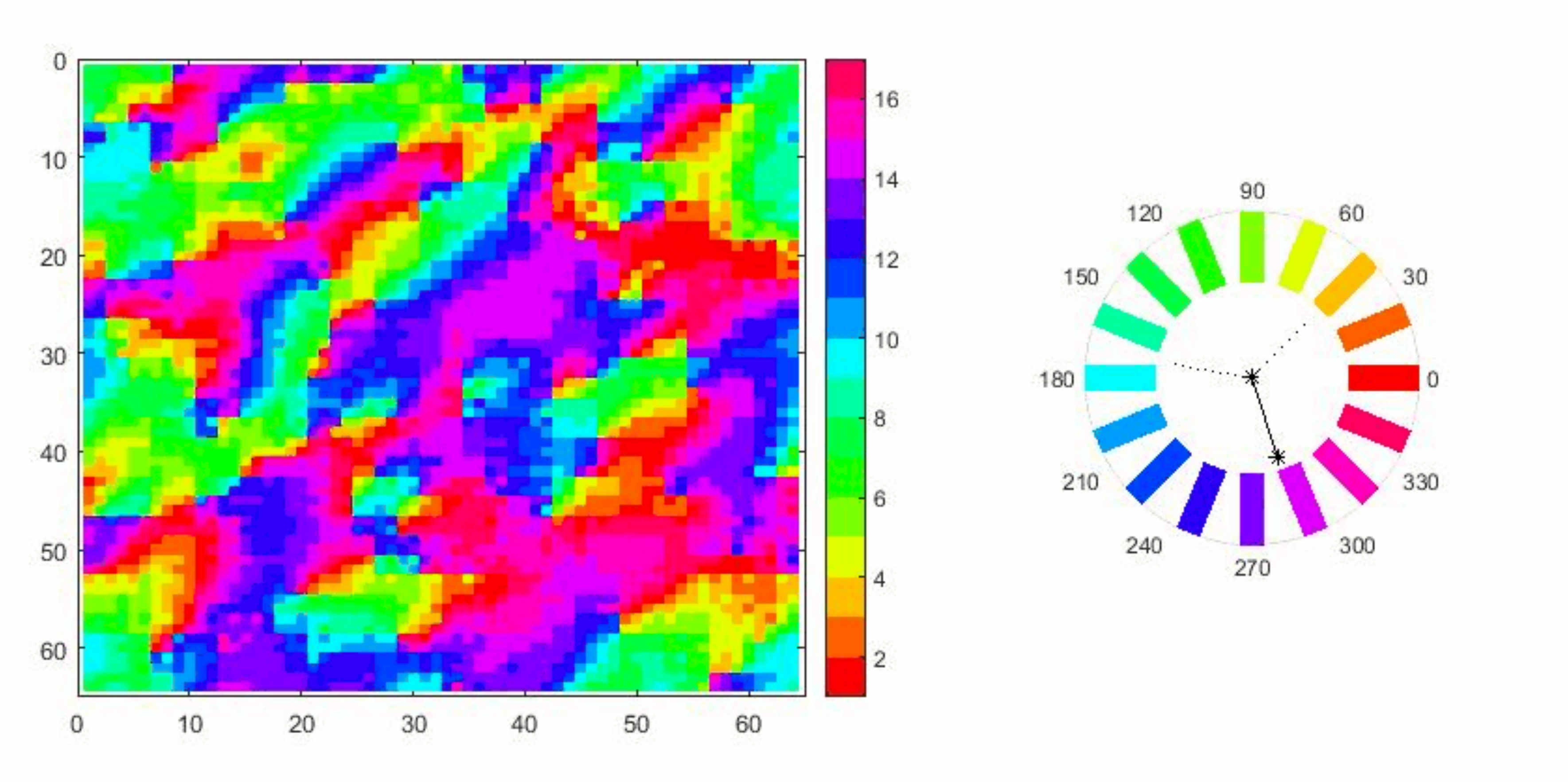
Modello Z_q

Stefano Boggio Tomasaz | Francesco Dilda | Lorenzo Volpi



Il modello

Il *modello* Z_q, conosciuto anche come *q - clock model*, è basato sui seguenti elementi:

- Un reticolo 2N x 2N di spin (o momenti) magnetici **μ**
- La possibilità di questi spin di assumere q stati possibili
- L'interazione tra spin primi vicini
- L'interazione tra spin e campo magnetico esterno B

Del sistema considerato è possibile definirne l'Hamiltoniana:

$$H = -J \sum_{i,j} \left(\cos\left(\theta_{i,j} - \theta_{i+1,j} \right) + \cos\left(\theta_{i,j} - \theta_{i,j+1} \right) \right) - B \sum_{i,j} \cos(\theta_i)$$

Le catene di Markov

- L'algoritmo con cui abbiamo implementato il nostro modello rientra nei processi Markoviani, che sono processi stocastici di evoluzione di un sistema in cui uno stato al tempo t+1 dipende solo dallo stato all'istante precedente t. Per questi processi è possibile definire una matrice le cui componenti M_{ij} sono definite dalla probabilità $p(i \to j)$ che il sistema passi dallo stato i al tempo t allo stato j al tempo t+1. Questa matrice presenta alcune importanti caratteristiche
- $\sum_i M_{ij} = 1 \qquad \forall j \qquad \text{e} \qquad M_{ij} \geq 0 \qquad \forall i,\ j$
- Da queste due è possibile dedurre che la trasposta di una generica matrice di questo tipo ammette il vettore con tutte componenti uguali come autovettore ad autovalore 1 e di conseguenza per le proprietà del determinante si ricava che è autovalore anche di M stessa. L'autovettore corrispondente all'autovalore 1 è l'unico candidato ad essere la distribuzione di equilibrio del processo di Markov in questione.

Metropolis

Le simulazioni sul *modello* Z_q sono state fatte attraverso *metodo Montecarlo*, implementato con *algoritmo Metropolis*.
Nello specifico l'algoritmo compie, ad ogni iterazione, i seguenti passi fondamentali:

- Determinato il reticolo di Spin si calcola l'energia attuale E_0
- Mossa di Metropolis in cui vengono ruotati casualmente gli spin
- Calcolo dell'energia dopo la mossa di Metropolis E_1
- Accettazione o rifiuto della variazione di energia

Bilancio dettagliato

La correttezza dell'algoritmo di Metropolis per la simulazione del nostro modello è garantita dal fatto che soddisfa la condizione di «bilancio dettagliato» per la distribuzione di Gibbs, condizione necessaria affinché questa sia la distribuzione di equilibrio per t che tende a infinito. Tale condizione è la seguente

$$\diamond \pi_i p(i \to j) = \pi_j p(j \to i) \qquad \forall i,\ j\ \textit{stati del sistema}$$

Dove π_i è l'i-esimo valore della distribuzione di probabilità associata allo stato i-esimo mentre $p(i \to j)$ rappresenta la probabilità di passare dallo stato i-esimo al j-esimo.

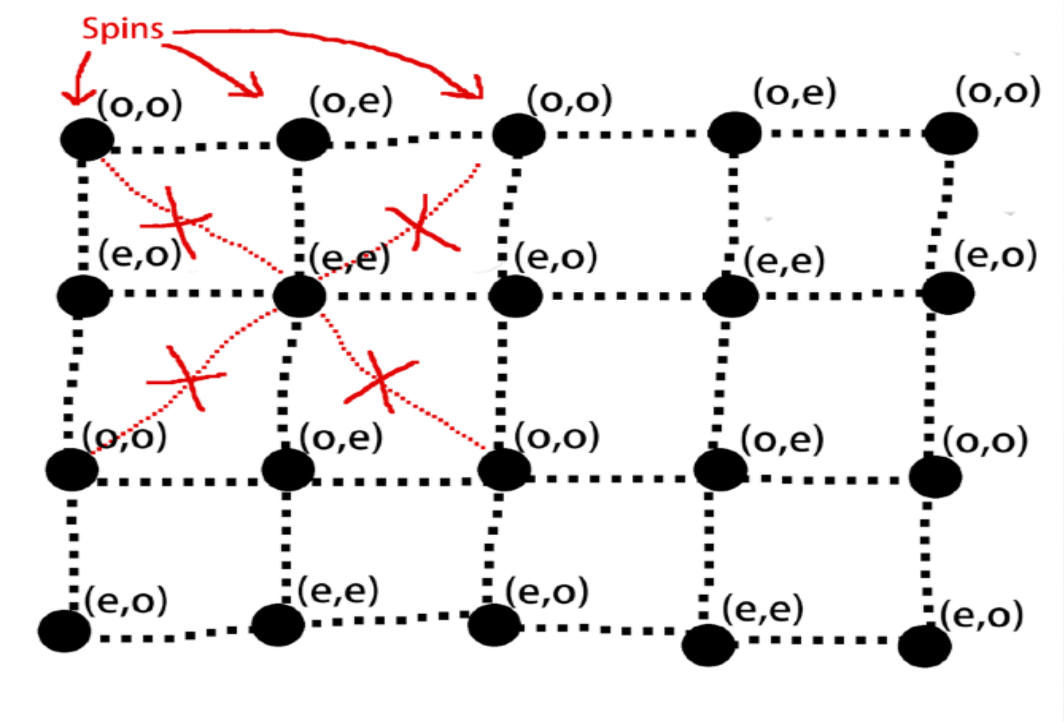
Perciò nel caso della distribuzione di Gibbs e dell'algoritmo di Metropolis avremo $\pi_i = e^{-\beta H_i}$ e $p(i \to j) = \frac{1}{2}\min\{e^{-\beta \Delta H},\ 1\}$ nel caso in cui i e j siano due stati primi vicini, mentre sarà banalmente 0 negli altri casi poiché tali mosse non sono mai realizzate da questo algoritmo.

Bilancio dettagliato

- Descrivendo perciò il passaggio di uno spin da uno stato i a uno stato j, notiamo che la condizione è soddisfatta certamente per i e j non primi vicini; nel caso in cui sia un passaggio proponibile dall'algoritmo allora
- $e^{-\beta H_i}\min\{e^{-\beta(H_j-H_i)},\ 1\} = e^{-\beta H_j}\min\{e^{-\beta(H_i-H_j)},\ 1\}$
- che considerando il caso $H_j > H_i$ diventa
- $e^{-\beta H_i}e^{-\beta(H_j-H_i)} = e^{-\beta H_j}$
- e quindi
- $e^{-\beta H_j} = e^{-\beta H_j}$

Bilancio dettagliato

- La dimostrazione che abbiamo dato della validità del bilancio dettagliato è legata al fatto che nel nostro algoritmo abbiamo suddiviso il reticolo in quattro sottoreticoli e ad ogni sweep veniva effettuato un procedimento di proposta-accettazione separatamente. Per cui nel calcolo abbiamo potuto considerare disaccoppiato ogni spin e valutarne singolarmente la validità dell'uguaglianza precedente



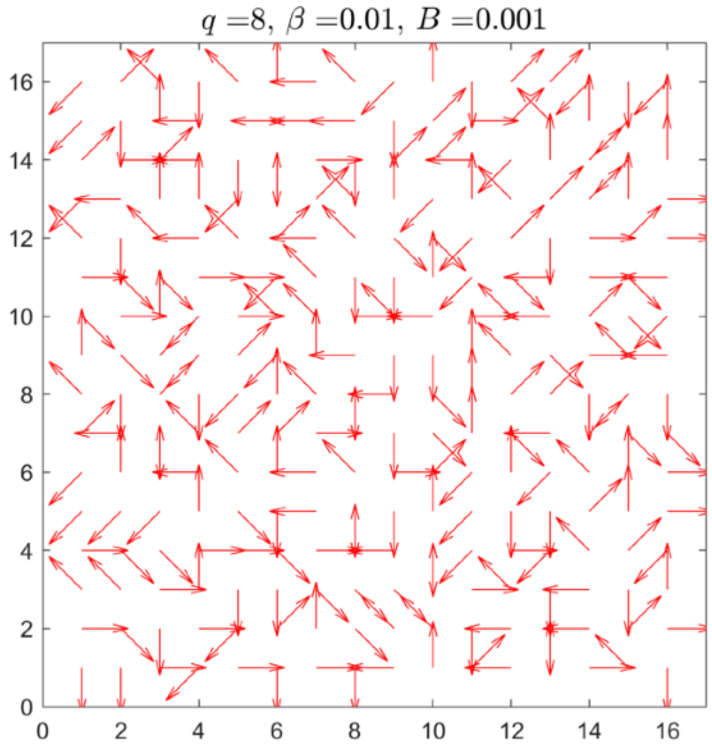
Transizioni di fase

Il modello è caratterizzato da transizioni di fase a dei particolari valori di β, che denominiamo β - critici (β_c).

