

Il modello $Z(q)$

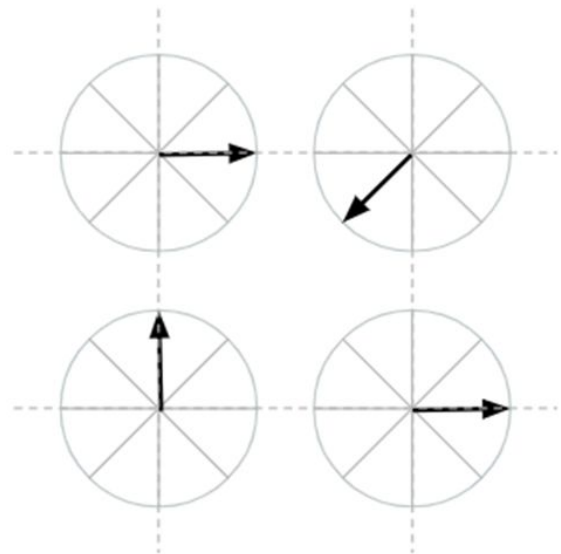
Alex Tarana
Carlotta Viappiani

Il modello $Z(q)$

Il sistema studiato, cioè un reticolo 2D in cui in ogni sito è collocato uno “spin” con q gradi di libertà dati dalle possibili orientazioni che può assumere, è caratterizzato dall’Hamiltoniana (in presenza di campo magnetico):

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) - B \sum_i \cos(\theta_i)$$

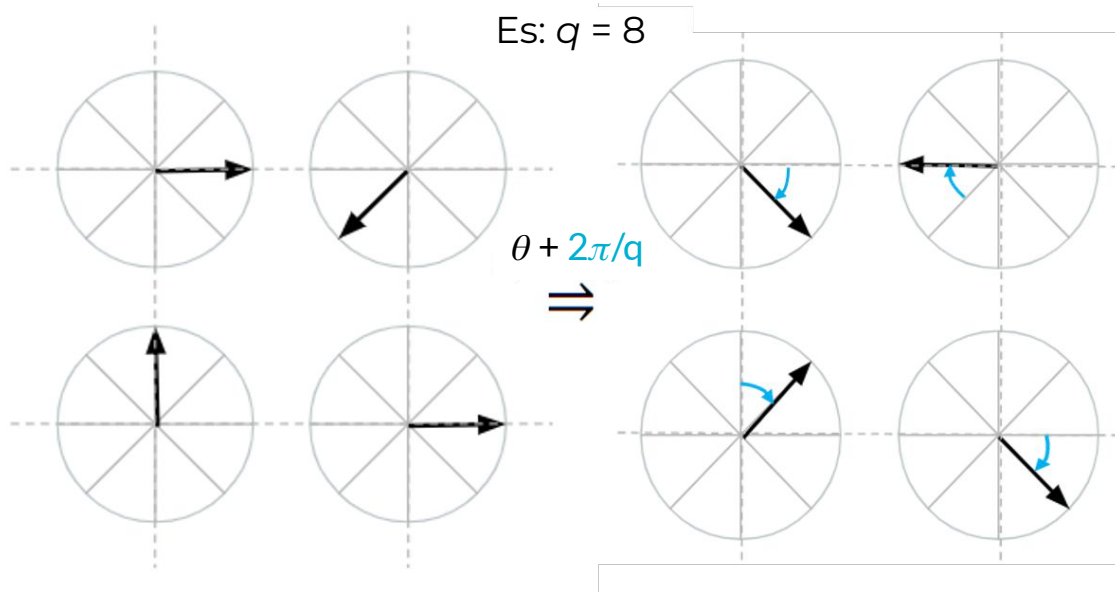
dove J e B sono costanti positive e rappresentano rispettivamente la costante di accoppiamento tra gli spin del reticolo e il modulo del campo magnetico esterno. Questa scelta dei segni è dettata dal fatto che si vuole che sia privilegiata la configurazione di spin allineati, che risulterebbe quella di minima energia.



Il modello $Z(q)$

Un sistema di questo tipo è caratterizzato dalla simmetria $Z(q)$, cioè dall'invarianza rispetto a rotazioni globali di $2\pi/q$ -esimi, da cui il nome del modello.

Le due configurazioni riportate di seguito hanno infatti la stessa energia (per $B=0$).



Anticipazioni

Sistemi di questo tipo (che simulano approssimativamente dei ferromagneti), al variare della temperatura T e di un eventuale campo magnetico B esterno, sono soggetti a transizioni di fase, cioè singularità relative ad osservabili termodinamiche.

L'analisi che segue ha proprio l'obiettivo di osservare e studiare queste transizioni di fase per il modello.

In particolare, la loro presenza può essere evidenziata studiando l'andamento al variare della temperatura di grandezze quali l'energia o la **magnetizzazione**, definita come:

$$M = \sum_j \cos \theta_j + i \sum_j \sin \theta_j$$

Monte Carlo / Algoritmo di Metropolis

Il sistema è stato studiato tramite simulazioni Monte Carlo, un metodo numerico basato su processi probabilistici utile per risolvere problemi di complessa risoluzione per via analitica.

In particolare, ci siamo basati sull'algoritmo di Metropolis. Questo prevede di proporre una "mossa" per ogni sito; nel nostro caso tale mossa consiste in una rotazione di un angolo $2\pi/q$ (in senso orario o antiorario), che sarà accettata con probabilità:

$$\mathbb{P} = \min(1, e^{-\beta\delta H}) \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

altrimenti rifiutata.

In questo modo, se si compie un numero sufficiente di "sweep" (cioè di proposte), ciascun sito ha la possibilità di visitare ogni configurazione.

Codice a β fissato

Si applica il metodo di Metropolis a un reticolo quadrato $2N \times 2N$ con condizioni al contorno periodiche, e se ne studia l'evoluzione "temporale". Lo spin in ogni sito del reticolo è da immaginare come una "freccia" con coordinate nel piano complesso:

$$X = \cos(j*2*\pi/q) ;$$

$$Y = \sin(j*2*\pi/q) ;$$

con $j=\{0,\dots,q-1\}$.

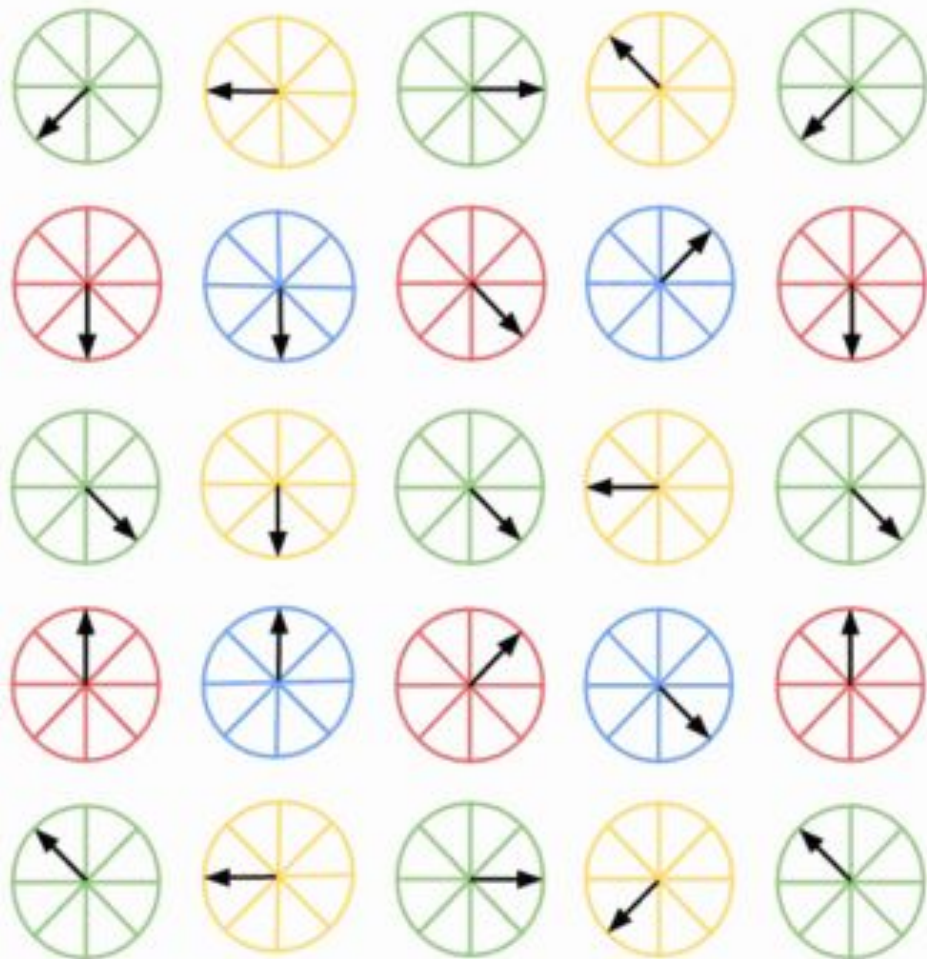
A q , N e β fissati, si proporrà la **mossa** di rotazione di $2\pi/q$ per ogni sito, procedendo come di seguito...

Codice a β fissato

Il reticolo è stato suddiviso in 4 sottoreticoli corrispondenti alle coordinate dei siti, rispettivamente:

- **DISPARI-DISPARI** (s . oo)
- **PARI-DISPARI** (S . eo)
- **DISPARI-PARI** (S . oe)
- **PARI-PARI** (S . ee)

Si noti che ciascun sito interagisce con i 4 adiacenti, appartenenti a sottoreticoli diversi.



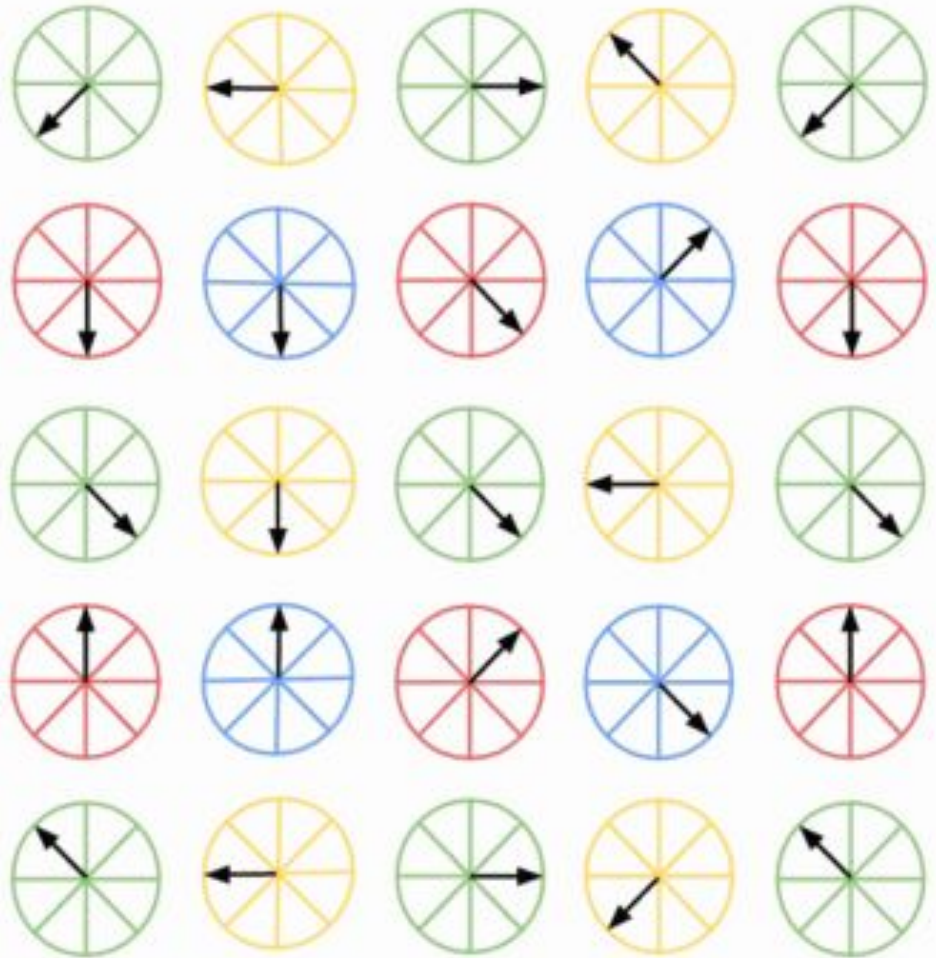
Codice a β fissato

Perciò, spin appartenenti allo stesso sottoreticolo non interagiscono, e ciò rende possibile proporre la mossa di Metropolis contemporaneamente a tutti i suoi siti.

