

Simulació del model d'Ising 2-D mitjançant l'algoritme de Metropolis

Pau Torrente Badia

Desembre 2022

Resum

L'objectiu principal d'aquest treball és estudiar el comportament crític d'un ferromagnet uniaxial en el marc del model d'Ising 2-D. Mitjançant l'algoritme de Metropolis, s'obté l'estat d'equilibri de xarxes quadrades d'espins de diferents mides a diferents temperatures per tal d'analitzar la magnetització, l'energia, i la resta de variables termodinàmiques que se'n deriven. Per altra banda, també es discuteix l'efecte de la mida del sistema sobre el comportament dels diferents paràmetres estudiats i la validesa del mètode de *Finite size scaling* per tal d'estudiar el sistema en el límit termodinàmic.

1 Introducció

El model d'Ising és un marc matemàtic molt utilitzat per descriure sistemes ferromagnètics, en el qual s'assigna als àtoms del material spins uniaxials que interactuen entre si segons la orientació que prenen. En aquest treball es considera un model bidimensional d'una xarxa quadrada de dimensions $L \times L$ amb condicions periòdiques de contorn, en què cada spin interactua únicament amb els spins contigus, també anomenats primers veïns. La interacció resultant és favorable energèticament si els spins tenen la mateixa orientació i desfavorable altrament. El hamiltonià que descriu el sistema és doncs:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + h \sum_i S_i \quad (1)$$

On J és la constant d'acoblament entre spins, que dona la intensitat de la interacció, i que pel cas ferromagnètic és positiva, i h és un camp extern, que per aquest estudi es considera nul. És important destacar que aquest és un cas molt rellevant acadèmicament, ja que és un dels pocs models mecanoeestadístics que presenten transició de fase i que tenen solució analítica, permetent comparar els resultats obtinguts numèricament amb els exactes.

Pel que fa al càlcul dels estats estables del sistema descrit per aquest hamiltonià, es fa servir un algoritme de Metropolis, el qual és un tipus de mètode Montecarlo, que es basa en la realització de canvis successius sobre la xarxa quadrada de manera aleatòria i acceptant-ne només aquells que compleixen:

1. El canvi redueix l'energia del sistema
2. El canvi no és favorable energèticament, però un nombre aleatori generat segons una distribució aleatòria $U(0, 1)$ surt menor que $e^{-\frac{\Delta \mathcal{H}}{k_B T}}$

Després d'un nombre suficient de canvis doncs, el sistema s'estabilitza i presenta una distribució aproximadament en línia amb la funció de partició que deriva de \mathcal{H} , i que a priori no es coneix.

Per tal d'estudiar el sistema termodinàmicament, es realitza aquest procés d'acceptació-rebuig, partint d'una configuració amb els spins orientats de manera aleatòria, un total de $60000 \cdot N$ vegades, o 60000 passes de Montecarlo, on N és el nombre total d'spins, descartant les primeres 10000 passes per deixar que el sistema s'estabilitzi. Prenent valors de l'energia i magnetització totals del sistema cada 20 passes i reinicant el sistema canviant la llavor que inicilitza el generador de nombres aleatoris 200 cops i promitjant al final, s'estudien variables com la capacitat calorífica o la susceptibilitat magnètica que permeten acabar caracteritzant la transició del sistema d'una fase ferromagnètica a una de paramagnètica. Realitzant aquest procés a diferents temperatures per sistemes de diferents mides, s'extrapola el comportament del sistema per al límit termodinàmic, i s'extreuen els diferents exponents crítics que determinen el comportament crític del sistema.

La implementació d'aquesta simulació es fa en Fortran 2008, paral·lelitzant els càlculs dividint el rang total de temperatures d'estudi en 20 intervals executats en nuclis diferents de manera simultània, per intentar reduir el temps de càlcul el màxim possible. Tot i això, el gran nombre d'iteracions realitzades ha suposat un temps total de càlcul de 72.3 hores.

2 Variables d'estudi i evolució del sistema

Primer de tot es presenten totes les variables que es faran servir en l'estudi.

Per tal de simplificar els càlculs i les expressions, s'expressen totes en unitats reduïdes adimensionals.

En primer lloc, les calculades sobre una única configuració del sistema són:

$$T^* \equiv \frac{T}{k_b J} \quad e^* = \frac{E^*}{N} \equiv \frac{E}{NJ} = \frac{1}{N} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \quad m^* = \frac{\sum_i S_i}{N} \quad (2)$$

On els índexs i i j recorren totes els spins de la xarxa

Per altra banda les calculades promitjant sobre configuracions independents, juntament amb les incerteses d'origen estadístic:

$$\langle (e^*)^k \rangle = \frac{(e^*)^k}{Sum} \quad \epsilon_e = \frac{1}{N} \frac{\sqrt{\langle (e^*)^2 \rangle - \langle e^* \rangle^2}}{\sqrt{Sum}} \quad \langle (m^*)^k \rangle = \frac{(m^*)^k}{Sum} \quad \epsilon_m = \frac{\sqrt{\langle (m^*)^2 \rangle - \langle m^* \rangle^2}}{\sqrt{Sum}} \quad (3)$$

$$c_v^* = \frac{c_v}{k_b} = N \frac{\langle (e^*)^2 \rangle - \langle e^* \rangle^2}{T^2} \quad \chi^* = \frac{\chi}{k_b} = N \frac{\langle (m^*)^2 \rangle - \langle m^* \rangle^2}{T} \quad (4)$$

On Sum és el nombre de configuracions sobre les quals es fan els promitjos.