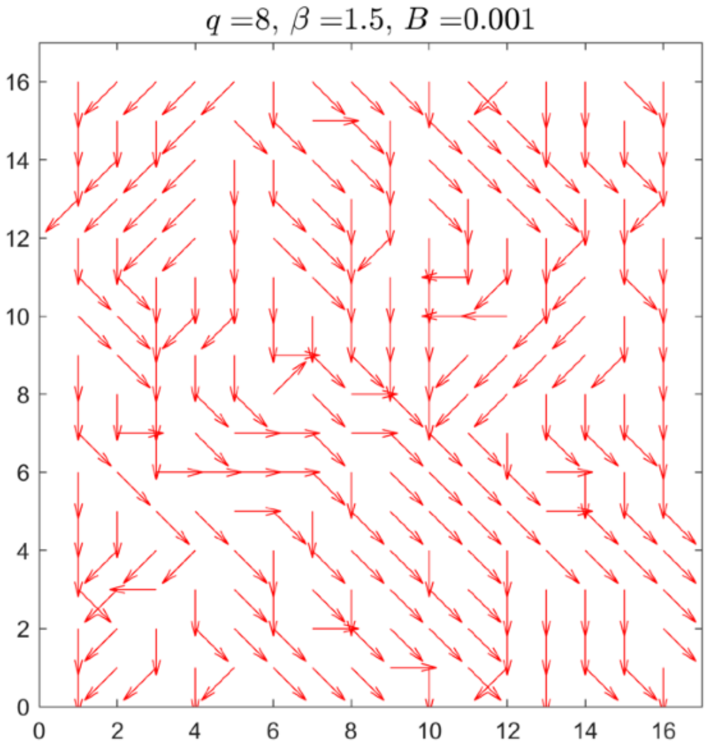
I valori di β_c dipendono dal valore di q, non solo nel loro valore, ma anche nel numero. Per q sufficientemente elevati si osserveranno 2 transizioni di fase al variare di β :

- La prima fase è chiamata fase disordinata (o paramagnetica)
- La seconda fase è una fase intermedia (o BKT)
- La terza è invece chiamata fase ferromagnetica (FM)

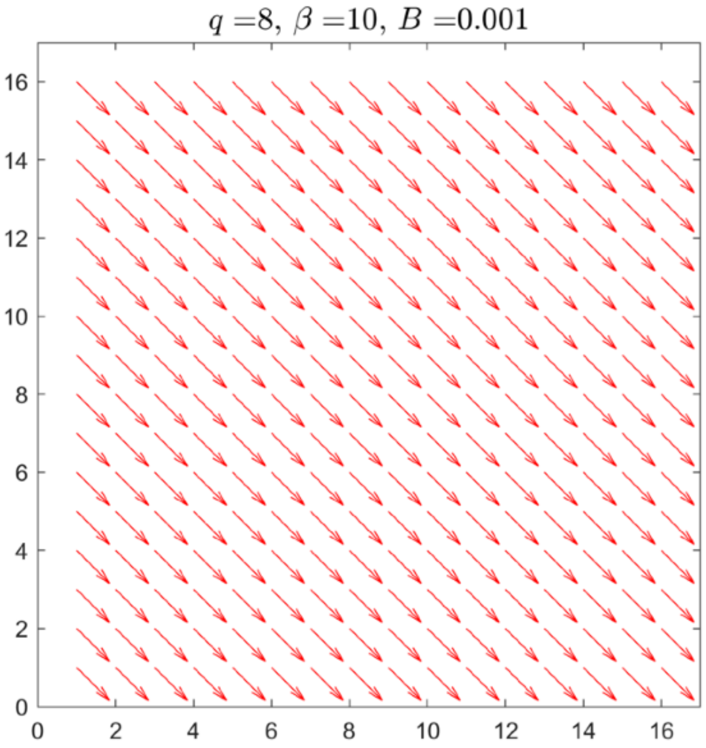
Per q sufficientemente bassi si ha transizione da fase Paramagnetica a FM



Fase paramagnetica



Fase intermedia



Fase ferromagnetica

Studio delle Osservabili

Forti delle considerazioni fatte, sono state studiate le seguenti osservabili:

- Autocorrelazione
- Energia media
- Calore specifico
- Magnetizzazione media
- Suscettività magnetica
- Entropia

Autocorrelazione

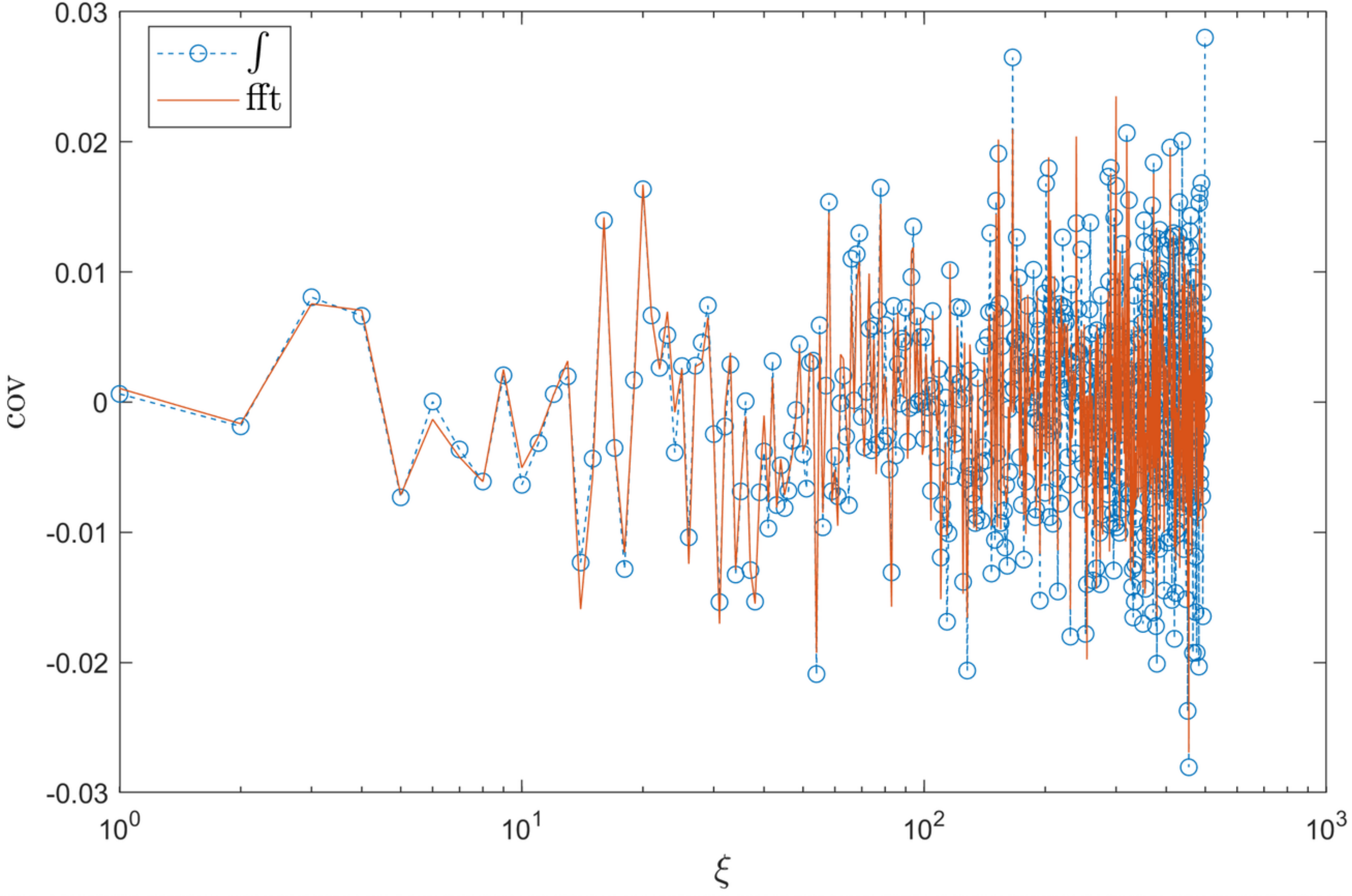
L' autocorrelazione è un indice che permette di stabilire quanto i dati presi in considerazione sono dipendenti tra loro.

Lo studio della correlazione tra i vari dati è stato fatto al fine di trovare un valore di τ (chiamato anche *skip*) tale per cui la dipendenza tra dati si azzera.

Si dimostra che la covarianza tra il dato di un'osservabile f_t al tempo t e quello al tempo $t + \tau$ è:

$$cov\left(f_t\,,\,f_{t+\tau}\right) = \frac{\mathscr{F}^{-1}\left|\mathscr{F}\left\{f_t\right\}\right|^2}{T} - \left\langle f_t \right\rangle^2$$

Calcolato sulla funzione rand( )