Es: si fissa il sottoreticolo **PARI-PARI** e si propone casualmente, a ciascun suo spin, di ruotare in senso orario o antiorario di $2\pi/q$:

```
Shft = [1:q, 1:q, 1];
```

```
Stmp = Shft(S.ee+sign(randn(N))  
+ q);
```



Codice a β fissato

```
E0 = -J*( cos(2*pi/q*(S.ee-S.oe))  
+ cos(2*pi/q*(S.ee-S.oe(e2o,:)))  
+ ... ) - B*X(S.ee);
```

```
E1 = -J*( cos(2*pi/q*(Stmp-S.oe))  
+ cos(2*pi/q*(Stmp-S.oe(e2o,:)))  
+ ... ) - B*X(Stmp);
```

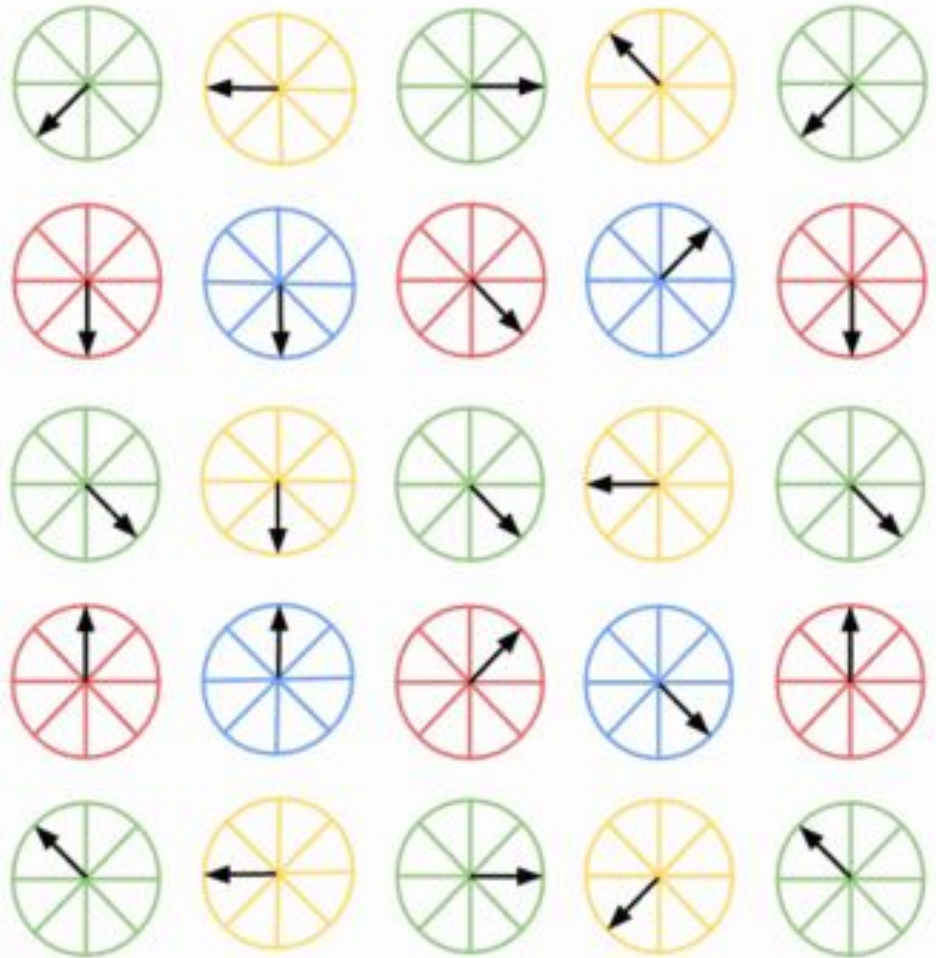
```
Delta = E1-E0;
```

```
R = rand(N);
```

```
accept = R < exp(-beta*Delta);
```

```
S.ee(accept) = Stmp(accept);
```

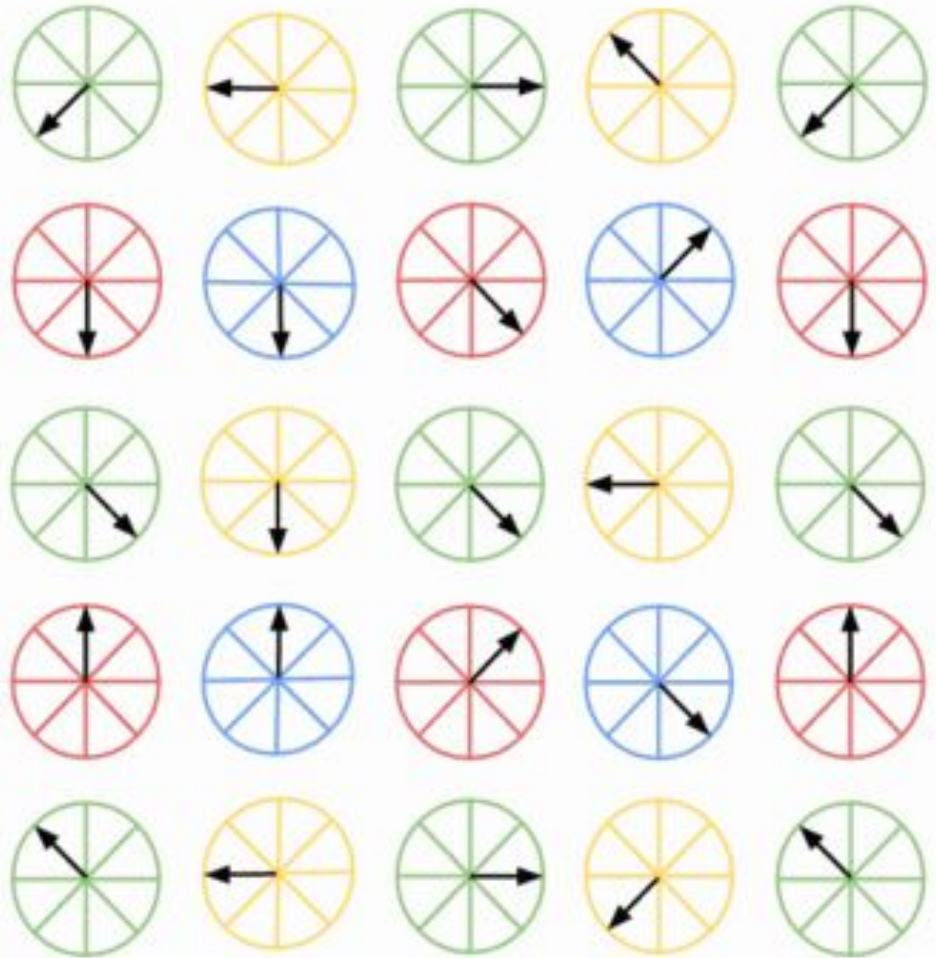
```
Etot=Etot+E0;
```



Codice a β fissato

Si procede poi con il sottoreticolo successivo e così via, finchè ciascun sito ha avuto la possibilità di ruotare.

Questo procedimento “**sweep**” è iterato un numero considerevole di volte, in modo che rispetti alcune condizioni: deve garantire che il sistema raggiunga l'**equilibrio** (**termalizzazione**, che siamo sicuri che avverrà per il bilancio dettagliato) prima di compiere misure di sue variabili termodinamiche.



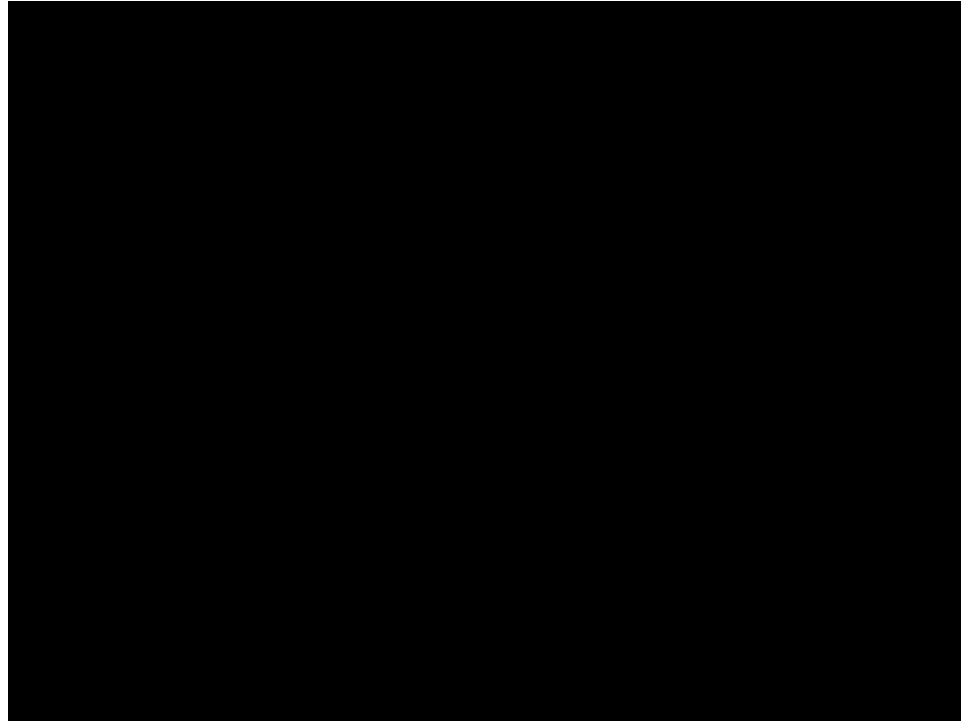
Termalizzazione

Il nostro studio del sistema avviene attraverso la valutazione di alcune sue variabili termodinamiche: **energia media (E) per sito** e **magnetizzazione media (M)**, che è definita come:

$$M = \frac{1}{\text{numSiti}} \left(\sum_j \cos \theta_j + i \sum_j \sin \theta_j \right)$$

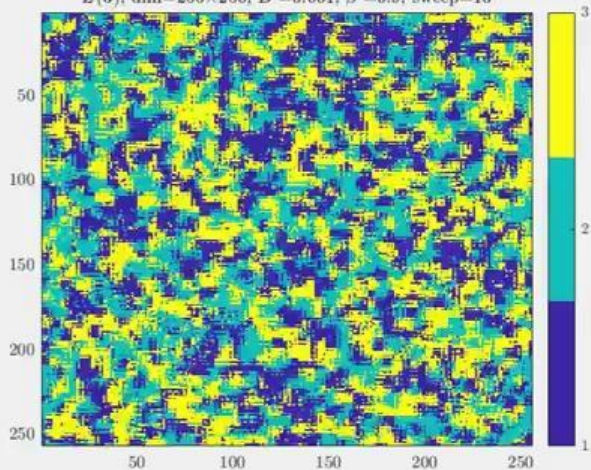
Per compiere una misura però, è necessario che il sistema abbia prima raggiunto l'equilibrio. Si stima quindi inizialmente il “tempo”, cioè gli sweep necessari affinché ciò avvenga, in modo tale da dedicare una prima serie di sweep a questo processo nelle run successive.