Per altra banda, com ja s'ha esmentat, l'algoritme de Montecarlo porta al sistema cap a l'equilibri seguint una sèrie de passos que conformen el que s'anomena una cadena de Markov i sobre els quals es calculen els promitjos que ara s'ha esmentat. Tot i que en altres àmbits o sectors aquest procés sí que s'ha d'entendre com una evolució temporal, la simulació que es realitza en aquest treball no representa necessàriament cap procés dinàmic d'evolució dels spins. En qualsevol cas sí que és interessant veure com evolucionen l'energia i magnetització per spin del sistema:

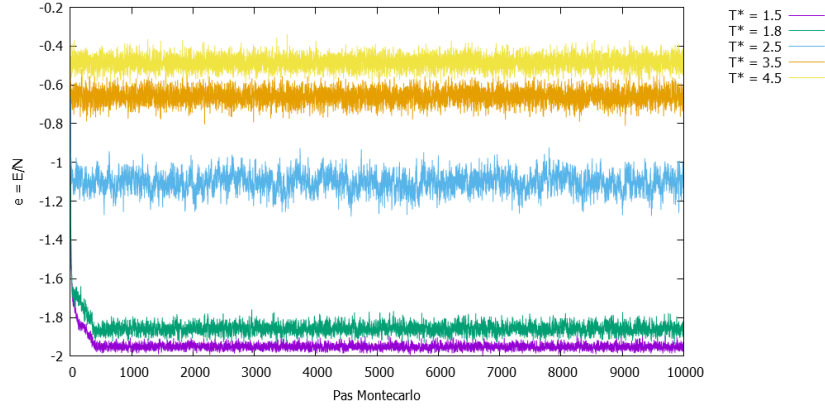


Figura 1: Evolució de l'energia mitjana per spin en funció del nombre de passes realitzades per 5 valors diferents de la temperatura de sistema, partint d'una configuració inicial amb els spins orientat de manera totalment aleatòria.

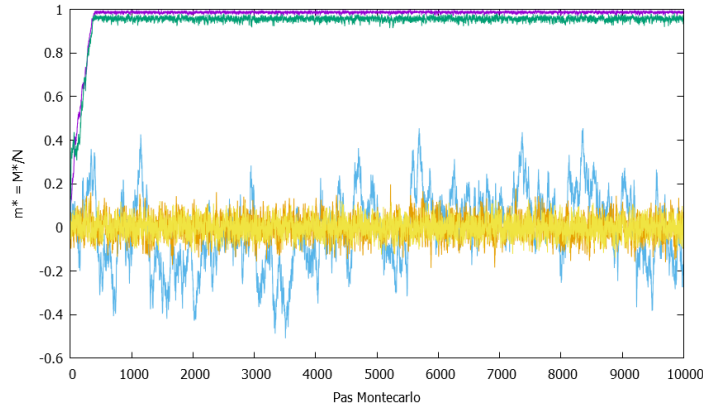
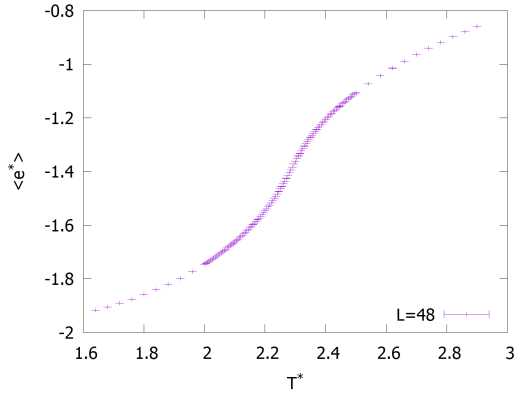


Figura 2: Evolució de la magnetització mitjana per spin en funció del nombre de passes realitzades per 5 valors diferents de la temperatura de sistema, partint d'una configuració inicial amb els spins orientat de manera totalment aleatòria

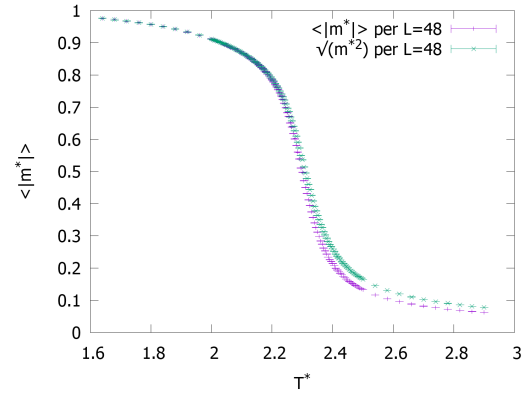
On en ambdues figures ja s'observa que, per temperatures grans, la magnetització i l'energia mitjanes tendeixen a zero, a temperatures reduïdes a un valor finit, i que entremig, al voltant de $T^* = 2.5$, comencen a aparèixer fluctuacions que indiquen que prop d'aquesta temperatura es troba el punt crític.