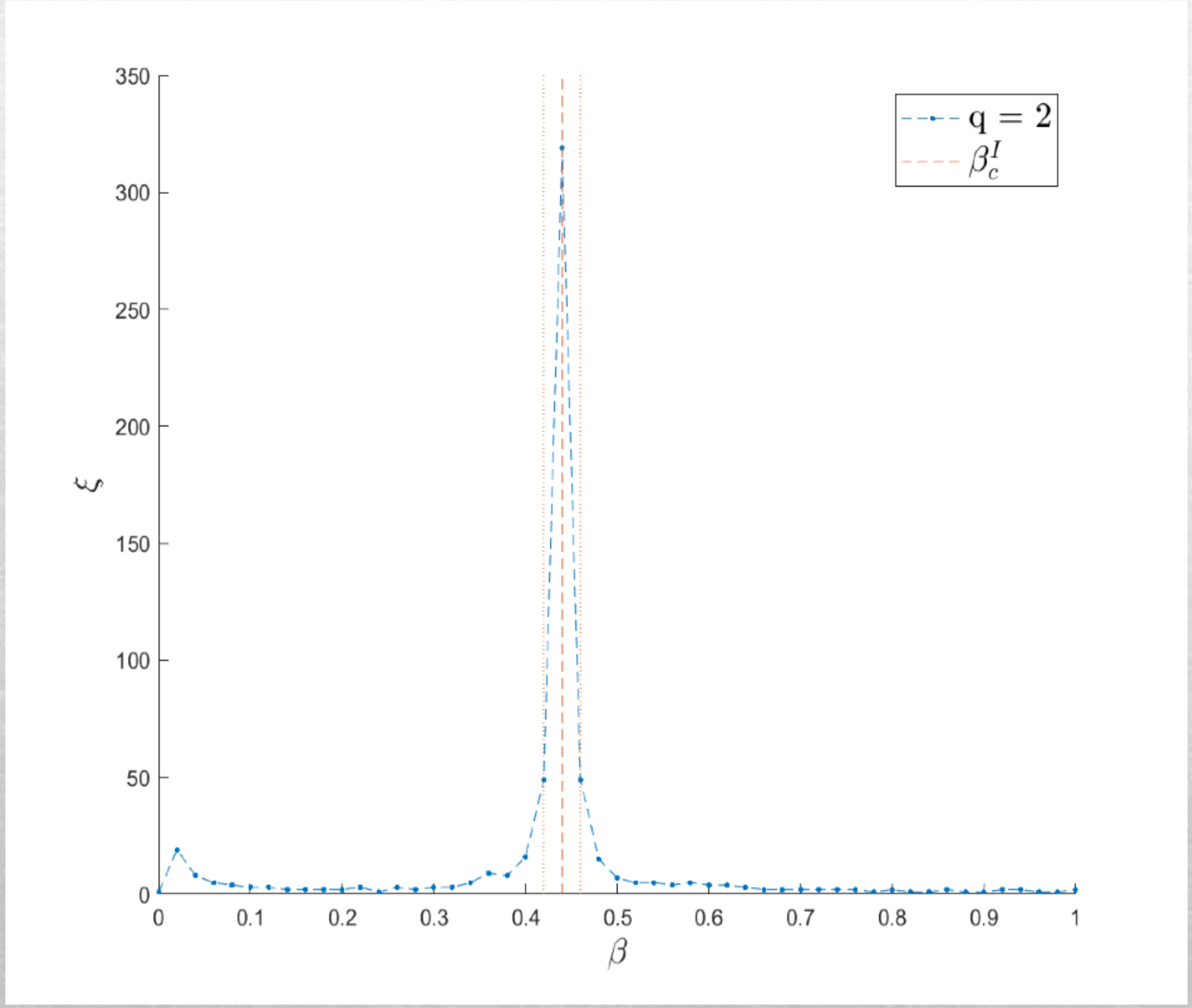
Autocorrelazione

Si dimostra, inoltre, che la covarianza così calcolata va a 0 esponenzialmente. Per questo motivo è possibile normalizzarla per trovare una funzione esponenziale di cui fare un fit dei parametri:

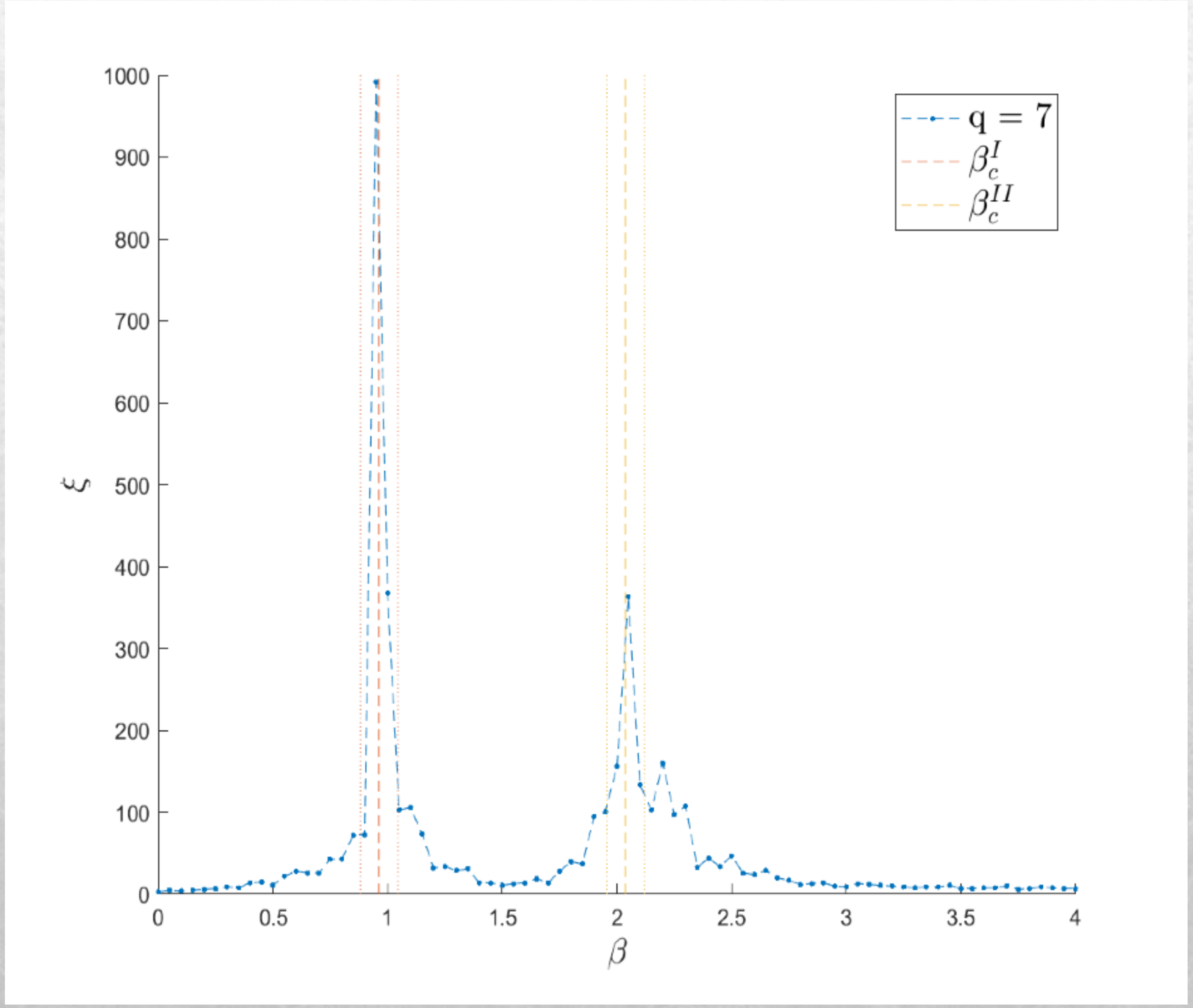
$$\eta = \frac{\mathrm{cov}(f_t, f_{t+\tau})}{\mathrm{cov}\left(f_t, f_{t+0}\right)} = e^{-\frac{\tau}{\xi}}$$

Dove ξ è la lunghezza di autocorrelazione.

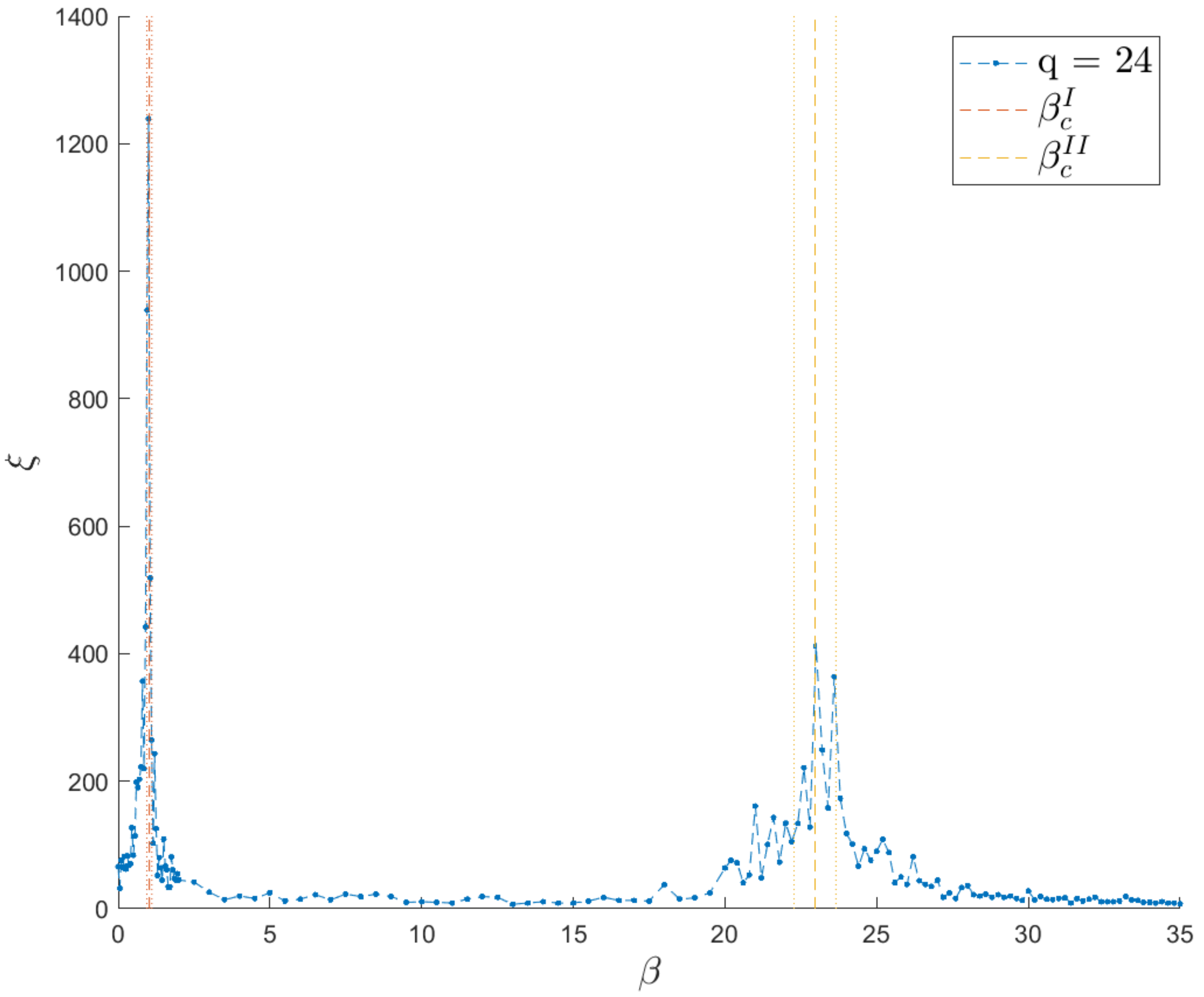
Ai valori critici di β si osserva un *critical slowing down*, ovvero l'aumento di ξ.



q = 2
β_c^I
ξ
β
0
50
100
150
200
250
300
350
0.1
0.2
0.3
0.4
0.5
0.6
0.7
0.8
0.9
1



q = 7
β_c^I
β_c^{II}
ξ
β
0
100
200
300
400
500
600
700
800
900
1000
0.5
1
1.5
2
2.5
3
3.5
4



1400
1200
1000
800
600
400
200
0
ξ
0
5
10
15
20
25
30
35
β
q = 24
β_c^I
β_c^{II}

Energia media

Sostituendo l'energia istantanea del sistema all'Hamiltoniana, fissati B e β, ed effettuando *k* – misure si ottiene un'energia media:

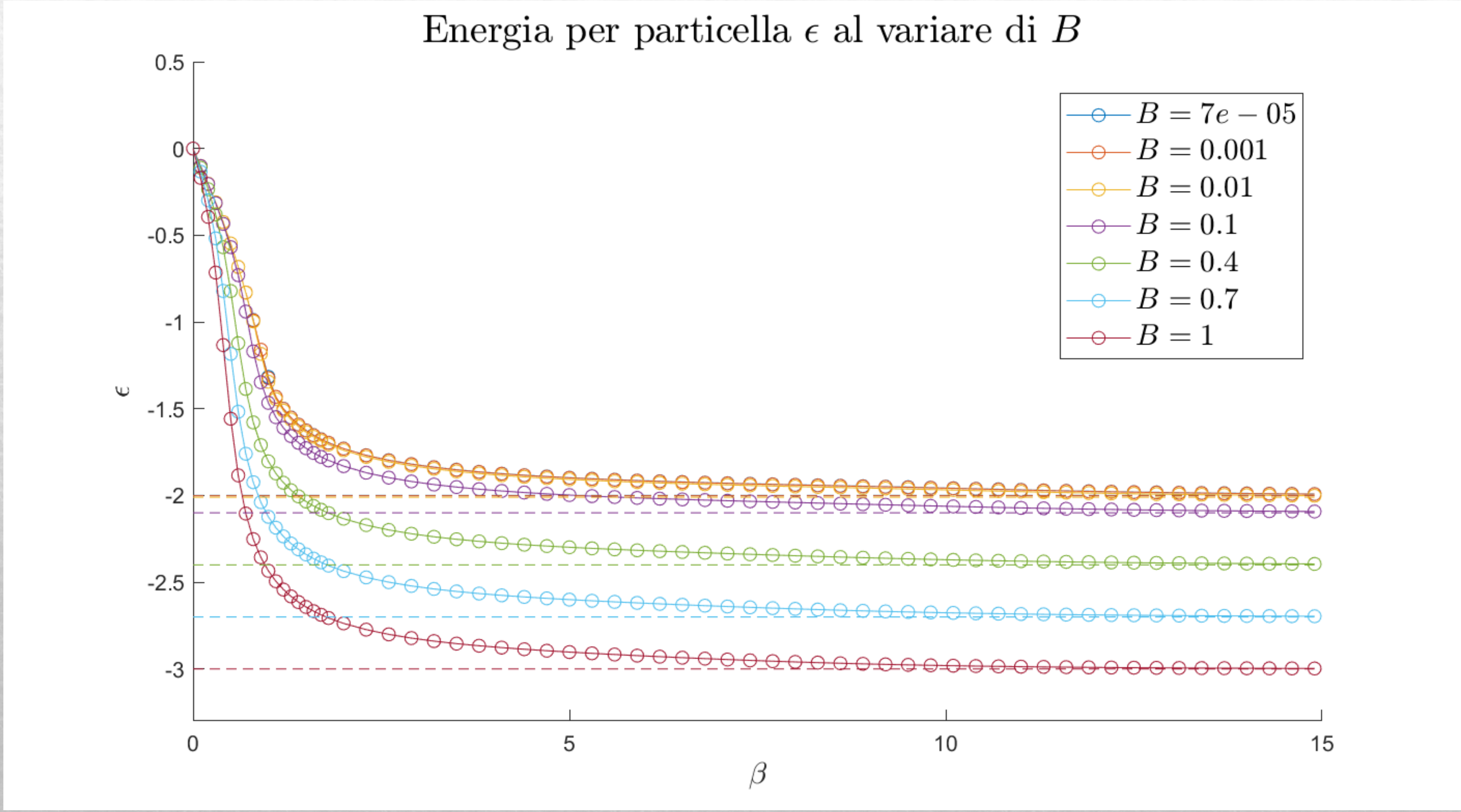
$$U = \langle E \rangle = \frac{1}{k} \sum_{t=1}^{k} E(t)$$

Siccome U è una grandezza estensiva, si definisce un' *energia indipendente dalle dimensioni del reticolo ε* dividendo U per N:

$$\varepsilon := \frac{U}{4N^2}$$

Così facendo ci aspettiamo due andamenti asintotici:

- $\beta \to 0 \Rightarrow \varepsilon \longrightarrow 0$
- $\beta \to \infty \Rightarrow \varepsilon \to -2J\mu^2 - B\mu$


Energia per particella ϵ al variare di B
$B = 7e - 05$
$B = 0.001$
$B = 0.01$
$B = 0.1$
$B = 0.4$
$B = 0.7$
$B = 1$
ϵ
β
0.5
0
-0.5
-1
-1.5
-2
-2.5
-3
0
5
10
15

Calore specifico

Calcolata l'energia media estensiva (U) e per particella (ε), si definisce la *capacità termica C* :

$$C = \left[\frac{\partial U}{\partial T}\right]_V = -\beta^2 \left[\frac{\partial U}{\partial \beta}\right]_V$$

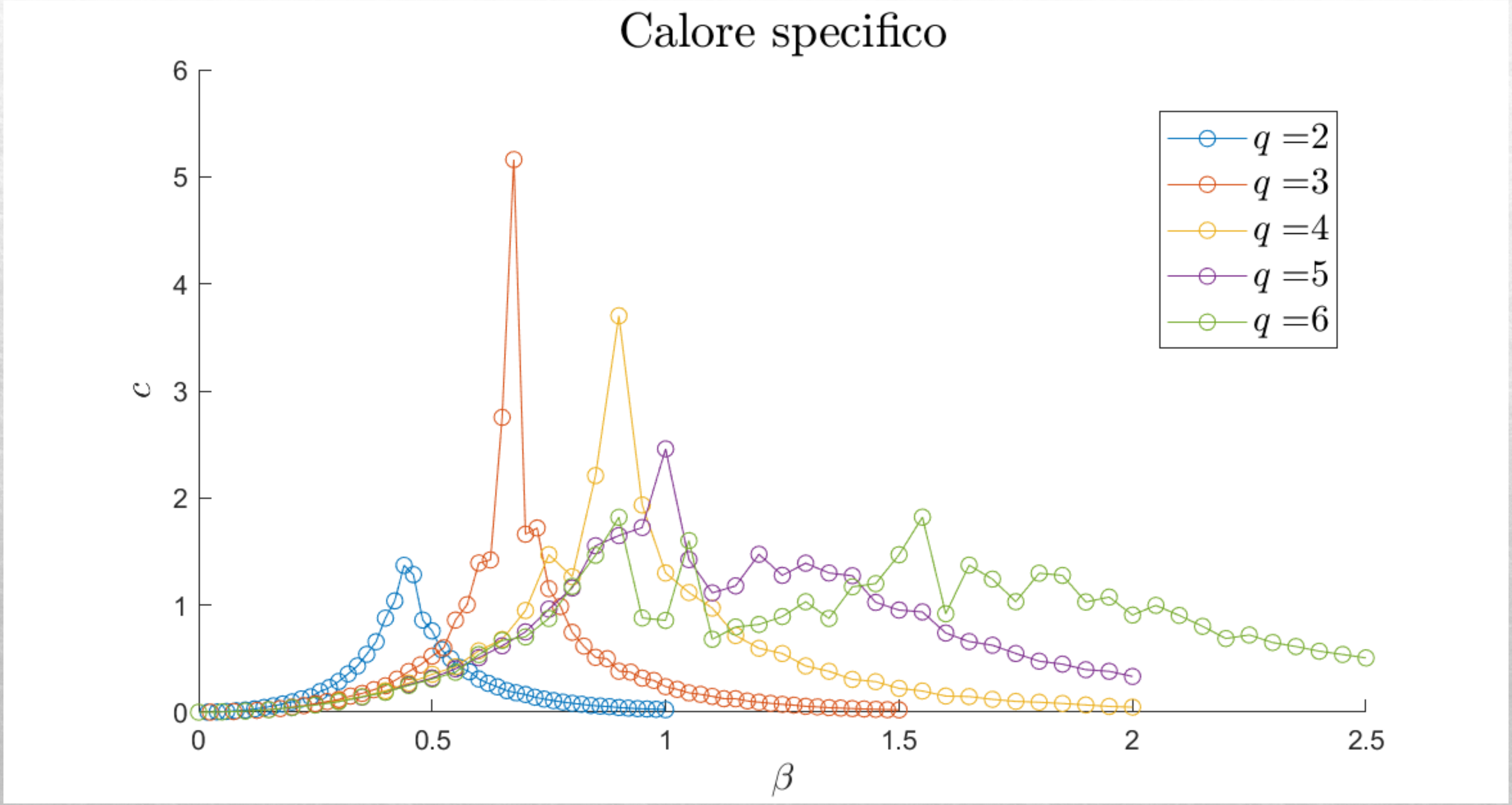
Per il *calore specifico c,* definito come $c := C/4N^2$, si dimostra che:

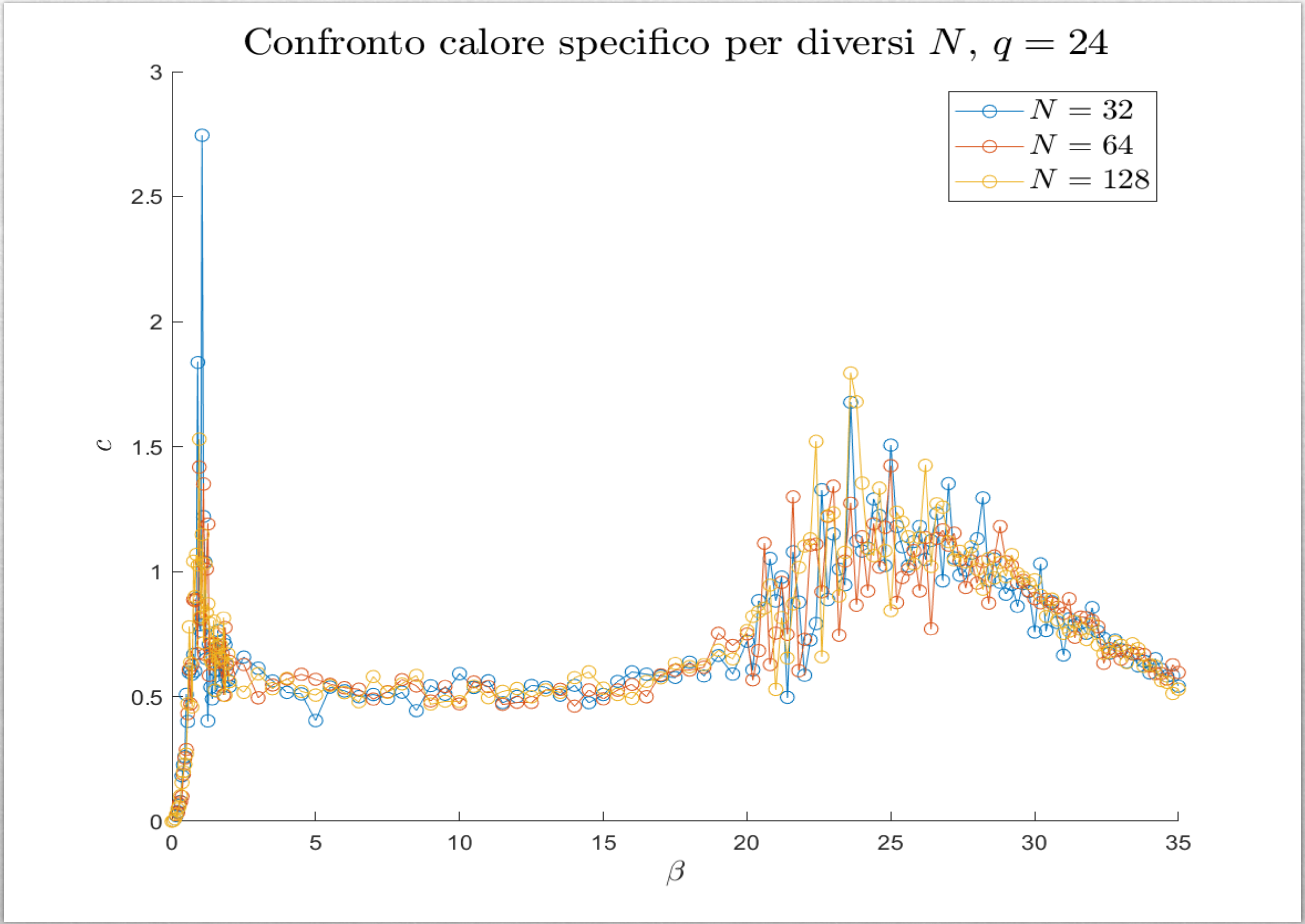
$$C = \beta^2 var(E) \implies c = 4N^2\beta^2 var(\varepsilon)$$

con cui è possibile stimare numericamente il calore specifico attraverso i dati raccolti e in particolare i suoi massimi.