Raggiungimento dell'equilibrio

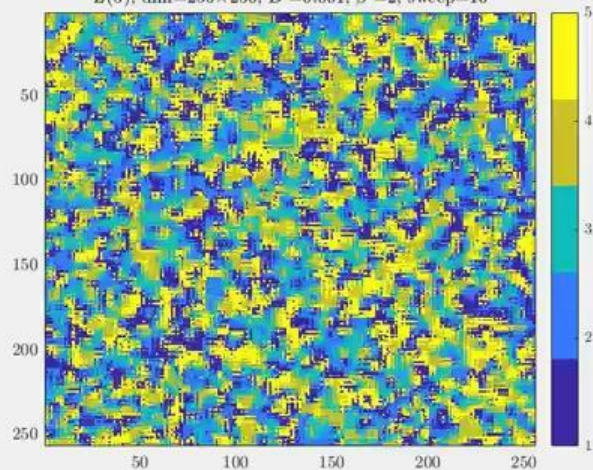


Raggiungimento dell'equilibrio

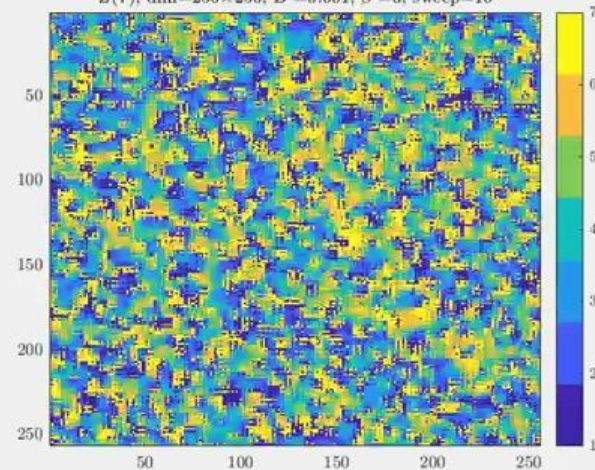
$Z(3)$, $\dim=256 \times 256$, $B=0.001$, $\beta=0.9$, sweep=10



$Z(5)$, $\dim=256 \times 256$, $B=0.001$, $\beta=2$, sweep=10



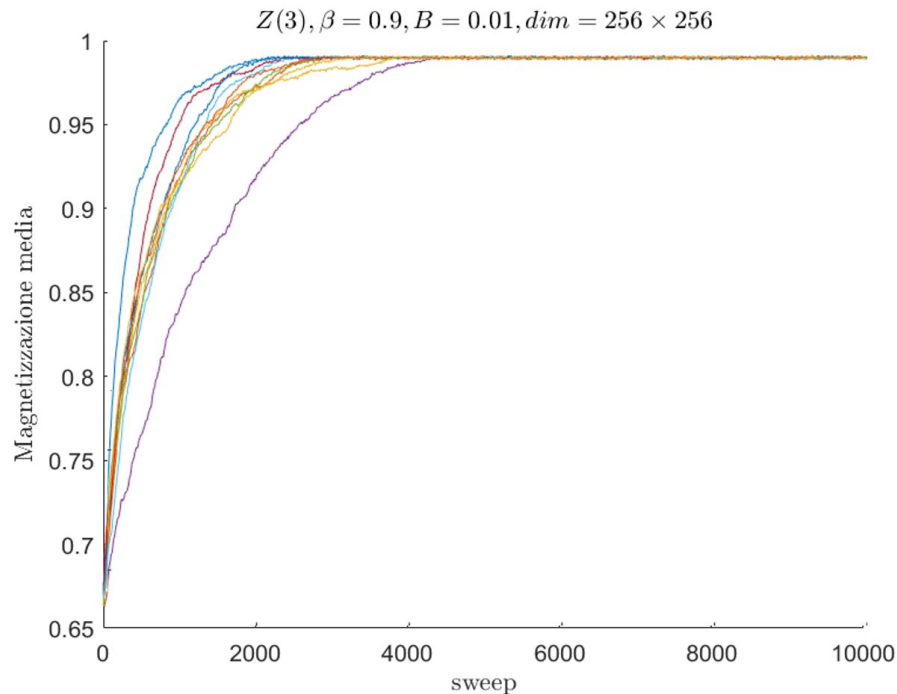
$Z(7)$, $\dim=256 \times 256$, $B=0.001$, $\beta=3$, sweep=10



Raggiungimento dell'equilibrio

Questo “tempo di termalizzazione” (“*therm*”) non dipende però solo dai parametri fissati ($q, \beta, B, N\dots$), ma risulta soggetto a fluttuazioni statistiche (più o meno importanti a seconda dei parametri di cui sopra), che possono anticipare o ritardare il raggiungimento dell'equilibrio:

Si stima quindi la termalizzazione mediando questi risultati, tendendo a fare sovrastime sul numero di sweep per la *therm* per evitare di invalidare i risultati.



Evoluzione del modulo della magnetizzazione in più run indipendenti, mantenendo fissati tutti i parametri.

Autocorrelazione

Stimato il “tempo di termalizzazione” è allora possibile misurare le osservabili di interesse. Tuttavia, una sola misura non costituisce un campione statistico soddisfacente ed è inevitabilmente soggetta ad errori casuali.

Per questo motivo, l'idea è di compiere periodicamente misure delle osservabili in questione all'evolversi del sistema (a partire dalla configurazione di equilibrio). Tenendo conto di questi risultati (interpretabili come prove ripetute), una stima complessiva la generica osservabile f è data da

$$f = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i \quad \delta f = \frac{\sigma_f}{\sqrt{N}}$$

dove N è il numero di prove **indipendenti**.

Autocorrelazione

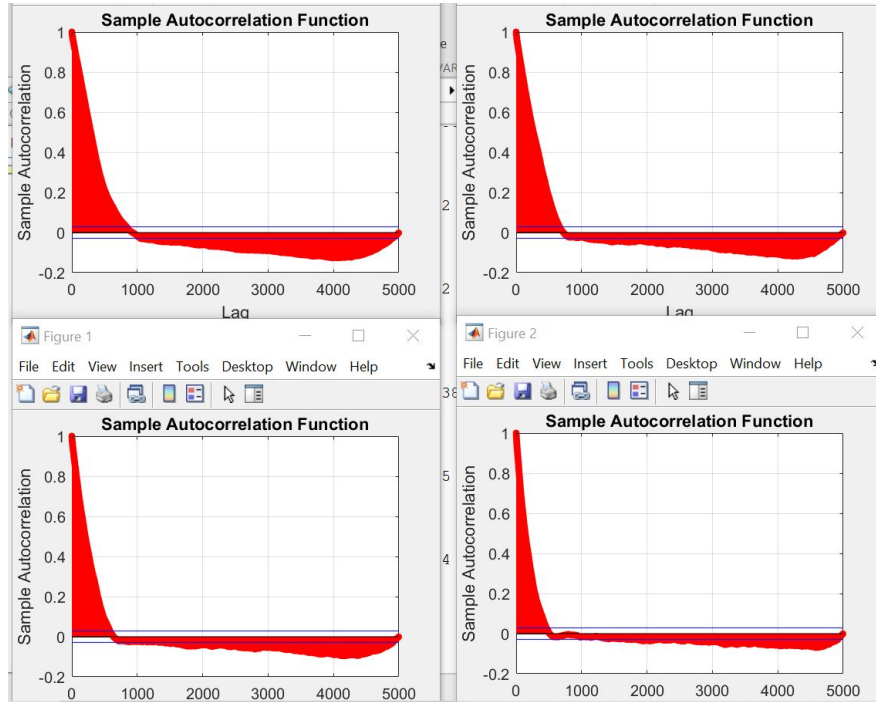
Il nostro metodo (che prevede mosse locali) comporta però la presenza di un'importante correlazione tra configurazioni successive del sistema, che non possono dunque essere considerate indipendenti.

Ci si pone quindi come obiettivo la stima del numero di sweep necessari al sistema per raggiungere uno stato (statisticamente) indipendente da quello di partenza. Uno strumento utile per farlo è l'**autocorrelazione** relativa ad un'osservabile f , definita come:

$$C(t) = \langle f(t)f(t + \tau) \rangle - \langle f \rangle^2 = \mathcal{F}^{-1}(\mathcal{F}|f(t)|^2) - \langle f \rangle^2$$

Il calcolo può essere fatto tramite la funzione di Matlab **autocorr**(...) che sfrutta la trasformata di Fourier.

Nel nostro caso, fissati q , N e β e considerando come stato iniziale il primo dopo la `therm`, si può calcolare più volte tale quantità per più run indipendenti, trovando grafici del tipo:



Facendo riferimento ai grafici ottenuti, si può stimare come autocorrelazione il numero di sweep in corrispondenza dei quali la funzione di autocorrelazione si annulla.

Questo determina la quantità “**skip**”, cioè dopo quanti sweep lo stato del sistema può considerarsi indipendente da quello iniziale.

Transizioni di fase

Come anticipato, sistemi con questa simmetria sono caratterizzati dalla presenza di transizioni di fase.