3 Comportament del sistema en funció de la temperatura

Deixant de banda l'estudi de les diferents variables en funció del nombre de passes de Montecarlo realitzades, es passa a estudiar el comportament de la xarxa d'spins en funció de la temperatura. Per tal de optimitzar recursos alhora que tenir prou dades prop del punt crític, s'han fet mesures cada $\Delta T^* = 0.005$ entre $T^* = 2.0$ i $T^* = 2.5$ i cada $\Delta T^* = 0.04$ altrament. Es presenta primer l'energia i la magnetització mitjanes per partícula per una xarxa de 48^2 spins:



(a) Energia monoparticular mitjana en funció de la temperatura



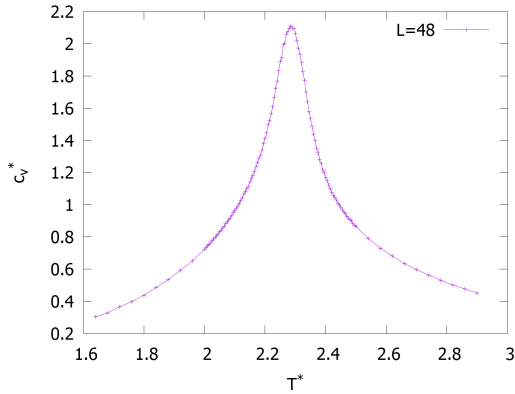
(b) Magnetització monoparticular mitjana en funció de la temperatura

Figura 3: Energia i magnetització monoparticulars d'una xarxa quadrada amb 48^2 . La magnetització s'ha calculat fent el promig del valor absolut i també fent l'arrel del promig de la magnetització al quadrat. Es representen les barres d'error, tot i ser molt poc visibles.

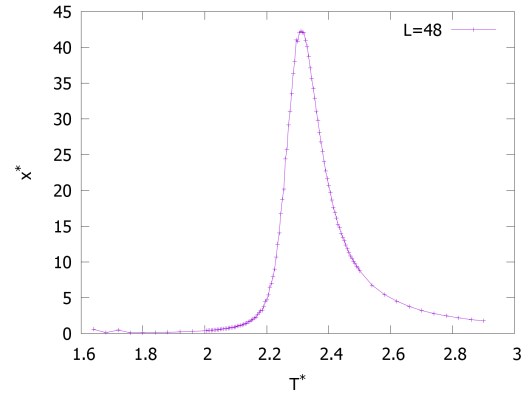
Aquí ja s'observa com el sistema passa d'una fase on cada spin tendeix a estar orientat com els seus veïns (fase ferromagnètica), donant $\langle e^* \rangle \rightarrow -2$ i $\langle |m^*| \rangle \rightarrow 1$, a un altra on l'energia tèrmica de les partícules les fa tendir a orientar-se aleatòriament, donant $\langle e^* \rangle \rightarrow 0$ i $\langle |m^*| \rangle \rightarrow 0$.

Així doncs s'intueix que la temperatura crítica del sistema, que ve donada per els punts d'inflexió de l'energia i la magnetització, és d'aproximadament $Tc^* \approx 2.3$, ajustant una mica més la predicció que s'ha fet en l'apartat 2.

També es presenta el comportament de les funcions de resposta del sistema:



(a) Capacitat calorífica monoparticular en funció de la temperatura



(b) Susceptibilitat magnètica en funció de la temperatura

Figura 4: Comportament de les funcions resposta del sistema de 48^2 spins. Ambdues es calculen a partir de les fluctuacions (variances) de l'energia i la magnetització, respectivament

On un cop més s'observa com a $T^* \approx 2.3$ les dues funcions resposta tendeixen a divergir, sent això un clar indicador de comportament crític, tot i seguir sent suaus i contínues degut a la mida finita del sistema.

Per últim, també mostra com el càlcul de la capacitat calorífica en termes de les fluctuacions de l'energia concorda amb el càlcul fet a partir de les variacions en l'energia mitjana en funció de la temperatura:

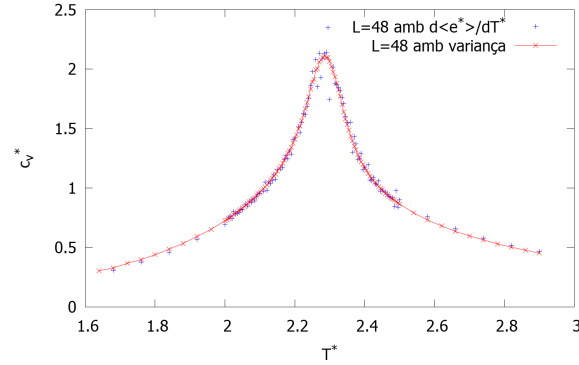


Figura 5: Capacitat calorífica del sistema en funció de la temperatura, calculada a partir de fluctuacions i a partir de les variacions d'energia amb els salts de temperatura. Notar que manquen alguns punts de c_v^* calculats segons $d \langle e^* \rangle / dT$, degut a que els processos de càlcul paral·lelitzat ometen la primera temperatura degut a l'absència d'un punt anterior per comparar. Les barres d'errors hi són representades, tot i no ser visibles.

I es comprova que tot i obtenir resultats que segueixen un comportament menys erràtic i més suau en el cas del càlcul per fluctuacions, els dos mètodes donen uns resultats molt similars.

4 Comportament en funció de la mida del sistema

Ja s'ha pogut observar que per $L = 48$ el sistema dona indicis de l'existència d'un punt crític al voltant de $T^* \approx 2.3$. Ara es presenten resultats anàlegs als que s'acaben de mostrar però per sistemes de diverses mides entre $L = 12$ i $L = 72$:

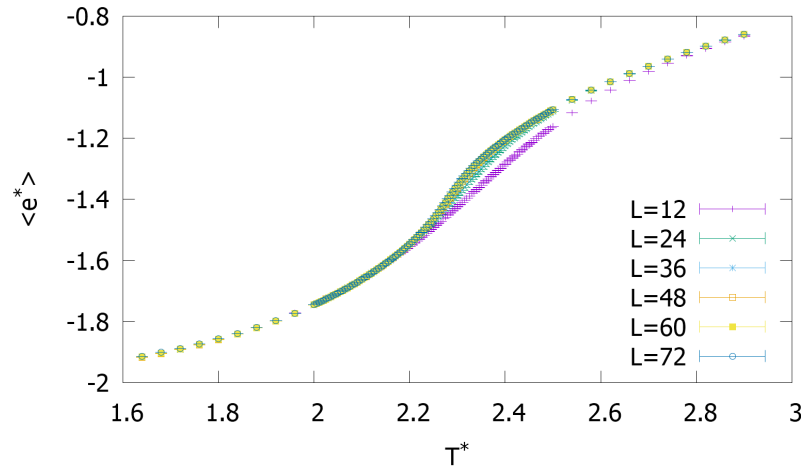


Figura 6: Energia mitjana monoparticular en funció de la temperatura per sistemes de sis mides diferents, entre $L = 12$ i $L = 72$. Tot i que les barres d'errors s'han representat, no són visibles.

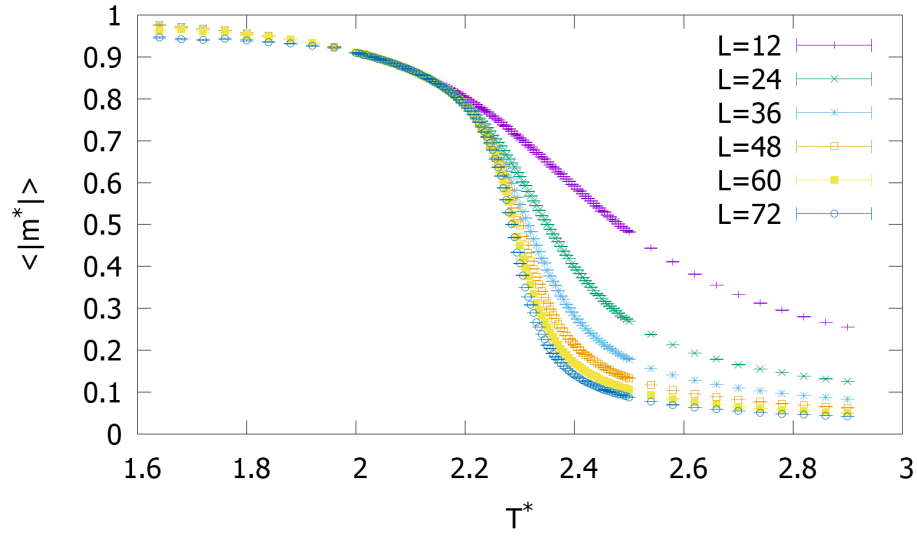


Figura 7: Magnetització mitjana monoparticular en funció de la temperatura per sistemes de sistemes diferents, entre $L = 12$ i $L = 72$. Les barres d'error no són visibles tot i ser-hi representades.

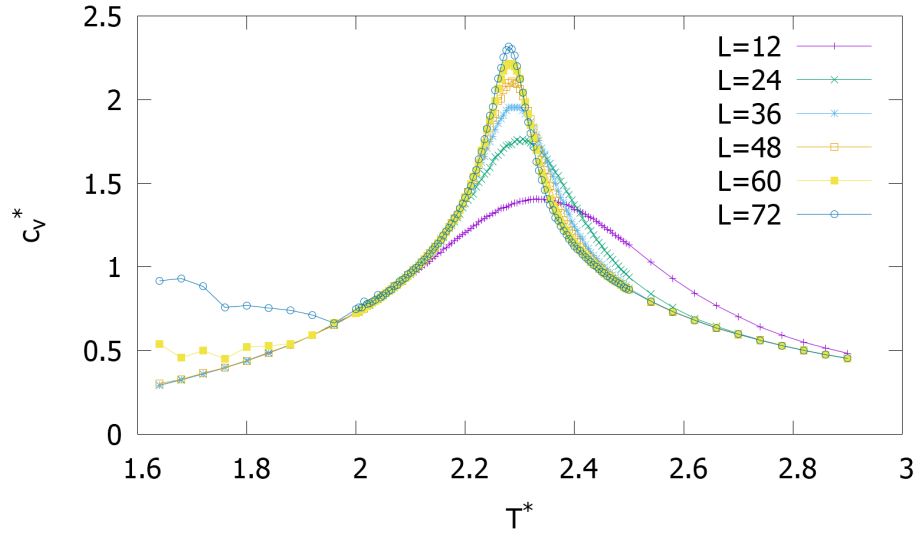


Figura 8: Capacitat calorífica monoparticular, calculada a partir de la variància en l'energia, per sistemes d'entre $L = 12$ i $L = 72$.

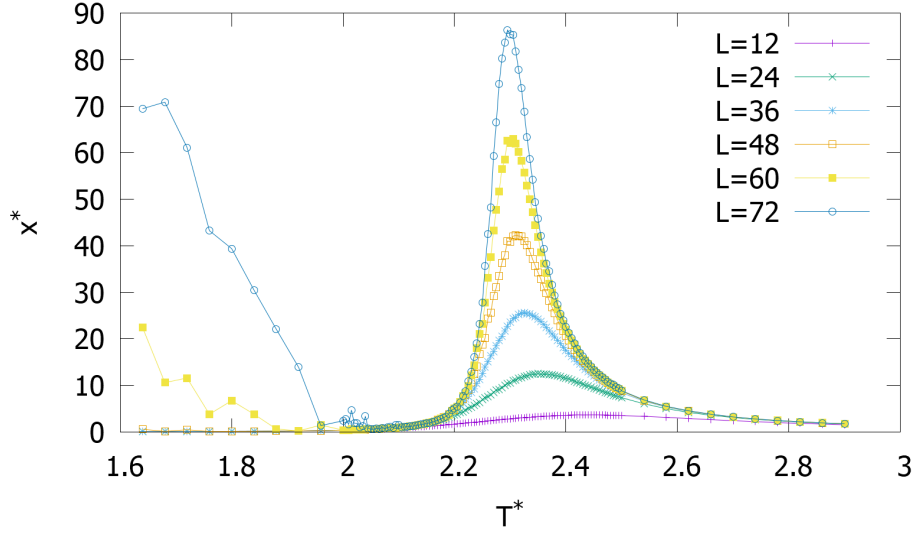


Figura 9: Susceptibilitat magnètica monoparticular, calculada amb la variància de la magnetització, per sistemes d'entre $L = 12$ i $L = 72$.