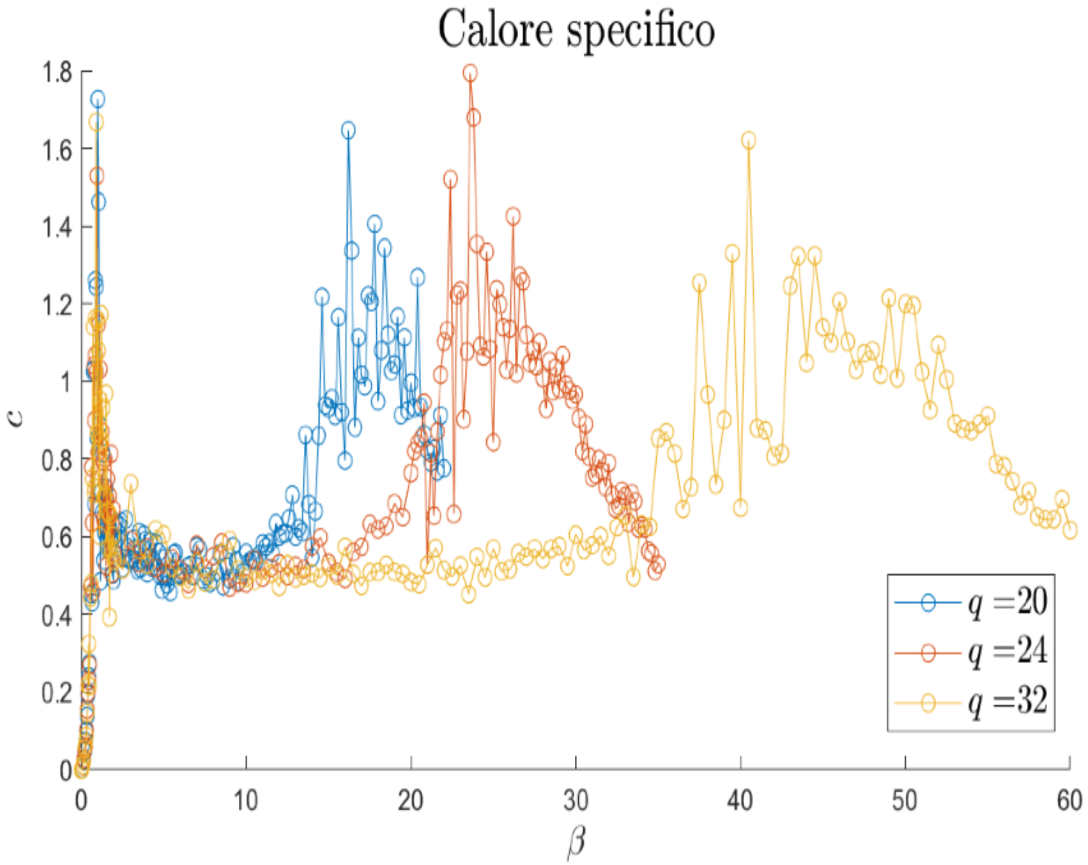
Anche per c ci aspettiamo particolari comportamenti in alcuni limiti:

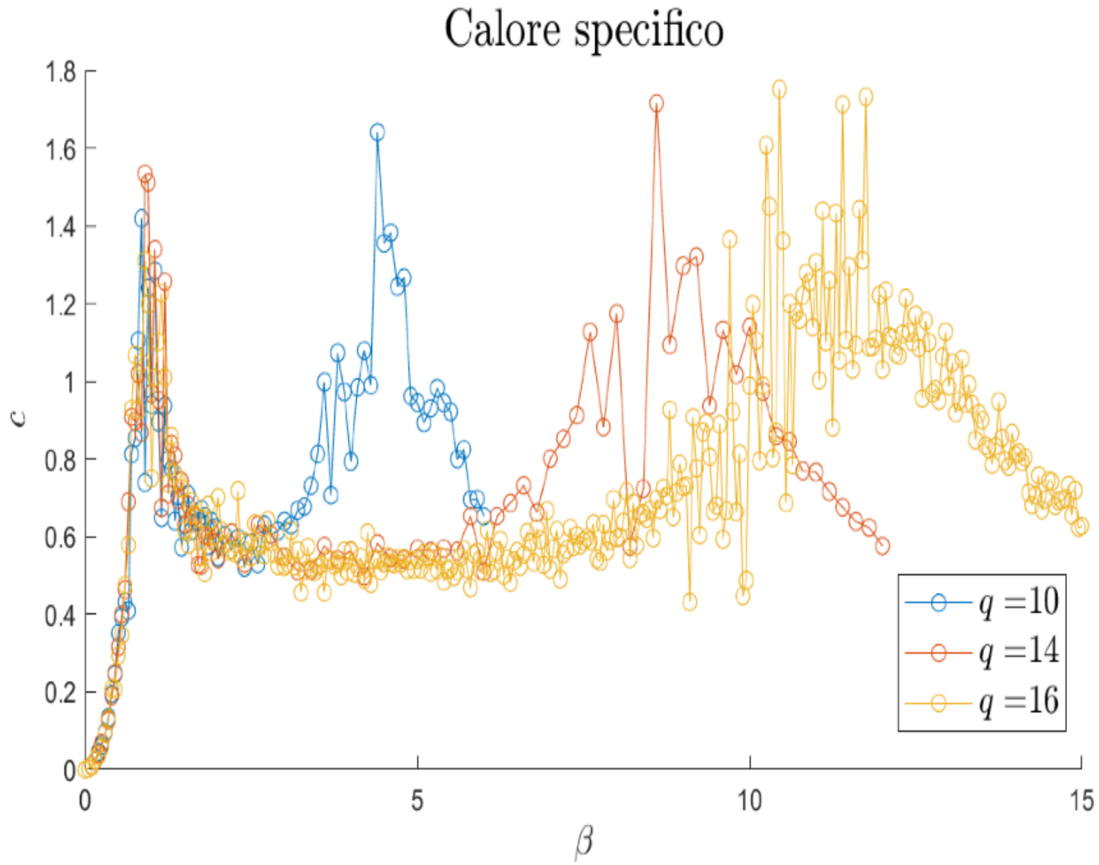
- $\beta \to 0\, , \beta \to \infty \implies c \to 0$
- $\beta \to \beta_c \implies c \gg 0$


Calore specifico
c
β
0
0.5
1
1.5
2
2.5
1
2
3
4
5
6
q =2
q =3
q =4
q =5
q =6



Confronto calore specifico per diversi N, $q = 24$
$N = 32$
$N = 64$
$N = 128$
c
β
0
0.5
1
1.5
2
2.5
3
0
5
10
15
20
25
30
35


Calore specifico
1.8
1.6
1.4
1.2
1
0.8
0.6
0.4
0.2
0
c
0
10
20
30
40
50
60
β
$q = 20$
$q = 24$
$q = 32$


Calore specifico
1.8
1.6
1.4
1.2
1
0.8
0.6
0.4
0.2
0
c
0
5
10
15
β
$q = 10$
$q = 14$
$q = 16$

Magnetizzazione media

Per via della simmetria Z_q, conviene considerare la media circolare dei dati di magnetizzazione, considerando la magnetizzazione all'istante t :

$$M(t) = \left(\sum_{i,j} \cos\left(\theta_{i,j}\right), \sum_{i,j} sen(\theta_{i,j}) \right) = (M_x(t), M_y(t))$$

E mediando su k - misure, si definiscono :

$$M = \frac{1}{k} \sum_{t}^{k} \left\| M(t) \right\| \qquad \textbf{e}\boldsymbol{t} \qquad m = \frac{M}{4N^2}$$

Dove m è una *magnetizzazione indipendente dalle dimensioni del reticolo* e M è la magnetizzazione media