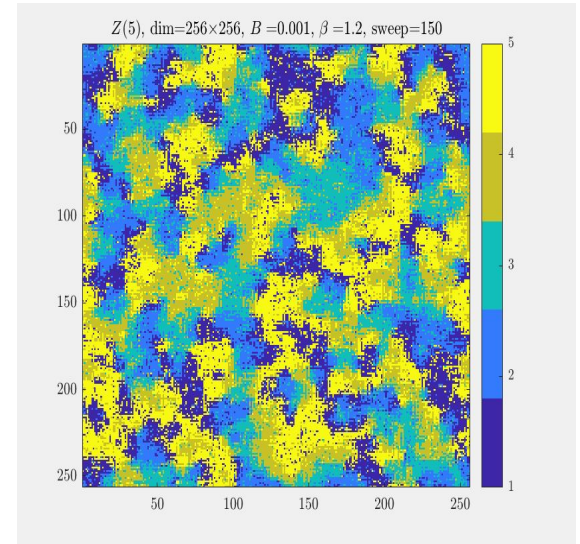
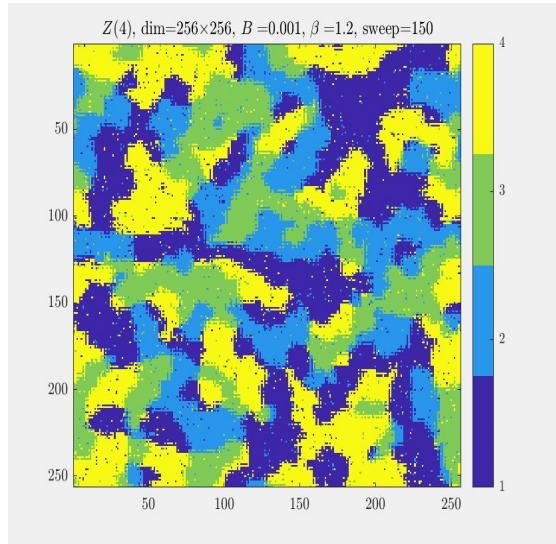
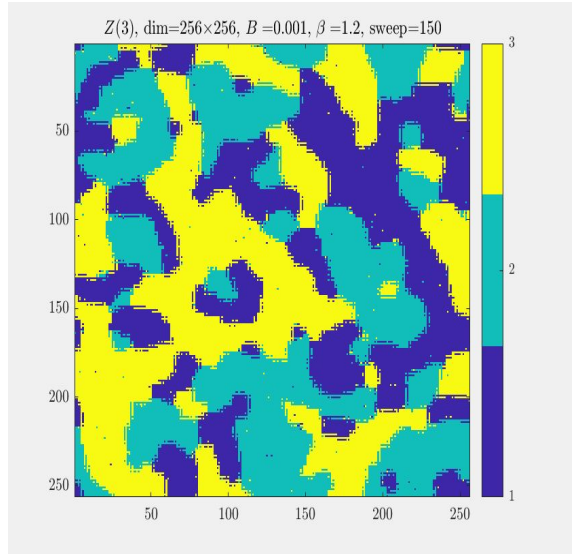
Il loro numero e la temperatura a cui avvengono dipende da q , motivo per cui si è scelto di approfondire lo studio sui diversi modelli $Z(q)$ con $2 \leq q \leq 8$.

Nonostante ciò, il motivo per cui le si osserva è sempre lo stesso: l'agitazione termica e la tendenza a raggiungere una configurazione poco energetica concorrono a determinare lo stato del sistema. A seconda della temperatura però, uno dei due fattori domina sull'altro rendendo possibile la distinzione tra diversi regimi.

Per evidenziare la presenza di queste transizioni si è scelto di studiare come evolve M al variare di β , fissando q e gli altri parametri.

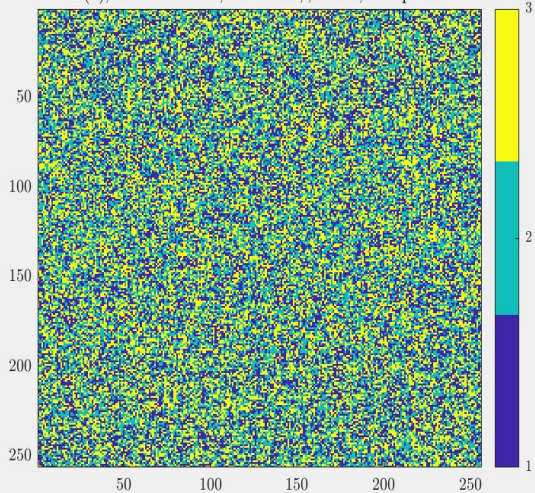
Diversi q , β fissata

Si può trovare conferma di quanto anticipato nelle immagini che seguono. Infatti, il sistema con $q = 3, 4$, e 5 a parità di temperatura ($\beta = 1.2$) manifesta comportamenti molto diversi. Ciò suggerisce che si avranno temperature critiche di transizione diverse a seconda del valore di q .



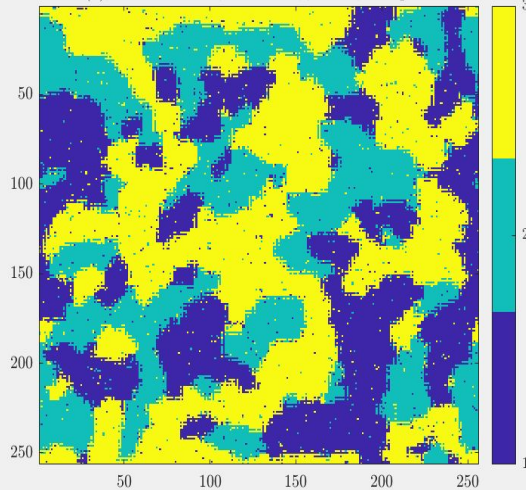
q fissato, β variabile

$Z(3)$, dim= 256×256 , $B = 0.001$, $\beta = 0.2$, sweep=150



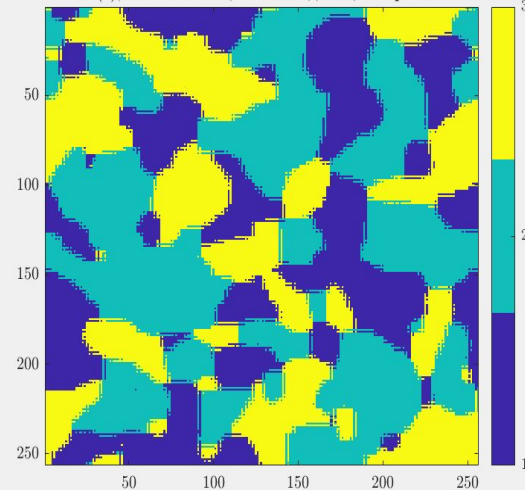
$\beta = 0.2$ A temperature elevate gli spin saranno orientati tutti in modo casuale (il modulo della magnetizzazione sarà quindi nullo)

$Z(3)$, dim= 256×256 , $B = 0.001$, $\beta = 0.9$, sweep=150



$\beta = 0.9$ A temperature minori gli spin iniziano ad allinearsi formando dei regimi di spin paralleli, ma è comunque importante la presenza di rumore termico

$Z(3)$, dim= 256×256 , $B = 0.001$, $\beta = 2$, sweep=150



$\beta = 2$ A temperature ancora più basse gli spin tenderanno ad essere sempre più allineati lungo un'unica direzione, a cui corrisponde una magnetizzazione pari a 1

Il codice realizzato - β variabile

Si realizza uno script che richiami il precedente programma permettendo di visualizzare l'evoluzione delle osservabili e del sistema al variare di β , cioè un ciclo del tipo:

```
numBeta = lenght(beta) ;
```

```
for i = 1:numBeta
```

```
    ...
```

```
end
```

dove a ogni β il sistema evolve a partire dall'ultima configurazione raggiunta. Questo permette di osservare in tempo reale l'evoluzione del sistema e l'andamento della magnetizzazione (ed energia) al crescere di β , in modo da poter individuare ed analizzare i punti di transizione.

Z(2)

Il modello Z(2) coincide con il modello di Ising in due dimensioni, dove spin adiacenti possono assumere due configurazioni: paralleli o antiparalleli.

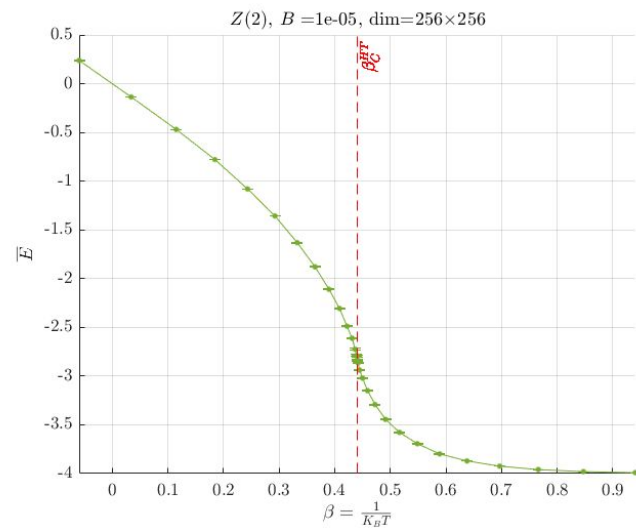
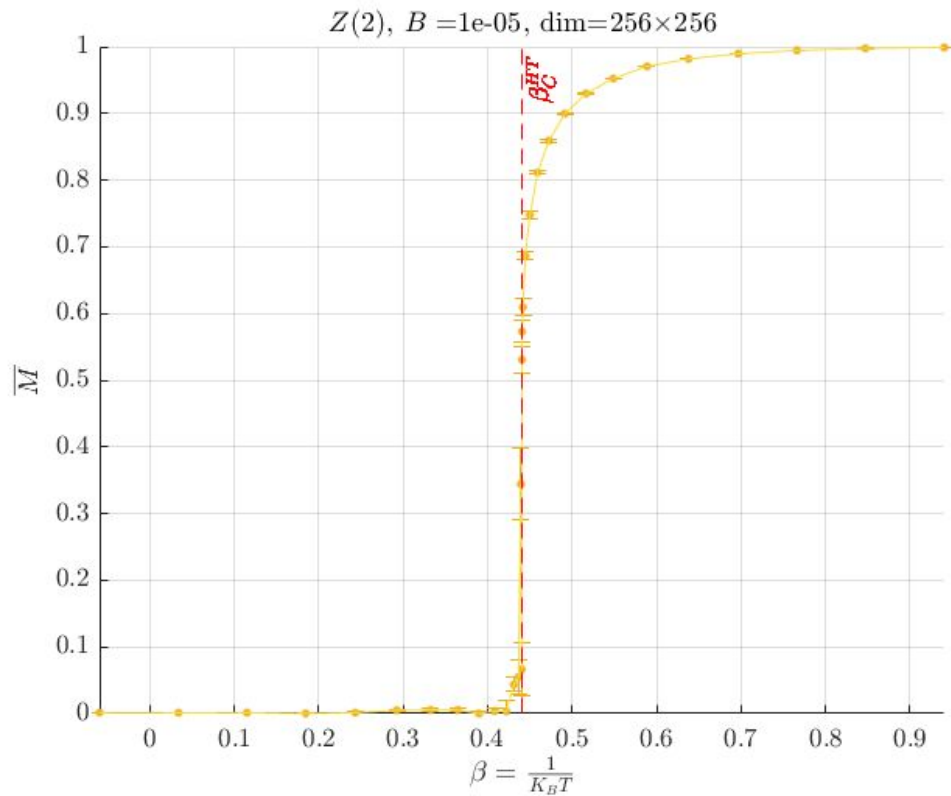
Ci si aspetta, quindi, di osservare una transizione di fase attorno al valore previsto dalla soluzione analitica:

$$\beta_c^{q=2} = \frac{1}{2} \sinh^{-1}(1) \sim 0.44$$

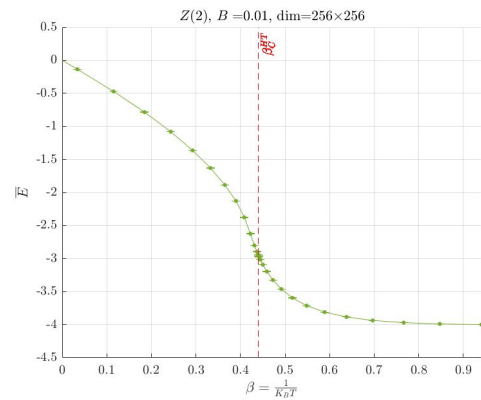
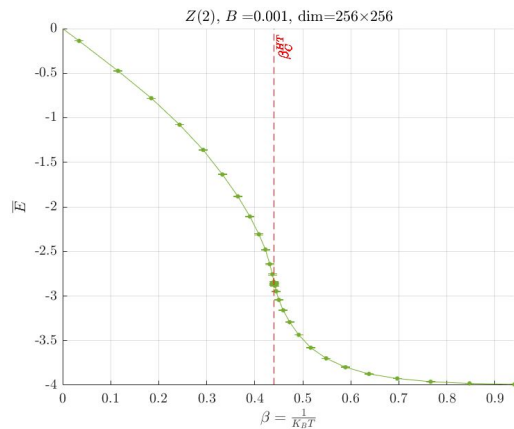
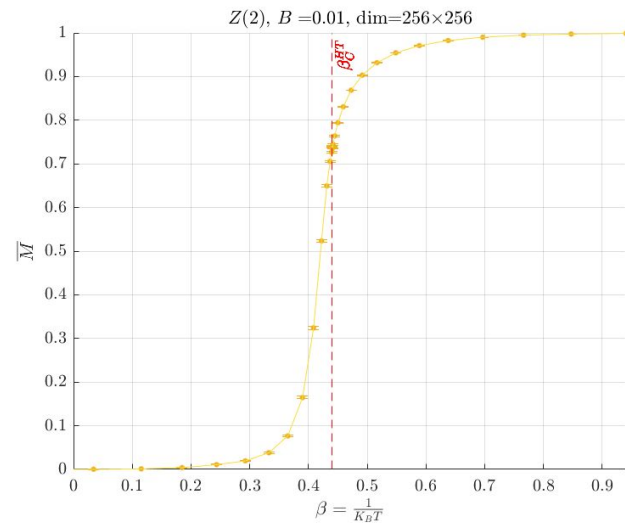
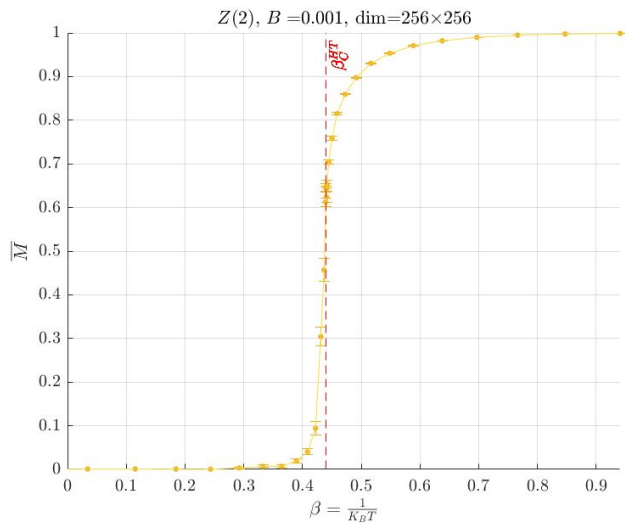
Campionando β in modo più fitto attorno al valore della temperatura critica, si ottengono i seguenti grafici (rispettivamente) della magnetizzazione e dell'energia, in particolare è possibile verificare la consistenza del primo con il modello di Ising sovrapponendo il grafico ottenuto con quello della curva teorica:

$$\beta > \beta_c \rightarrow M(\beta) = (1 - \sinh(2\beta)^{-4})^{\frac{1}{8}}$$

$$\beta < \beta_c \rightarrow M(\beta) = 0$$



Grafici magnetizzazione ed energia con $B=0.00001$



Grafici magnetizzazione ed energia con $B=0.001$ e $B=0.01$

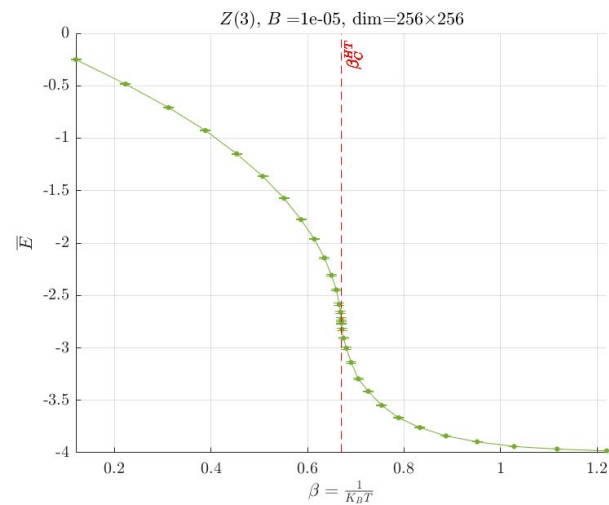
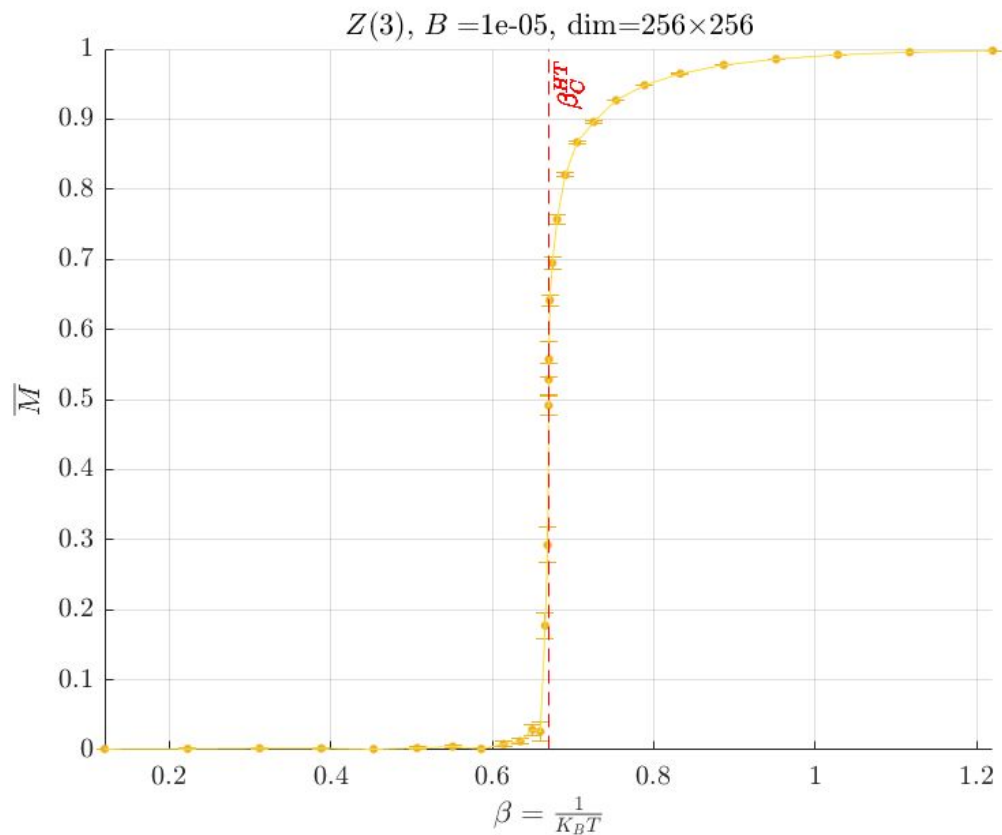
Z(3)

Il modello Z(3) coincide con il modello di Potts per $q = 3$, a meno di un shift dell'energia. Infatti

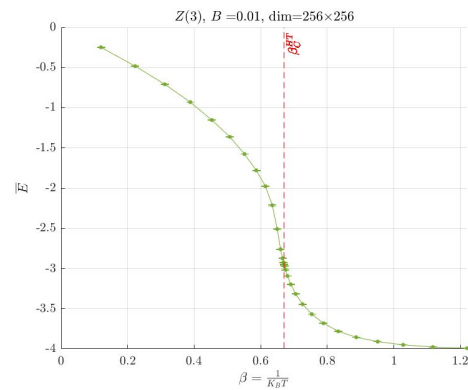
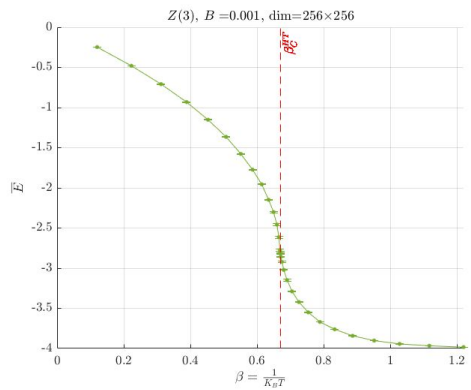
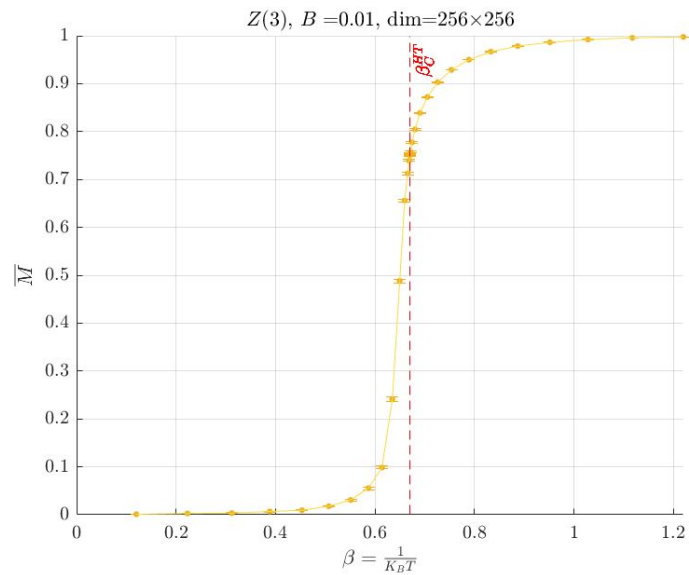
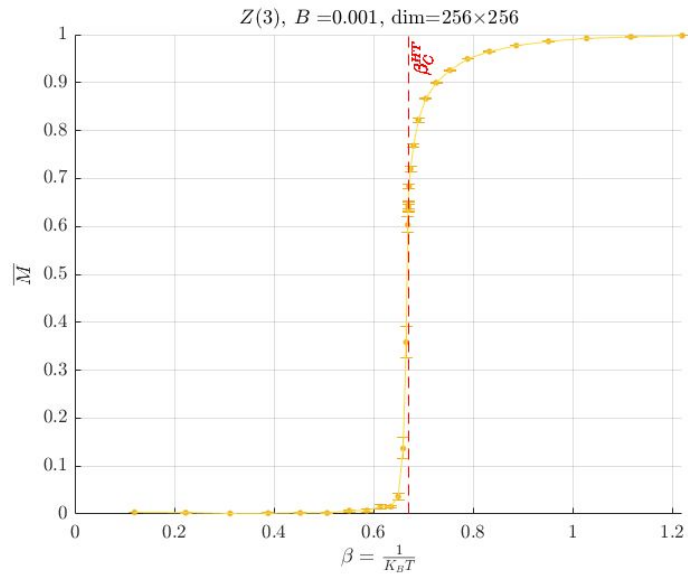
$$E_{Potts3} = \begin{cases} -1 \uparrow\uparrow \\ 0 \neq\uparrow\uparrow \end{cases} \Rightarrow E_{Z(3)} = \frac{3}{2} \left(E_{Potts3} + \frac{1}{3} \right) = \begin{cases} -1 \uparrow\uparrow \\ \frac{1}{2} \neq\uparrow\uparrow \end{cases}$$