S'observa com independentment de la mida del sistema, el sistema transiciona d'una fase de major ordre a una de més ordenada a $T^* \approx 2.3$, i el que si que varia en funció de L en la regió de transició són pendents més pronunciats per $\langle e^* \rangle$ i $\langle |m^*| \rangle \rightarrow 0$ i pics més pronunciats en les funcions resposta, especialment en la susceptibilitat.

Aquest fet és degut a que en augmentar la mida el sistema es comporta més com un sistema infinit, en el qual aquestes funcions termodinàmiques tenen comportament divergents.

També en aquestes figures 9 i 8 s'observa com a temperatures baixes les funcions de resposta tendeixen a créixer de manera erràtica, sobretot quan el sistema és gran. Això no s'ha d'interpretar com un comportament termodinàmic, ja que es degut a que el càlcul convergeix molt lentament quan baixa prou la temperatura. Així doncs, aquest punts no s'han de considerar com vàlids.

5 Determinació de la temperatura crítica

Tenint dades de sistemes de diferents mides, podem caracteritzar un comportament pseudocrític (i no crític perquè el sistema és finit) en funció de la mida del sistema i extrapolar-lo a $L \rightarrow \infty$ per tal de determinar el comportament realment crític.

Aquests punts pseudocrítics es prenen allà on les corbes de les funcions de resposta tenen els seus valors màxims.

A partir de les línies de regressió mostrades a la figura 10 i de comparar-ne els coeficients amb el comportament en llei de potències per la temperatura pseudocrítica s'obté la temperatura crítica del sistema:

$$T_{cL}^* = T_c + DL^{-\frac{1}{\nu}} \Leftrightarrow T_{cL} = b + m \cdot (1/L)$$

$$b = \begin{cases} 2.268 \pm 0.001 & \text{per } c_v^* \\ 2.268 \pm 0.002 & \text{per } x^* \end{cases} \Rightarrow T_c^* = 2.268 \pm \sqrt{0.001^2 + 0.002^2} = 2.268 \pm 0.002$$

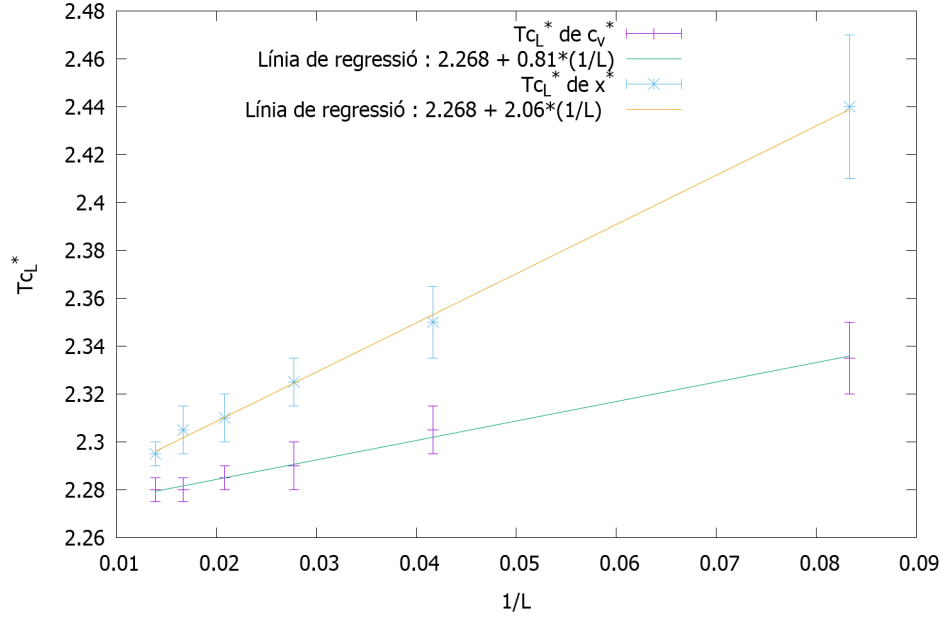


Figura 10: Temperatures pseudocrítiques T_{cL} determinades a partir dels màxims de les corbes de capacitat calorífica i susceptibilitat magnètica en funció de l'invers de la mida del sistema. Els errors en la temperatura crítica s'han pres "a ull", intentant considerar els "plateaus" formats als extrems de les diferents corbes, o les faltes de punts, tot i l'espaiat fi de $\Delta T^* = 0.005$ en aquests rangs de temperatura.