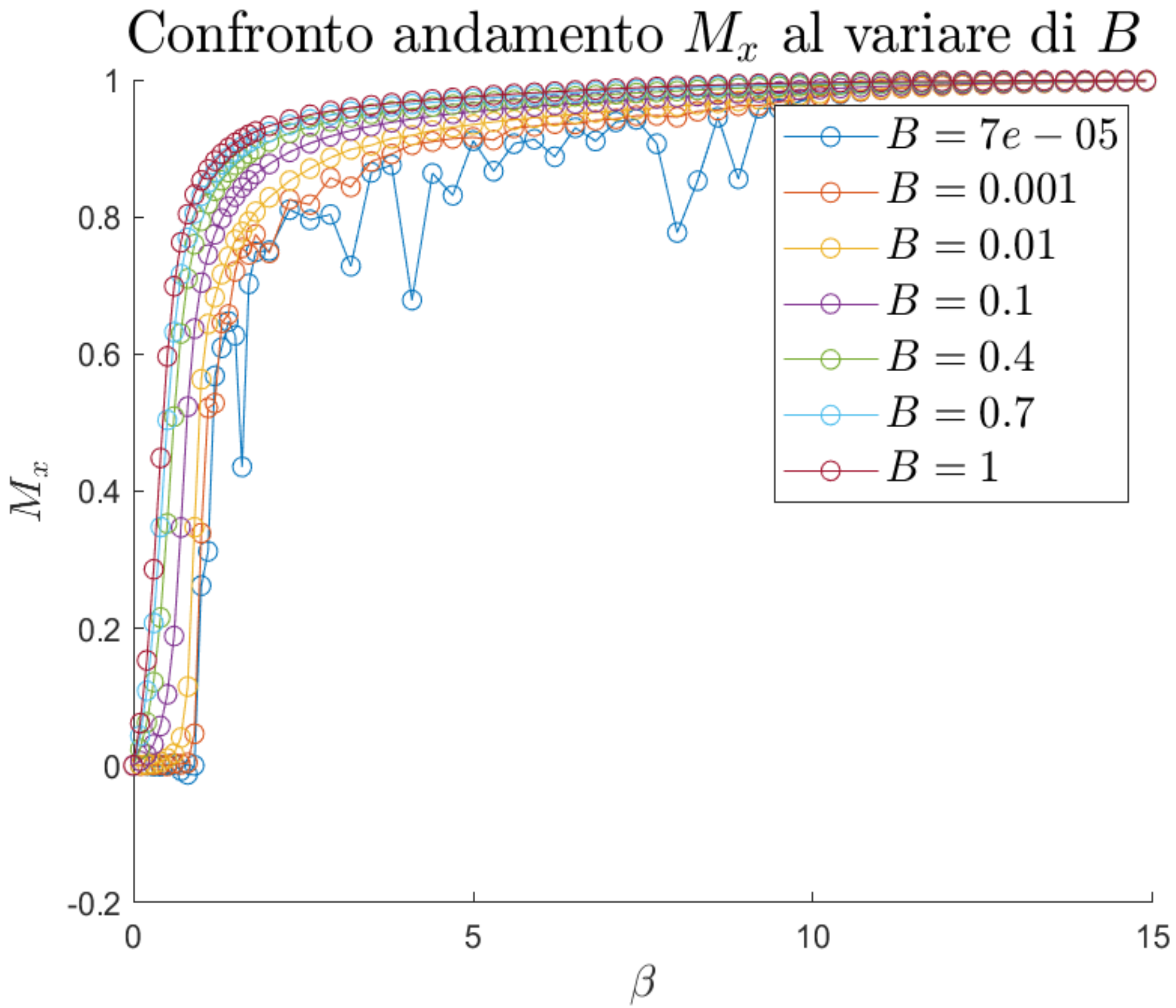
Magnetizzazione media

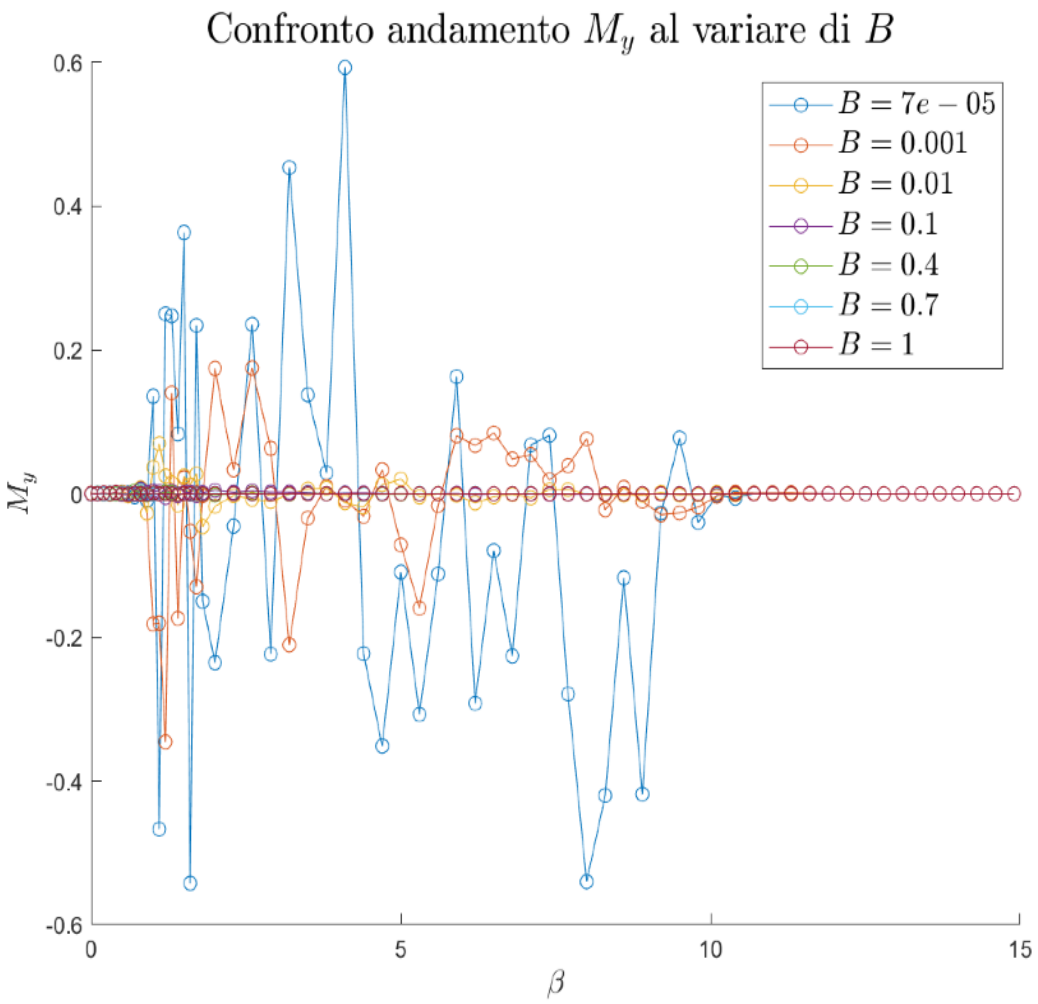
Nella nostra sperimentazione, è sempre stato fissato un campo magnetico esterno B lungo un asse preferenziale che indichiamo con *x*.

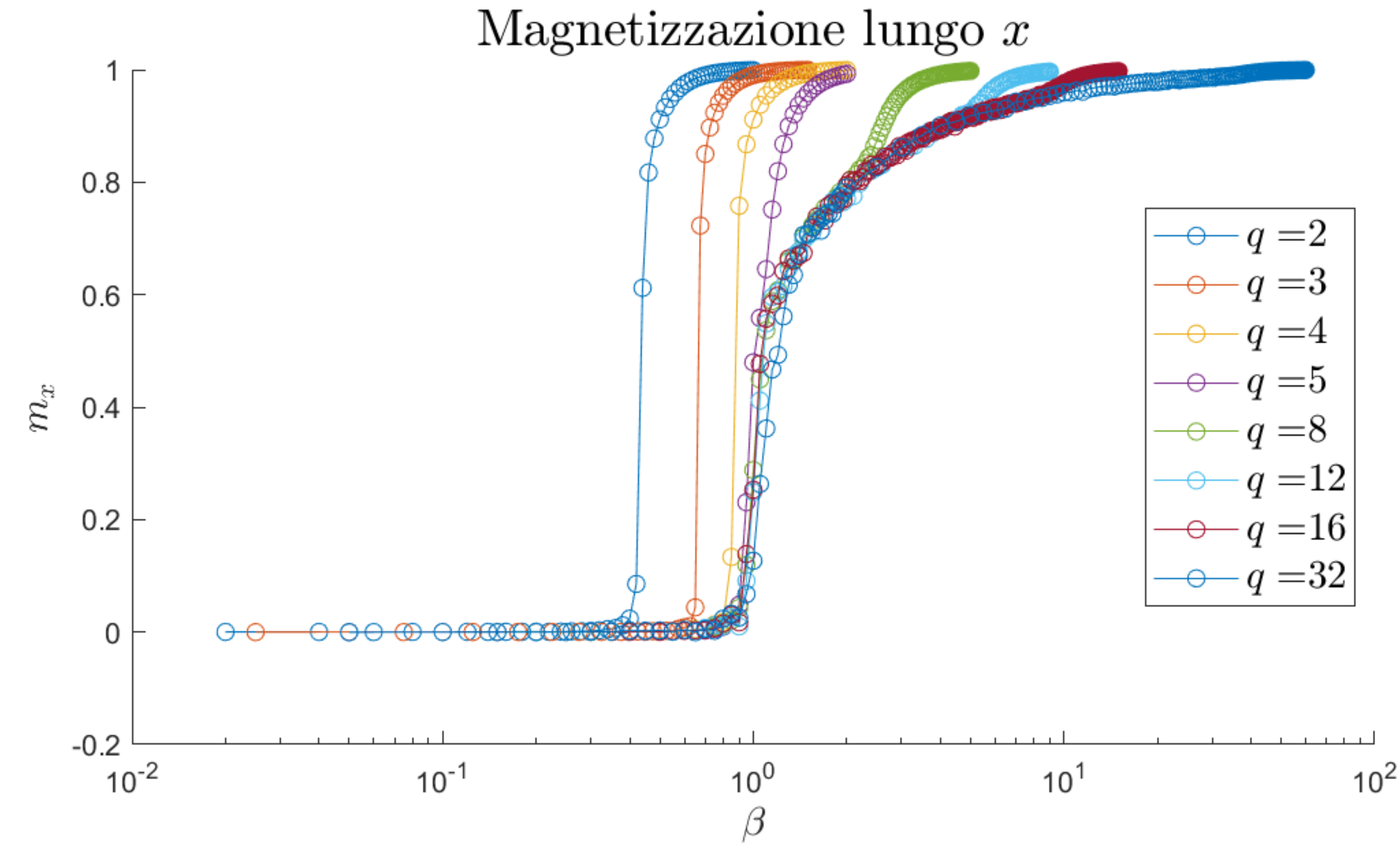
Per questo motivo, lo studio di magnetizzazione media fatto non è stato su $\left\| M(t) \right\|$, bensì sulle componenti, tra loro ortogonali:

$$M_x = \frac{1}{k}\sum_{t}^{k} M_x(t) \qquad \boldsymbol{et} \qquad M_y = \frac{1}{k}\sum_{t}^{k} M_y(t)$$

Da cui, analogamente ad M, si definiscono m_x ed m_y


Confronto andamento M_x al variare di B
M_x
β
$B = 7e-05$
$B = 0.001$
$B = 0.01$
$B = 0.1$
$B = 0.4$
$B = 0.7$
$B = 1$


Confronto andamento M_y al variare di B
M_y
β
$B = 7e-05$
$B = 0.001$
$B = 0.01$
$B = 0.1$
$B = 0.4$
$B = 0.7$
$B = 1$


Magnetizzazione lungo x
m_x
β
1
0.8
0.6
0.4
0.2
0
-0.2
10^{-2}
10^{-1}
10^{0}
10^{1}
10^{2}
$q=2$
$q=3$
$q=4$
$q=5$
$q=8$
$q=12$
$q=16$
$q=32$

Suscettività magnetica

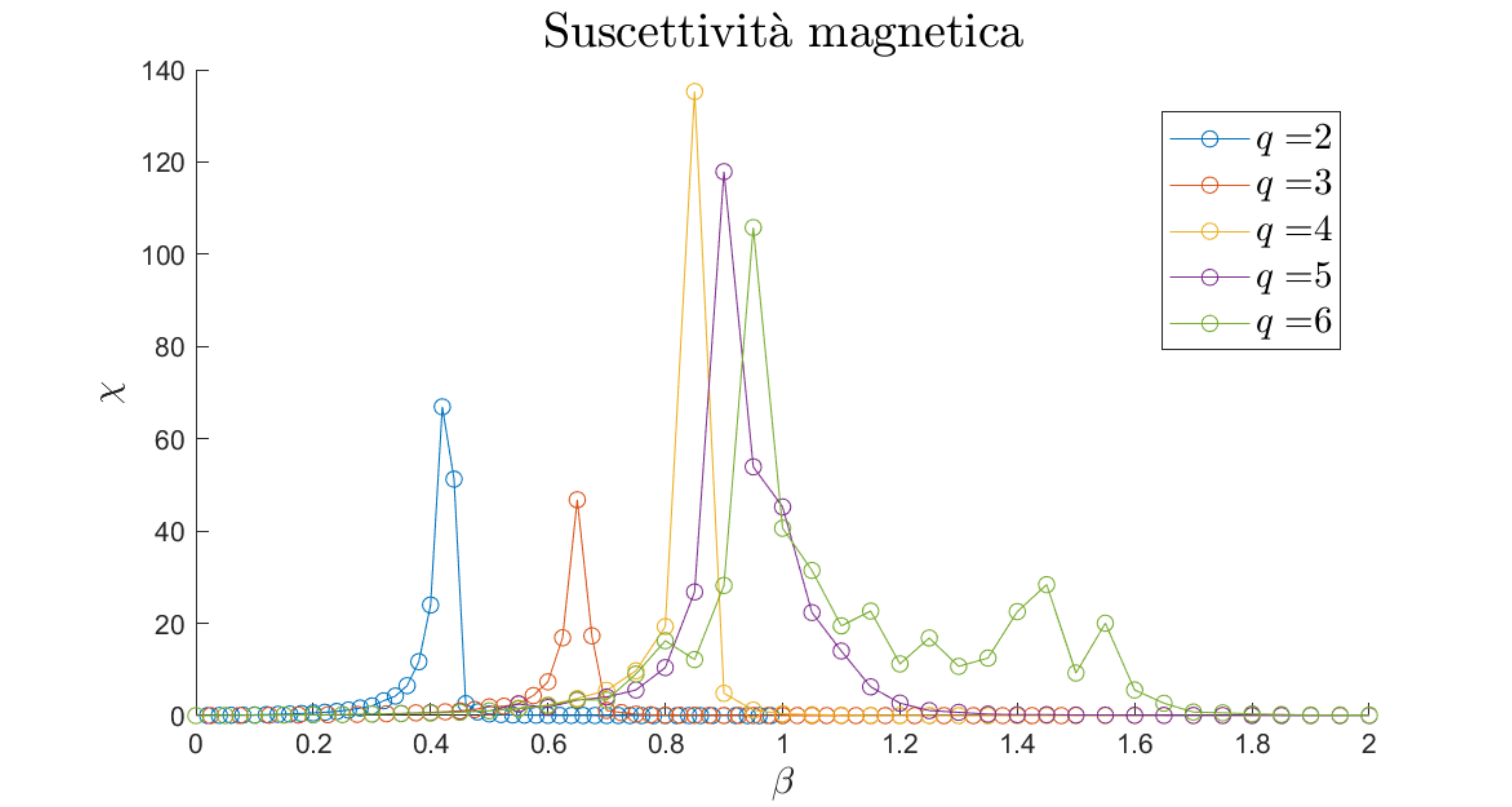
Dalle misure di magnetizzazione media, è possibile calcolare la suscettività magnetica χ :