Anche in questo caso esiste una stima teorica per la transizione di fase, che è prevista a una β critica pari a:

$$\beta_c = \frac{2}{3} \ln(\sqrt{3} + 1)$$



Grafici magnetizzazione ed energia con $B=0.00001$



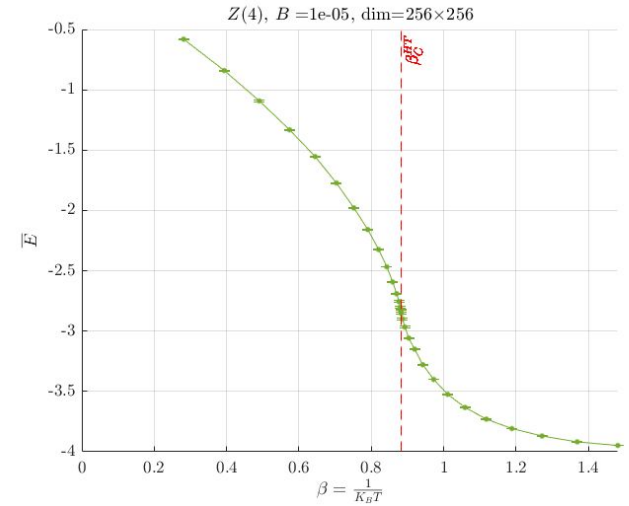
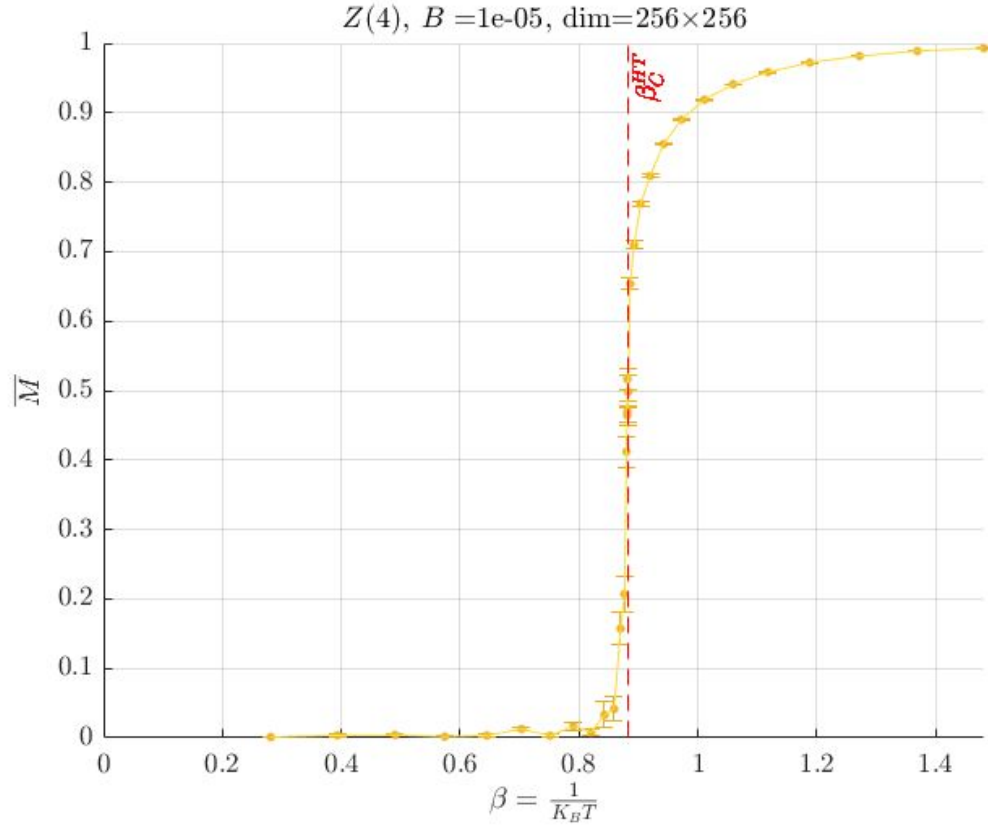
Grafici magnetizzazione ed energia con $B=0.001$ e $B=0.01$

Z(4)

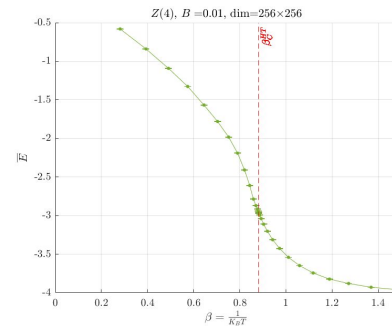
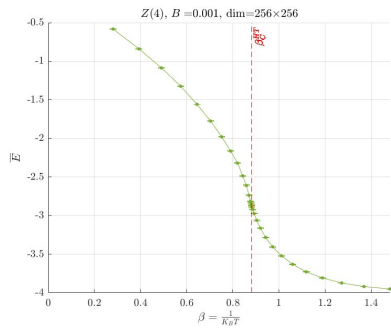
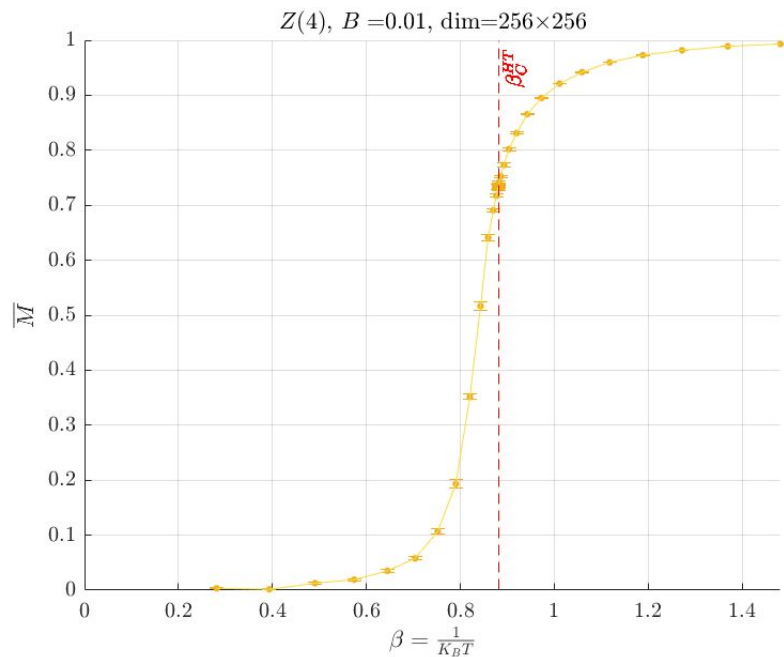
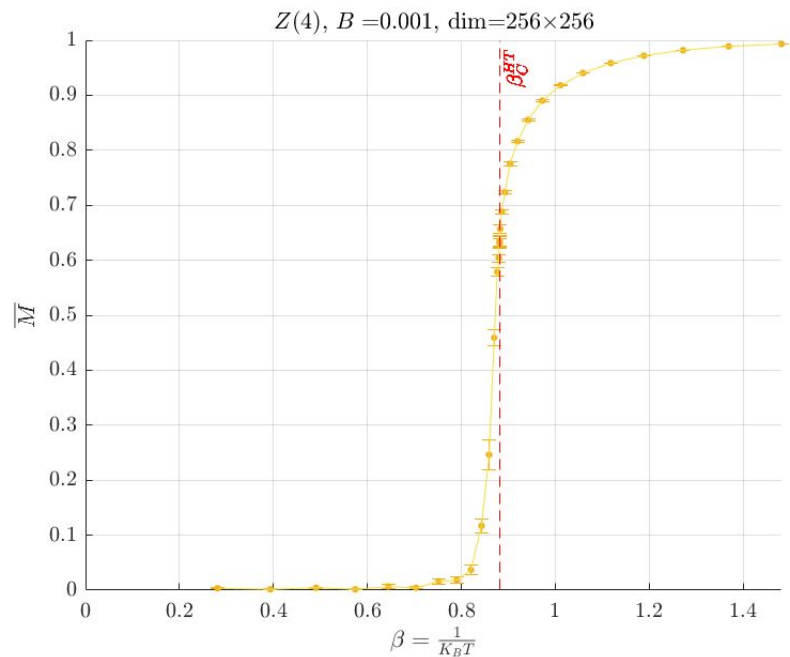
Infine, per $q = 4$ la soluzione analitica prevede una transizione di fase attorno a un valore teorico dato da:

$$\beta_c = \ln(\sqrt{2} + 1)$$

Come nei precedenti casi, anche per $q=4$ si noterà che all'aumentare del campo magnetico esterno B la curva della magnetizzazione risulterà sempre meno discontinua attorno alla β critica.



Grafici magnetizzazione ed energia con $B=0.00001$



Grafici magnetizzazione ed energia con $B=0.001$ e $B=0.01$

$Z(q>4)$

A partire da $q = 5$ il sistema inizia timidamente a raccordarsi al modello XY in 2 dimensioni. Quest'ultimo può infatti essere visto come il limite $Z(q \rightarrow \infty)$ dove ciascun sito può orientarsi sul cerchio unitario assumendo valori continui di ϑ e, in virtù di ciò, presenta simmetria $U(1)$.

È di particolare interesse il manifestarsi in questo modello di transizioni di Kosterlitz-Thouless (KT) (transizioni del secondo ordine).

Ci siamo quindi posti come obiettivo capire se e come il modello $Z(q)$ si raccordi con XY al crescere di q .