6 Determinació dels exponents crítics

Un cop determinada la temperatura crítica del sistema, es passa a analitzar el comportament en llei de potències de $T_{cL}^* - T_c^*$ de les diferents variables per tal de determinar els exponents crítics. Cal dir aquí que en els següents desenvolupaments, qualsevol lletra llatina en majúscules, e.g. A , B , C representa una constant de proporcionalitat no necessària per als càlculs. També és important dir que que la dependència en les temperatures d'aquestes lleis de potències es passa a dependència en la mida del sistema segons:

$$|T_{cL}^* - T_c^*| \propto L^{-\frac{1}{\nu}} \quad (5)$$

On aquesta expressió deriva de la relació de proporcionalitat entre la longitud de correlació ξ i la mida del sistema.

En primer lloc es presenten els càlculs dels coeficients ν , γ , α i β a partir de regressions lineals de les dades en els punts pseudocrítics:

6.1 Temperatura pseudocrítica i coeficient ν

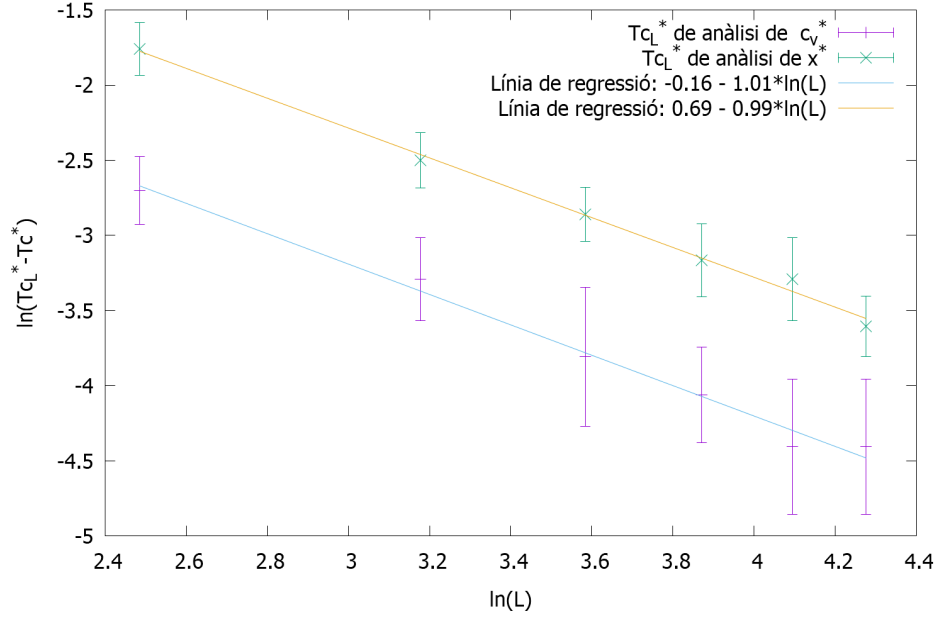


Figura 11: $T_{cL}^* - T_c^*$ en funció de la mida del sistema, aplicant \ln a ambdues variables. Les barres d'error per l'eix de temperatures es donant propagant l'error segons: $\delta \ln(T_{cL}^* - T_c^*) = \frac{\delta T_{cL}^* + \delta T_c^*}{T_{cL}^* - T_c^*}$

$$\ln(T_{cL}^* - T_c^*) = \ln(A) + \frac{-1}{\nu} \ln(L) \Leftrightarrow \ln(T_{cL}^* - T_c^*) = b + m \cdot \ln(L) \quad m = \begin{cases} -1.01 \pm 0.05 & \text{per } c_v^* \\ -0.99 \pm 0.03 & \text{per } x^* \end{cases}$$

$$\Rightarrow \nu = \frac{-2}{1.01 - 0.99} \pm \sqrt{\left| \frac{\delta m_{c_v}}{(0.5(m_{c_v} + m_x))^2} \right|^2 + \left| \frac{\delta m_x}{(0.5(m_{c_v} + m_x))^2} \right|^2} = 1.00 \pm 0.05$$

6.2 Susceptibilitat magnètica i coeficient γ

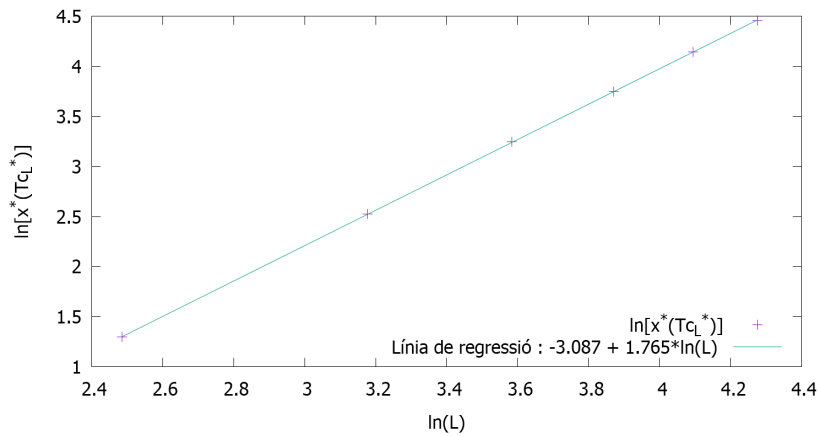


Figura 12: Logaritme dels màxims de la susceptibilitat magnètica $\chi^*(T_{cL})$ en funció de $\ln(T_{cL}^* - T_c^*)$

$$\ln(\chi^*(T_{cL}^*)) = \ln(B) + \frac{\gamma}{\nu} \ln(L) \Leftrightarrow \ln(\chi^*(T_{cL}^*)) = b + m \cdot \ln(L) \quad ; \quad m = 1.765 \pm 0.003$$

$$\gamma = \nu m \pm \sqrt{(\nu \delta m)^2 + (m \delta \nu)^2} = 1.77 \pm 0.05$$