$$\chi = \lim_{B\to 0} \frac{\partial m}{\partial B}$$

Da considerazioni di tipo statistico si trova che :

$$\chi = 4N^2\beta \lim_{B\to 0} var(m_x)$$

Dove m_x è la media della componente della magnetizzazione sull'asse del campo B esterno.



Suscettività magnetica
140
120
100
80
60
40
20
0
χ
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1
1.2
1.4
1.6
1.8
2
β
$q = 2$
$q = 3$
$q = 4$
$q = 5$
$q = 6$

Entropia

Grazie alla stima del calore specifico, è immediato stimare un valore dell'entropia per particella, s :

$$\Delta s = s(T) - s(0) = \int_0^T \frac{c(T)}{T} dT = \int_{1/T}^{\infty} \frac{c(\beta)}{\beta} d\beta$$

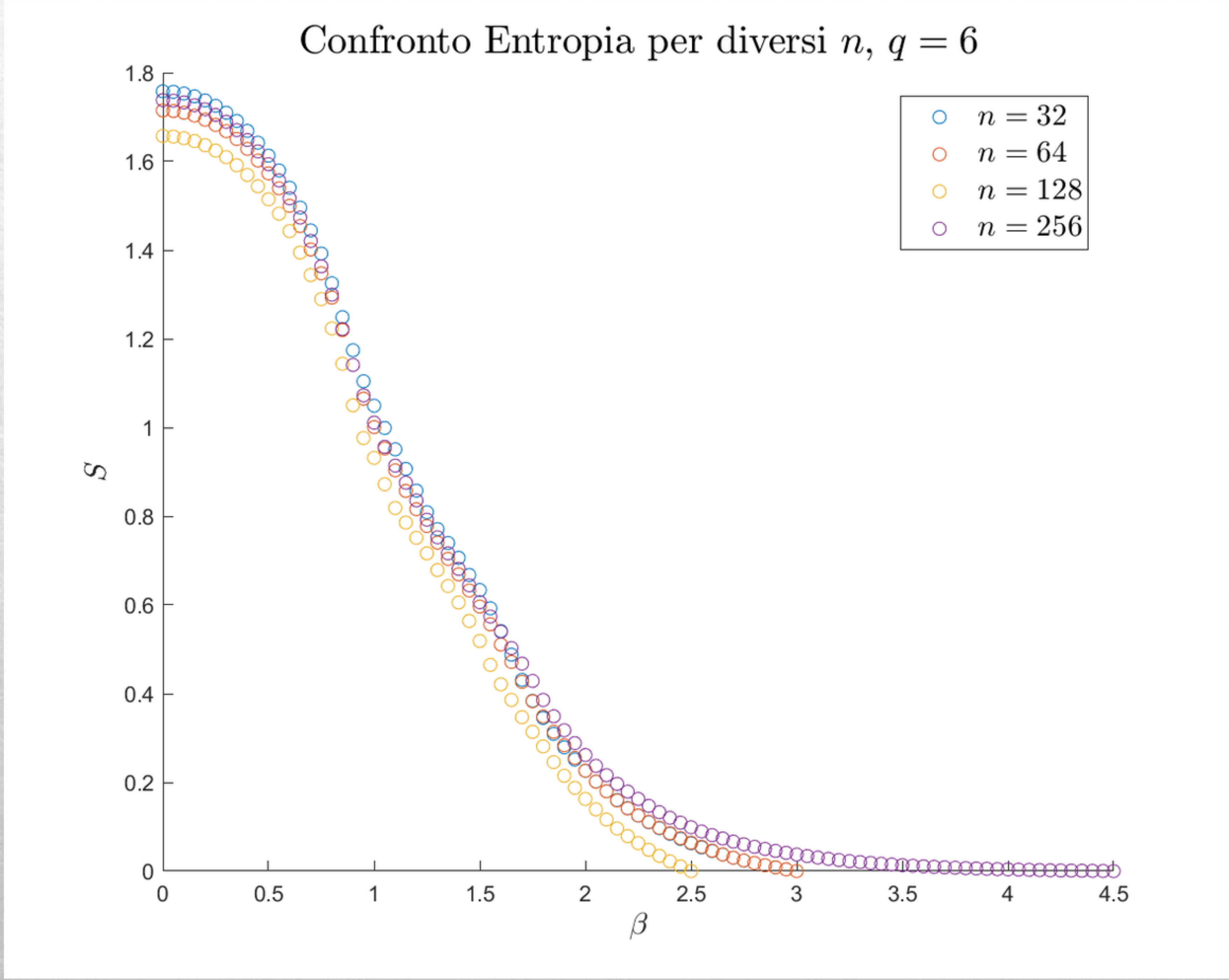
Si osserva che $s(0) = 0$ se il reticolo è soggetto a un campo B.

Si trova che, in generale, vale la seguente relazione, che tiene conto della degenerazione q del livello energetico fondamentale :

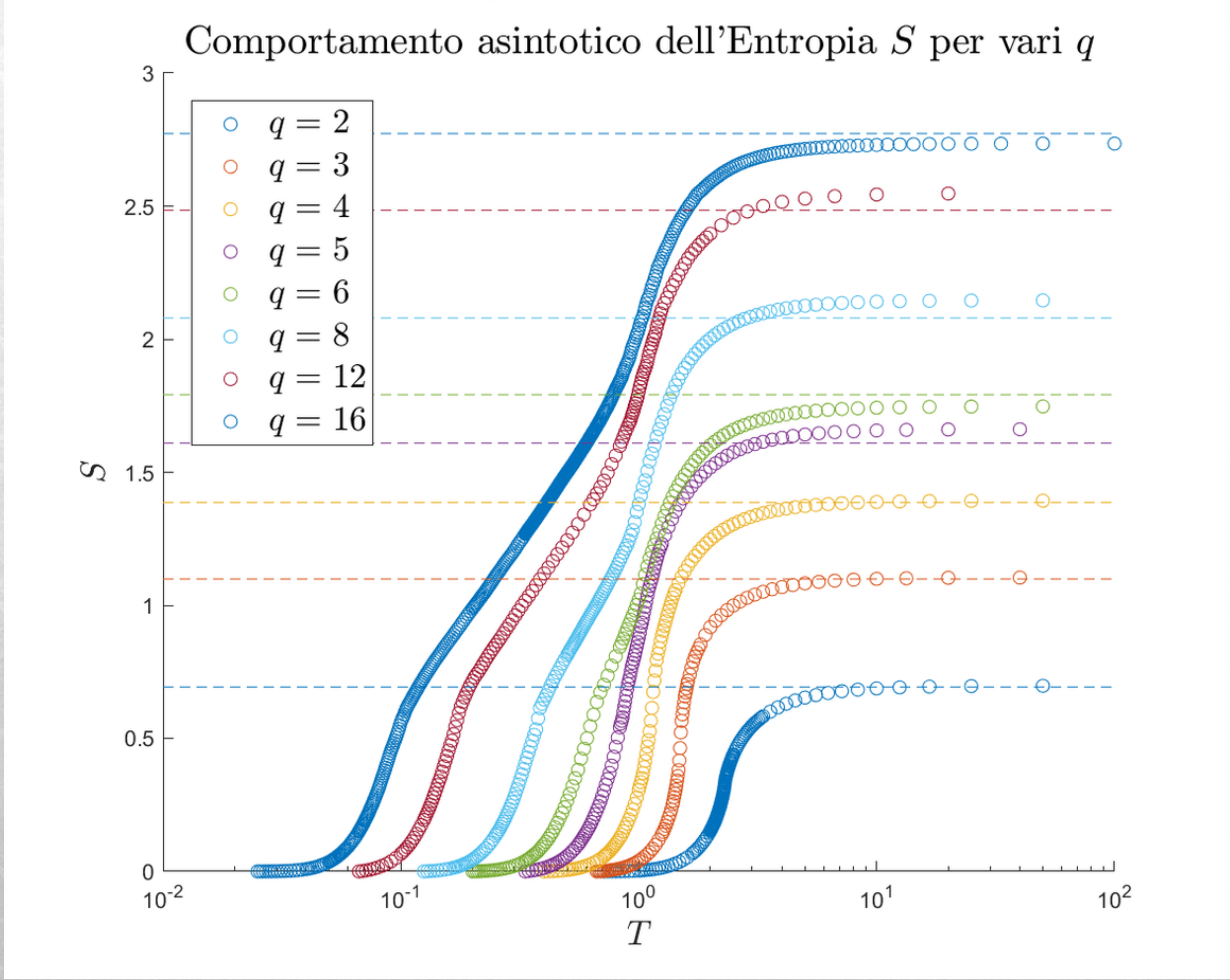
$$s(T) = \delta_{B,0} \frac{\log(q)}{4N^2} + \int_{1/T}^{\infty} \frac{c(\beta)}{\beta} d\beta$$

Inoltre si individuano anche per l'entropia comportamenti asintotici a 0 e ∞:

- $\beta \to 0 \implies s \to \log(q)$
- $\beta \to \infty \implies s \to 0$



Confronto Entropia per diversi n, $q = 6$
S
β
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1
1.2
1.4
1.6
1.8
0
0.5
1
1.5
2
2.5
3
3.5
4
4.5
$n = 32$
$n = 64$
$n = 128$
$n = 256$



Comportamento asintotico dell'Entropia S per vari q
$q = 2$
$q = 3$
$q = 4$
$q = 5$
$q = 6$
$q = 8$
$q = 12$
$q = 16$
S
T
0
0.5
1
1.5
2
2.5
3
10^{-2}
10^{-1}
10^{0}
10^{1}
10^{2}

Temperature critiche

Come precedentemente detto, si possono individuare valori critici di temperatura, e quindi anche di β.