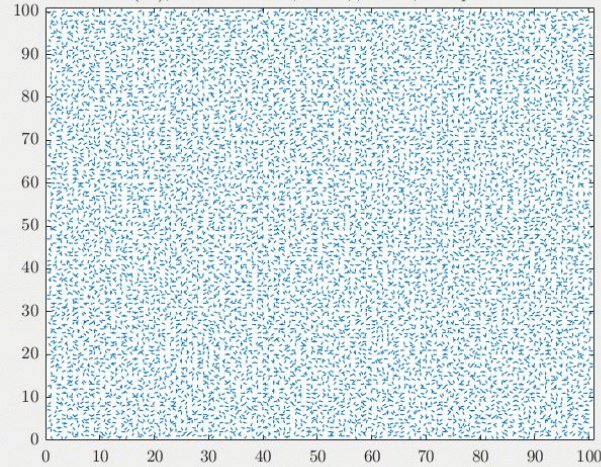
Per farci un'idea, abbiamo simulato il sistema $Z(20)$ per 3 valori di β : a temperatura bassa, alta ed intermedia...

$$\beta < \beta_C^{HT}$$

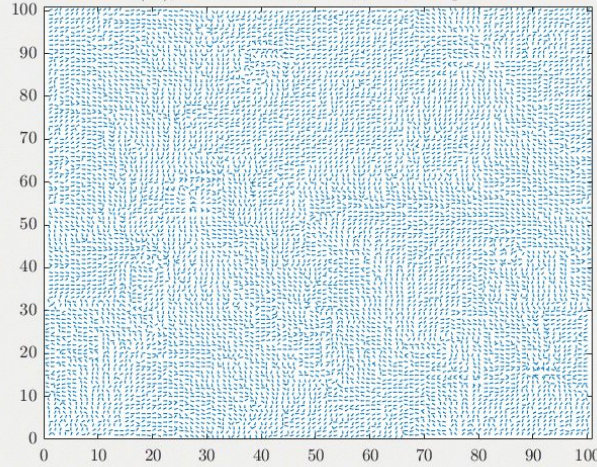
$$\beta_C^{HT} < \beta < \beta_C^{LT}$$

$$\beta > \beta_C^{LT}$$

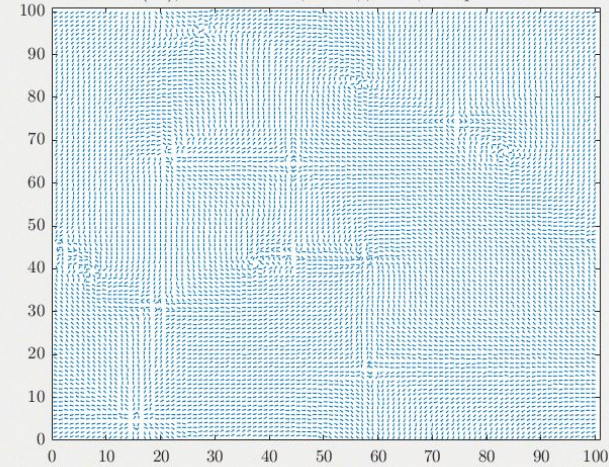
$Z(20)$, dim=100×100, $B=0$, $\beta=0.2$, sweep=1000



$Z(20)$, dim=100×100, $B=0$, $\beta=2$, sweep=1000



$Z(20)$, dim=100×100, $B=0$, $\beta=20$, sweep=1000



Ad alte temperature governa l'agitazione termica, quindi il sistema è in uno stato caotico, in cui gli spin assumono orientazioni casuali.

L'agitazione termica è meno incisiva, dunque gli spin si dispongono in modo meno disordinato. Tuttavia, non viene raggiunto un equilibrio e (a colpo d'occhio) emerge la tendenza a disporsi a "vortice".

A temperature basse (dopo un elevato numero di sweep) viene raggiunta la configurazione più ordinata. Prima che ciò avvenga si osserva la formazione e successiva scomparsa di coppie vortice-antivortice.

$Z(q>4)$

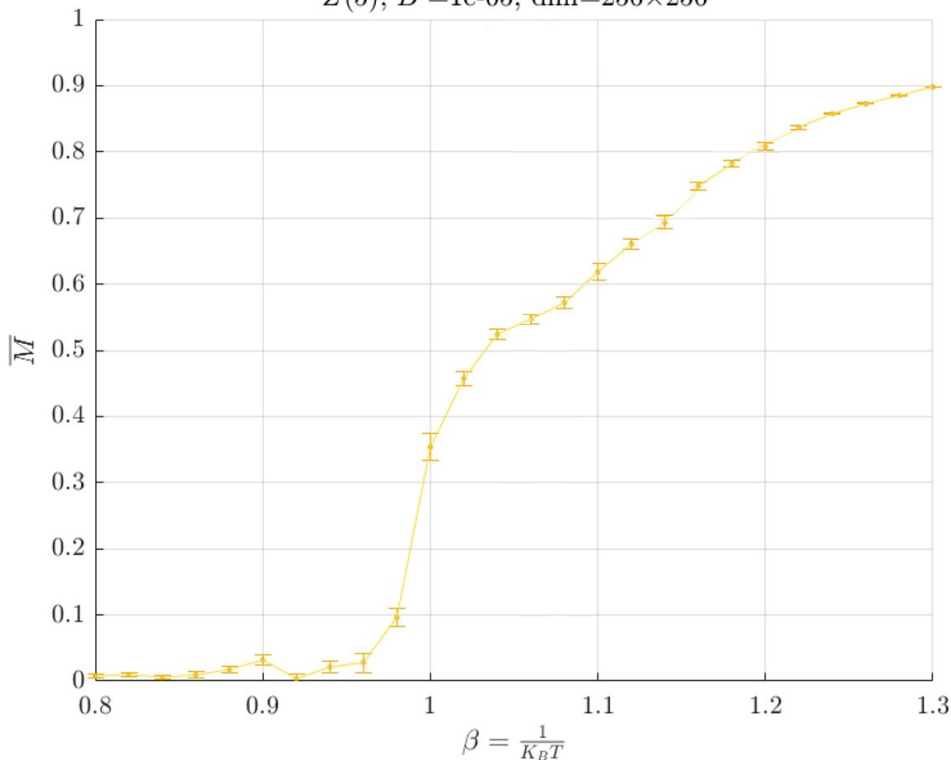
Da $q = 5$ in poi ci si aspetta di osservare due transizioni, di cui una più evidente (del primo ordine, già presente per $q < 5$) e una di tipo KT, meno evidente (del secondo ordine). Questi regimi non si manifestano solo “a colpo d’occhio”, ma possono essere riconosciuti anche studiando l’andamento di osservabili termodinamiche del sistema al variare di β .

Non esistono espressioni analitiche per queste β critiche, perciò ci siamo posti come obiettivo la loro stima nel caso $q = 5, 6, 7$ e 8 . In quanto relativa ad una transizione del secondo ordine, è più complesso individuare β_C^{LT} motivo per cui in letteratura sono stati sviluppati diversi metodi per stimarla. Nel nostro caso si è scelto di determinare le temperature di transizione tramite lo studio del modulo della magnetizzazione media al variare di β .

Si studia quindi un intervallo fissato di valori di β , mantenendo il campo magnetico a valori molto contenuti (dalle trattazioni relative a $q < 5$ è risultato evidente quanto questa scelta favorisse una transizione più “repentina”) e distribuendo tali valori uniformemente nell’intervallo, in quanto non sono noti i valori attesi per β critiche.

Z(5)

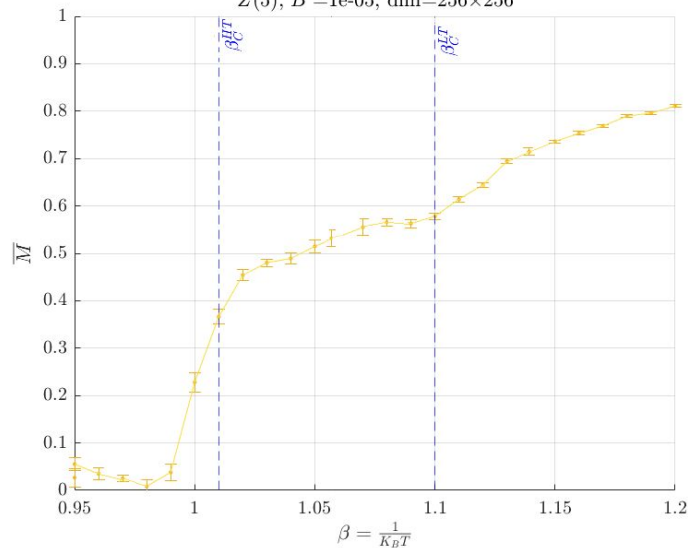
Z(5), B = 1e-05, dim=256x256



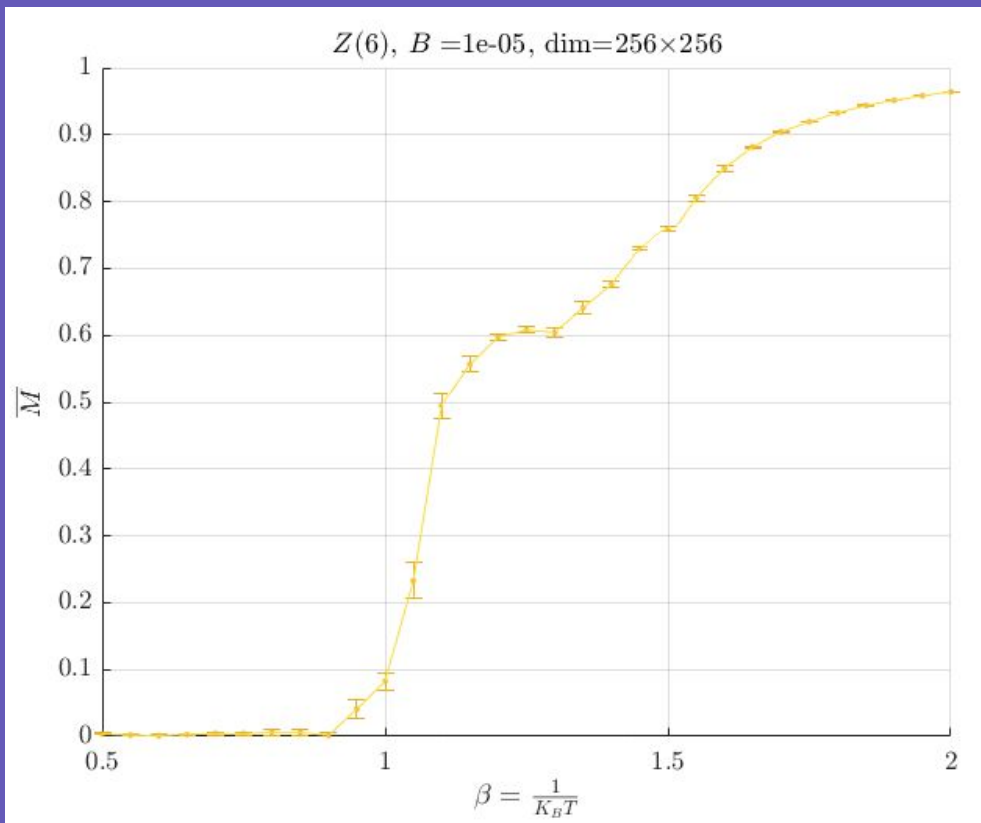
Individuati approssimativamente i punti di transizione, si ripete la run scegliendo i valori di β più fitti intorno alle regioni di interesse. Con questa scelta si possono stimare in modo grossolano le due temperature inverse di transizione:

$$\beta_C^{HT} \sim 1.02 \quad \beta_C^{LT} \sim 1.10$$

Z(5), B = 1e-05, dim=256x256

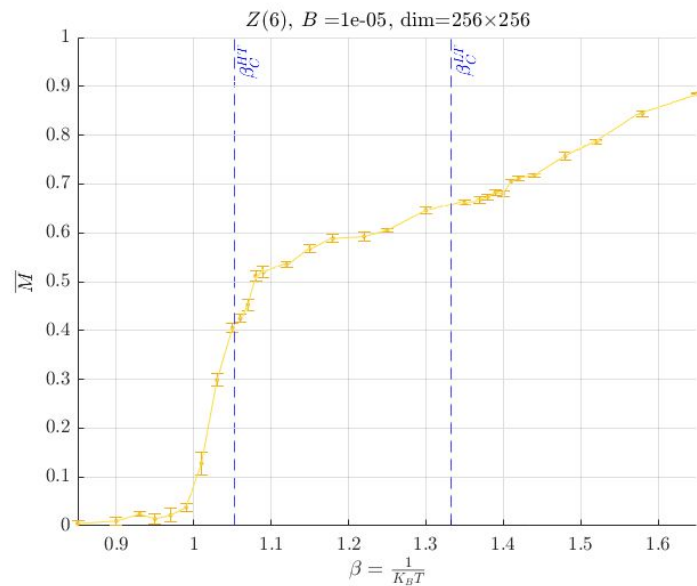


Z(6)