6.3 Capacitat calorífica i coeficient α

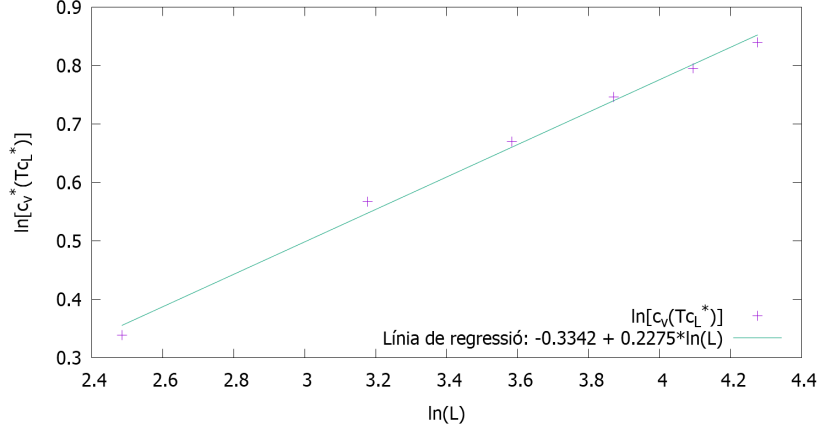


Figura 13: Logaritme dels màxims de la capacitat calorífica $c_v^*(T_{cL})$ en funció de $\ln(T_{cL}^* - T_c^*)$

$$\ln(c_v^*(T_{cL})) = \ln(C) + \frac{\alpha}{\nu} \ln(L) \Leftrightarrow \ln(c_v^*(T_{cL})) = b + m \cdot \ln(L) \quad ; \quad m = 0.278 \pm 0.011$$

$$\alpha = \nu m \pm \sqrt{(\nu \delta m)^2 + (m \delta \nu)^2} = 0.278 \pm 0.018$$

6.4 Magnetització i coeficient β

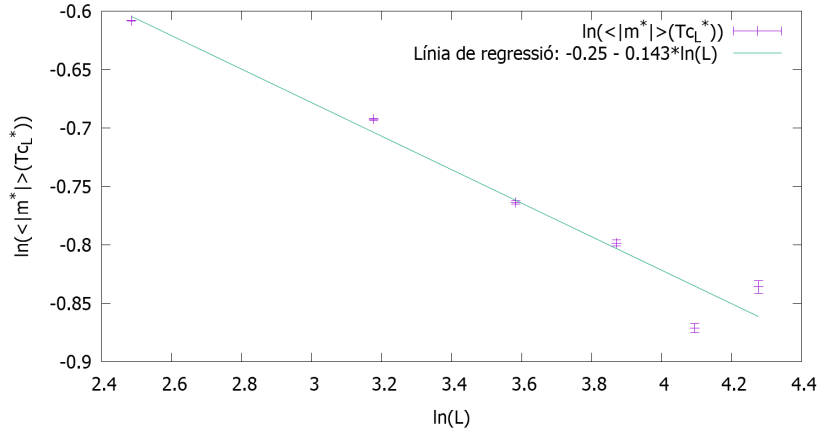


Figura 14: Logaritme de la magnetització monoparticular promig a les temperatures pseudocrítiques determinades a partir dels pics en la susceptibilitat, en funció de $\ln(L)$.

$$\ln(\langle |m^*| \rangle(T_{cL})) = \ln(D) + \frac{-\beta}{\nu} \ln(L) \Leftrightarrow \ln(\langle |m^*| \rangle(T_{cL})) = b + m \cdot \ln(L) \quad ; \quad m = -0.143 \pm 0.016$$

$$\beta = -\nu m \pm \sqrt{(\nu \delta m)^2 + (m \delta \nu)^2} = 0.143 \pm 0.019$$

6.5 Coeficient δ

Per últim, el coeficient δ que caracteritza el comportament de la isoterma crítica es determina a partir dels exponents γ i β segons:

$$\delta = 1 + \frac{\gamma}{\beta} \pm \left(\left| \frac{\delta\gamma}{\beta} \right| + \left| \frac{\gamma}{\beta^2} \delta\beta \right| \right) = 13 \pm 2 \quad (6)$$

On ara s'ha pres l'error com la suma dels valors absoluts degut a que els dos exponents sí que estan molt correlacionats.

7 *Finite Size Scaling* (FSS)

Com ja s'ha observat en les seccions 3 i 4, les funcions estudiades no presenten divergències i aparenten ser suaus pels sistemes finits amb els que s'ha treballat. Això es pot entendre a una hipòtesi a priori, per la qual qualsevol propietat termodinàmica que divergeixi en el punt crític com $P_{L \rightarrow \infty} \sim t^{-\rho}$; $t = \frac{T - T_c}{T_c}$, per sistemes finits serà analítica i es podrà acabar expressant com:

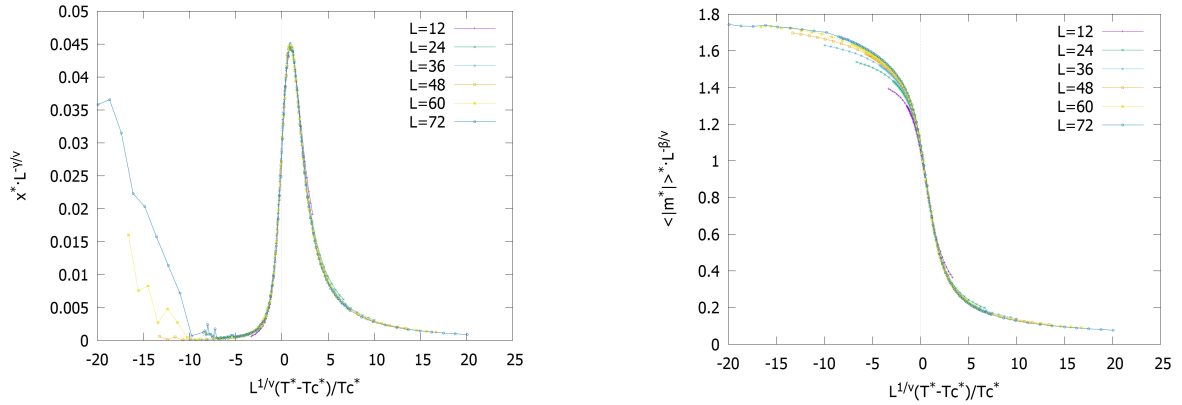
$$P_L(t) = L^{\frac{\rho}{\nu}} \left[p_0 + p_1 L^{\frac{1}{\nu}} t + p_2 L^{\frac{2}{\nu}} t^2 + \dots \right] = L^{\frac{\rho}{\nu}} \psi_P(L^{\frac{1}{\nu}} t) \quad (7)$$

On l'estructura d'aquest polinomi no depèn de L , de manera que si els exponents crítics i la temperatura crítica obtinguts són bons, l'estructura d'una gràfica on es mostri $L^{-\frac{\rho}{\nu}} \cdot P_L(t)$ en funció de $\psi_P(L^{\frac{1}{\nu}} t)$ no dependrà de L . A aquest mètode de reescalat o renormalització de les variables termodinàmiques del sistema se'l coneix com *Finite Size Scaling*.

Si s'agafa només l'ordre lineal del polinomi doncs, i s'aplica a la susceptibilitat i la magnetització:

$$L^{-\frac{\gamma}{\nu}} \cdot \chi_L \propto \frac{T^* - T_c^*}{T_c^*} L^{\frac{1}{\nu}} \quad L^{\frac{\beta}{\nu}} \langle |m^*| \rangle \propto \frac{T^* - T_c^*}{T_c^*} L^{\frac{1}{\nu}} \quad (8)$$

Reescalant les gràfiques presentades en les figures 7 i 9, s'obté:



(a) Magnetització reescalada amb un factor $L^{\frac{\beta}{\nu}}$ en funció de $\frac{T^* - T_c^*}{T_c^*} L^{\frac{1}{\nu}}$.

(b) Susceptibilitat magnètica reescalada un factor $L^{-\frac{\gamma}{\nu}}$ en funció de $\frac{T^* - T_c^*}{T_c^*} L^{\frac{1}{\nu}}$.

Figura 15: Test de l'hipòtesi d'analicitat i del mètode de *Finite Size Scaling* per la magnetització i la susceptibilitat magnètica, fent servir sistemes de 6 mides diferents entre $L = 12$. i $L = 72$.

On s'observa com prop de la temperatura crítica totes les corbes col·lapsen en una de sola, independentment de quina mida tingui el sistema que representen, donant validesa als exponents crítics β , γ i

ν obtinguts en aquest estudi i a la hipòtesi sobre les propietats analítiques de les funcions de sistemes finits.

8 Discussió dels resultats i conclusions

En primer lloc, aprofitant la solució analítica derivada per L. Onsager [1] el 1944, es comparen els valors obtinguts en aquest desenvolupament de la temperatura crítica i els exponents crítics de manera numèrica amb els exactes:

| | Valor trobat numèricament | Valor exacte |
|----------|---------------------------|--------------|
| T_c^* | 2.268 ± 0.002 | 2.2691853... |
| ν | 1.00 ± 0.05 | 1 |
| α | 0.278 ± 0.018 | 0 |
| γ | 1.77 ± 0.05 | 1.75 |
| β | 0.143 ± 0.019 | 0.125 |
| δ | 13 ± 2 | 15 |

Taula 1: Valors de la temperatura crítica i els exponents crítics α , β , γ i ν obtinguts numèricament mitjançant simulació Montecarlo i els anàlegs exactes de la solució de L. Onsager.

I es comprova que tots els paràmetres excepte α , tenen una discrepància amb el valor exacte que entra dins del rang d'incertesa acceptable $x - x_{exacte} \leq 2\delta x$. Es pot afirmar doncs, que els valors en general són compatibles. L'únic exponent que no es compatible amb el seu respectiu valor teòric és el corresponent a la capacitat calorífica, que ja a la figura 8 s'observa que té una certa dependència amb L . També a la figura s'observa com a mesura que augmenta L , les corbes es van apropant, fet que pot indicar que el que caldria fer per tal de trobar un valor per l'exponent α més similar al valor exacte és treballar amb sistemes de mida superior per tal de reduir la dependència en L . Això, però, implicaria un cost computacional molt elevat.

En qualsevol cas, els resultat obtinguts són en general satisfactoris i han permès corroborar que l'estudi de sistemes de partícules en interacció mitjançant simulacions numèriques és perfectament vàlid si es treballa correctament amb les mides finites del sistemes simulats i es fan els diferents promitjos amb suficients mesures.

Referències

- [1] Onsager, L. (1944) *Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition*
- [2] Pathria, R. K. & Beale, P. D. (1996) *Statistical Mechanics, Third edition*, Academic Press.
- [3] Le Bellac, M. (2004) *Equilibrium and non-equilibrium statistical thermodynamics.*, Cambridge University Press.
- [4] Privman, V. (1998) *Finite size scaling and numerical simulations of statistical systems*, World Scientific.