discrepancias con los valores teóricos que no se explican con la suposición realizada de independencia estadística de los factores. El origen de estas desviaciones es el hecho de estar trabajando en un volumen finito. Para cuantificar cuanto afecta esto a nuestras medidas comprobamos cómo varían las estimaciones según se van eliminando sucesivamente los retículos más pequeños. De esta manera conocemos el tamaño de los errores sistemáticos debidos a correcciones de tamaño finito. En la figura 9 podemos observar

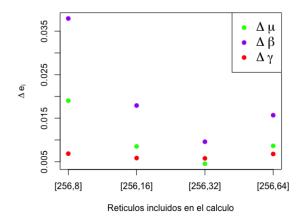


Figure 9: Variación del la diferencia entre el valor estimado y el teórico para varios exponentes críticos a medida que vamos quitando sucesivamente y en orden creciente los retículos más pequeños.

que si quitamos los retículos L=8~y~L=16, obtenemos la separación mínima de los valores obtenidos respecto a los teóricos. Esto confirma y cuantifica los errores cometidos por trabajar con retículos finitos

Nótese también que χ^2/NDF no dista mucho de 1 en ninguno de los ajustes realizados. Tampoco es muy cercano a 1 o a 0 el p-value en ninguno de los ajustes realizados, oscilando en todos entre 0.3 y 0.7. Nos encontramos con el problema de que para el caso del calor específico tenemos un exponente pequeño, cuando debería ser 0. Si no supieramos cuál es el valor real del exponente crítico, sería tarea muy dificil distinguir un exponente pequeño de uno cero. Comprobemos la estabilidad de este exponente cambiando los datos a los que ajustamos. Quitemos los retículos más pequeños, y volvamos a realizar el ajuste. Si desestimamos los dos primeros retículos, obtenemos un exponente de 0.22, si quitamos un tercero, obtenemos 0.19. De esta manera podemos intuir que el exponente disminuye tanto como queramos a medida que aumentamos el tamaño del retículo, tendiendo a 0 en el infinito.

Otra comprobación para ver si el valor es compatible con 0 es hacer un ajuste logarítmico del tipo $A \log L + B$. Si ajustara bien, querría decir que el ajuste es compatible con un exponente tan pequeño como queramos. Esto es, la divergencia es logaritmica. Si hacemos $L^x = e^{x \log L} \approx x \log L$, que es lo que vamos a ajustar. Esto es válido por supuesto para x pequeño. Si esto se cumple, como ya se ha dicho, tenemos un crecimiento logaritmico, concluyendo pues que no podemos distinguir entre un exponente 0 y un exponente 0.2. Es decir, que puede ser 0.2 o 0 con correcciones logarítmicas.

Como podemos apreciar en la figura 11, el ajuste logarítmico es perfectamente compatible con los datos de la simulación, lo que supone entonces que el exponente crítico es indistinguible de 0.

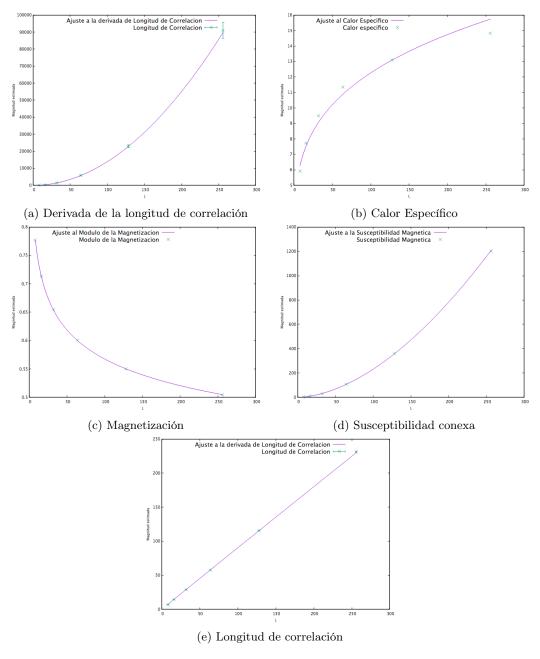


Figure 10: Observables en el punto crítico, en función de L creciente.

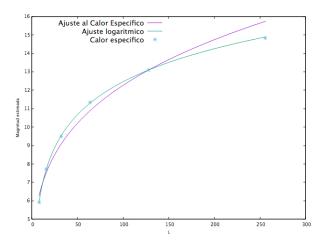


Figure 11: Ajuste logarítmico al calor específico comparado con el ajuste a una potencia