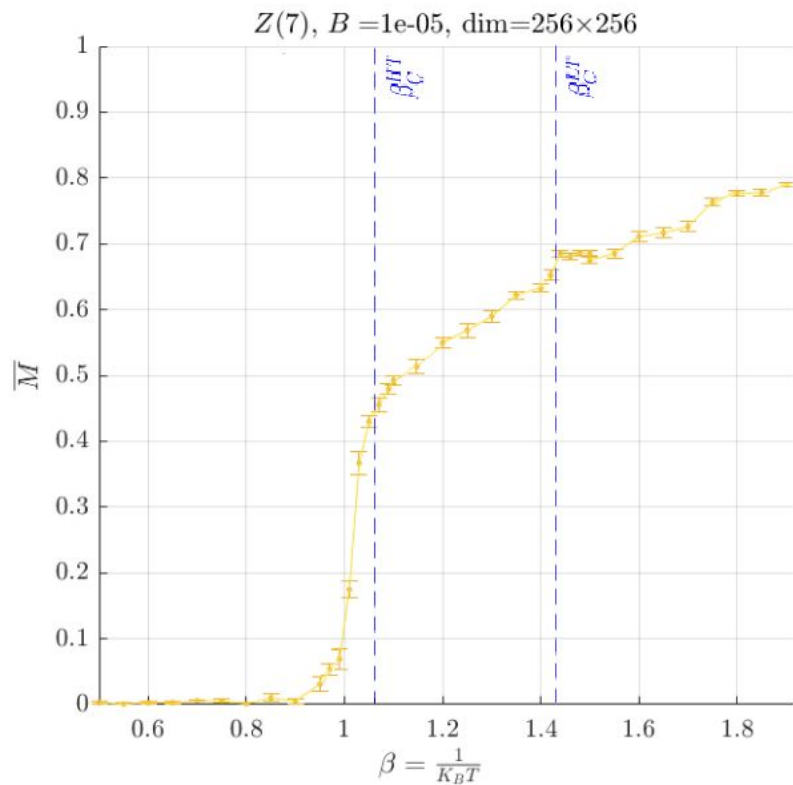
Si procede come nel caso precedente, stimando

$$\beta_C^{HT} \sim 1.06 \quad \beta_C^{LT} \sim 1.33$$

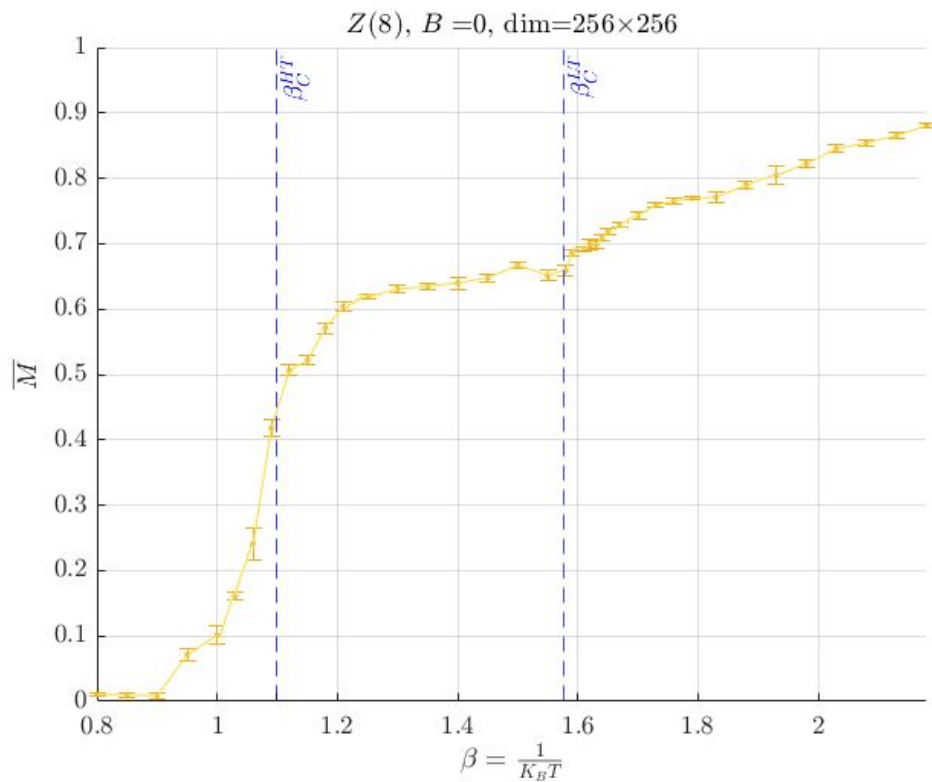


Questi risultati sono in accordo con le stime riportate nel lavoro Chen [3], ottenute con diverse strategie.

Z(7) $\beta_C^{HT} \sim 1.08$ $\beta_C^{LT} = 1.43$

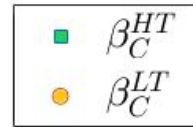
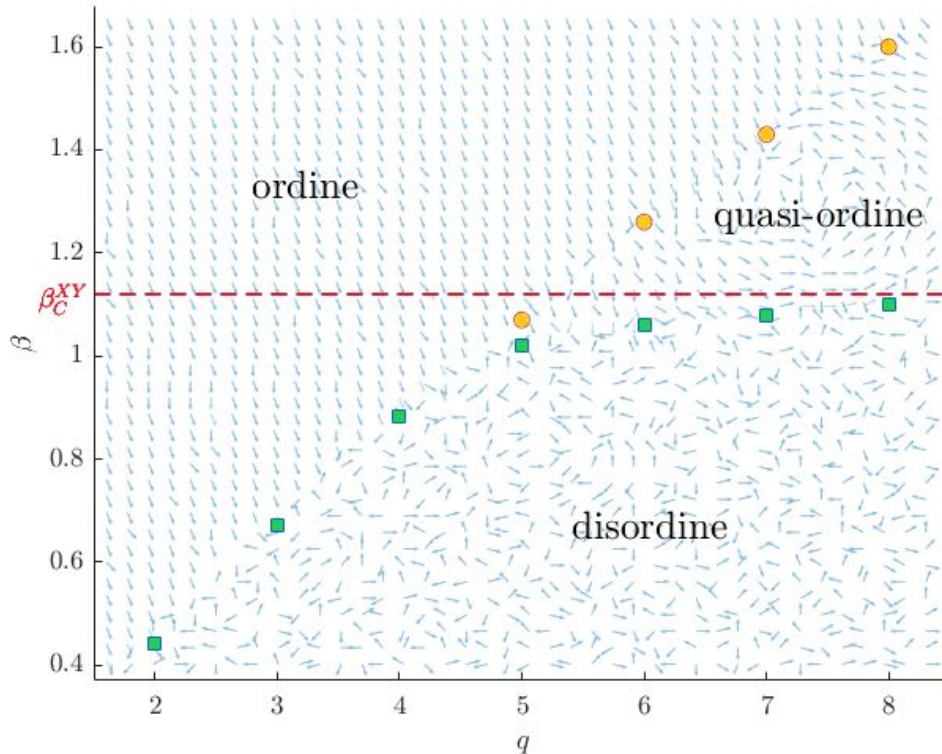


Z(8) $\beta_C^{HT} \sim 1.10$ $\beta_C^{LT} = 1.58$



Considerazioni

L'analisi svolta per $2 \leq q \leq 8$ permette quindi di trarre delle conclusioni sul comportamento del modello $Z(q)$ in funzione del numero di gradi di libertà dei singoli siti.

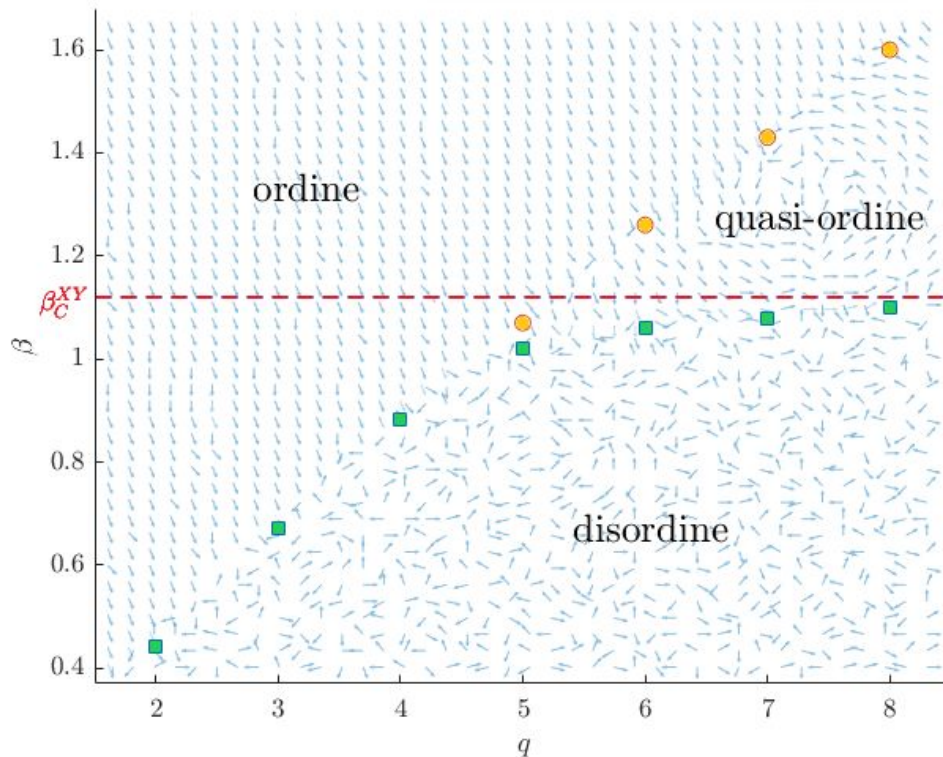


q	β_C^{HT}	β_C^{LT}
2	0.44	-
3	0.67	-
4	0.88	-
5	1.02	1.1
6	1.06	1.33
7	1.08	1.43
8	1.1	1.58
...
XY	1.12	∞

La **retta orizzontale** indica la temperatura (inversa) critica per il modello XY (come stimata da [5]).

Considerazioni

L'analisi svolta per $2 \leq q \leq 8$ permette quindi di trarre delle conclusioni sul comportamento del modello $Z(q)$ in funzione del numero di gradi di libertà dei singoli siti.



- Ciò che si nota è che le β_{HT} tendono asintoticamente al valore atteso per il modello XY : i due modelli si raccordano effettivamente per $q \rightarrow \infty$
- Le β_{LT} hanno invece un andamento crescente con q . Anche in questo caso il risultato è in accordo con quanto atteso per XY , in cui ci si aspetta di osservare solo 2 regimi: quello di quasi ordine e disordine.

Bibliografia

- [1] E.Onofri- *“Lezioni di Metodi Probabilistici della Fisica”*, 2017
- [2] Ortiz et Al- *“Dualities and phase diagram of the p -clock model”*, 2012
- [3] Chen et Al- *“Phase transition of the q -state clock model”*, 2017
- [4] Sun et Al- *“Phase transitions in the $Z(p)$ and $U(1)$ models”*, 2019
- [5] Wikipedia (https://en.wikipedia.org/wiki/Classical_XY_model)