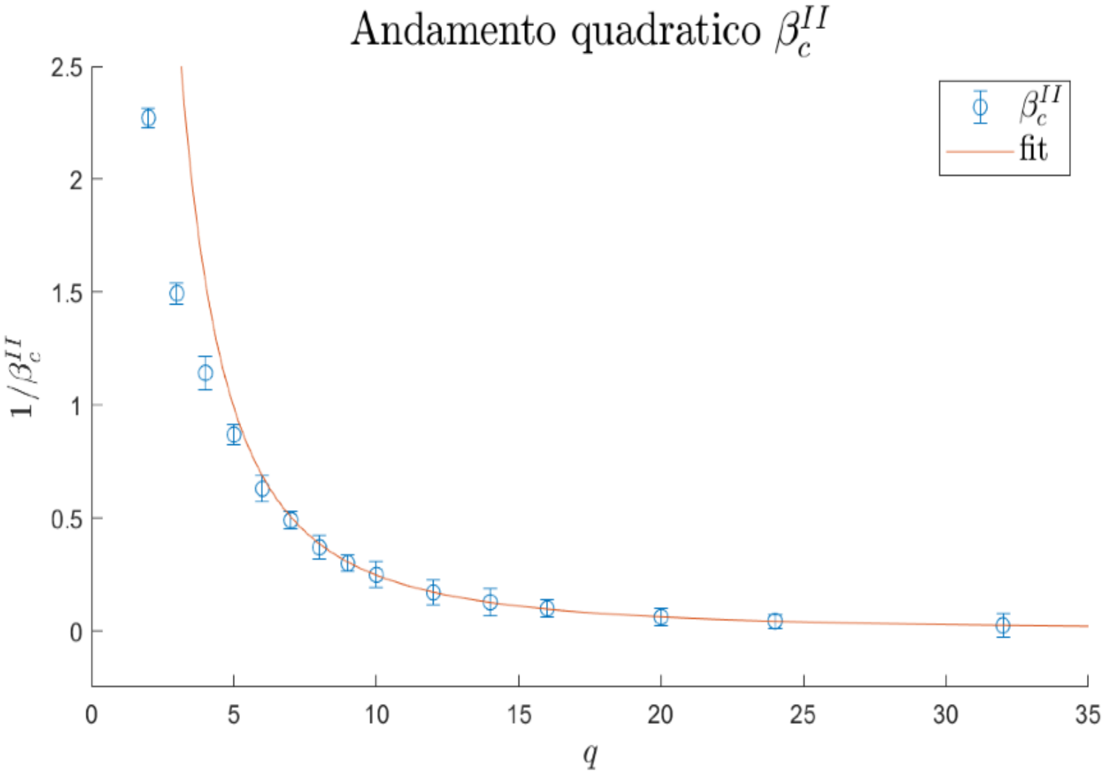
Per ogni grafico è stato, quindi, possibile raccogliere valori critici di β : β_c^I e β_c^{II}, da cui sono stati ricavati valori medi per osservare il loro andamento su grafico.

Si è osservato che, per $q \geq 5$, si osservano due valori critici; al contrario, per $q < 5$, se ne osserva uno unico, costante rispetto a q che definiamo essere β_c^I.

Si è osservato, inoltre, un andamento di β_c^{II} al variare di q determinato dalla relazione :

$$\beta_c^{II} = \frac{\gamma}{1 - \cos\left(\frac{2\pi}{q}\right)} \approx \frac{\gamma}{2\pi^2} q^2$$

Con $\gamma \approx 0.88$



Andamento quadratico β_c^{II}
$1/\beta_c^{II}$
q
β_c^{II}
fit

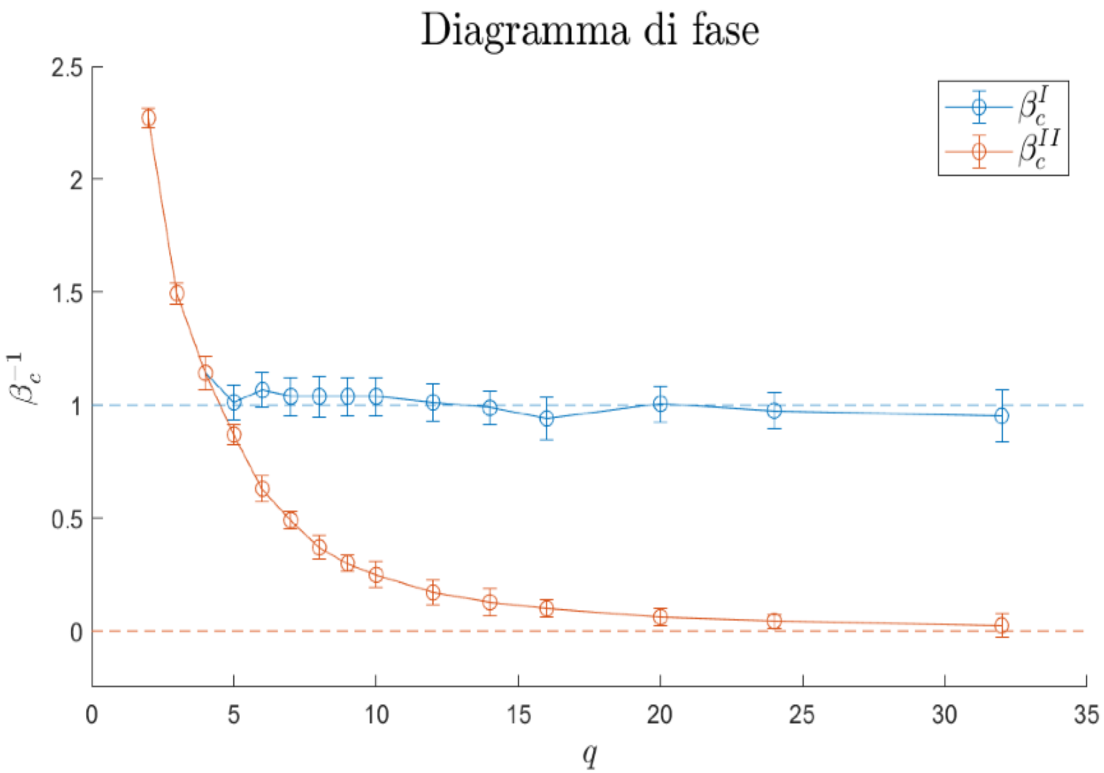
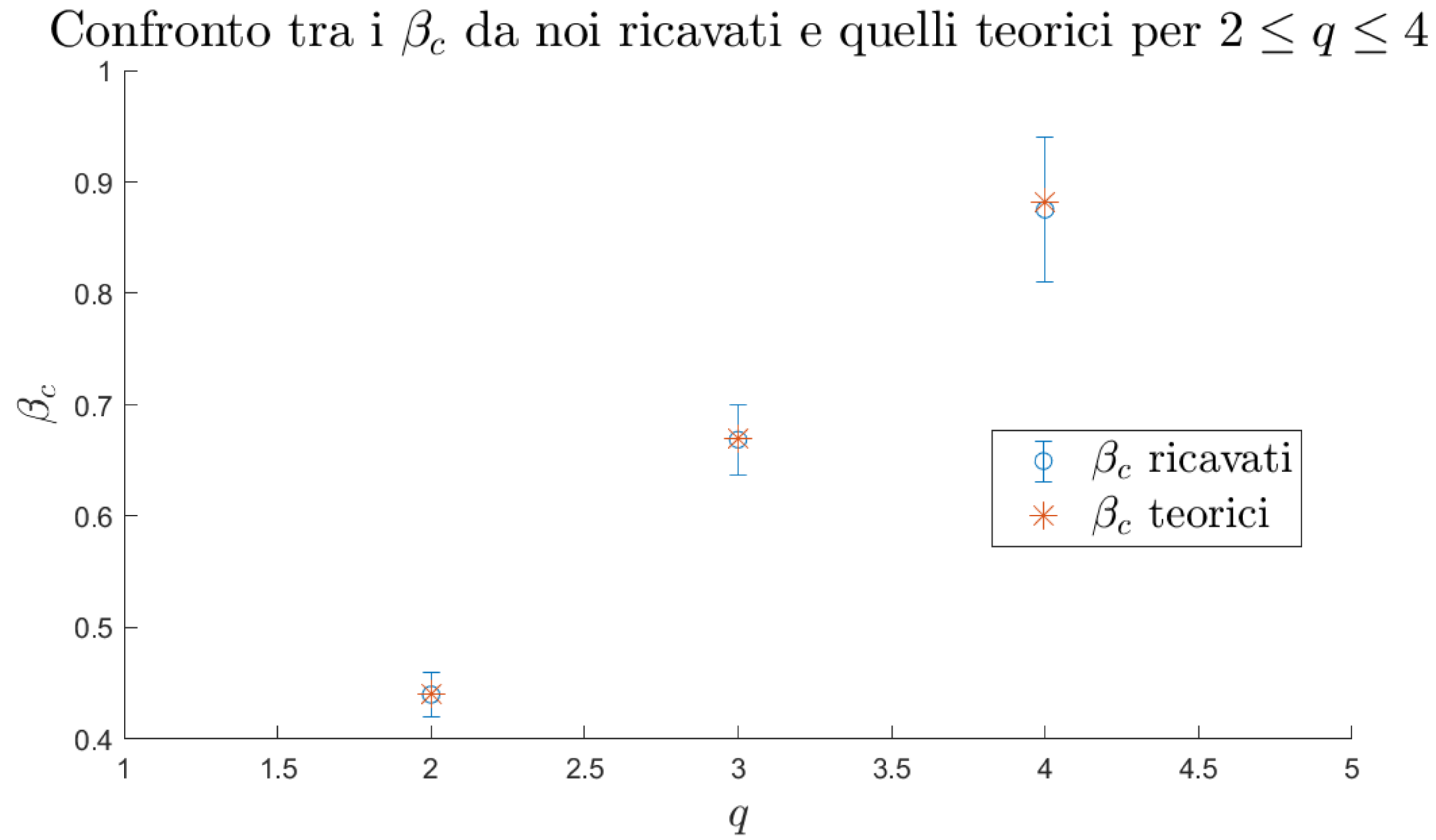


Diagramma di fase
β_c^{-1}
q
β_c^{I}
β_c^{II}

q	2	3	4
β_c^{teo}	$\frac{\log 1+\sqrt{2}}{2} \approx 0.4407$	$2\frac{\log 1+\sqrt{3}}{3} \approx 0.6700$	$\log 1 + \sqrt{2} \approx 0.8814$
β_c^{exp}	0.44 ± 0.02	0.67 ± 0.03	0.88 ± 0.06

È possibile ricavare analiticamente i valori di β_c^I e confrontarli con quelli trovati attraverso le nostre simulazioni.



Confronto tra i β_c da noi ricavati e quelli teorici per $2 \leq q \leq 4$
1
0.9
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
β_c
1
1.5
2
2.5
3
3.5
4
4.5
5
q
β_c ricavati
β_c teorici

Bibliografia

- [1] F. C. Alcaraz e Laurence Jacobs. «Z(N) generalisation of the Baxter-Wu model». In: Journal of Physics A15 (1982)
- [2] Oscar A. Negrete et al. «Entropy and Mutability for the q-State Clock Model in Small Systems». In: Entropy 20.12 (2018). issn: 1099-4300. DOI: `10.3390/e20120933`. URL: `https://www.mdpi.com/1099-4300/20/12/933`
- [3] E. Onofri. «Metodi probabilistici della fisica». 2021. URL: `https://www.eoinfnpr.it`