Tecnológico de Costa Rica
Escuela de Física
IF4702 - Física Computacional I
Grupo 1
Prof. Jose Esteban Pérez Hidalgo
Prof. Álvaro Amador Jara

Tarea semana 13: Simulación Metrópolis-Monte Carlo - Modelo de Ising en 1D.

Objetivo:

Estudiar las propiedades del modelo de Ising 1D mediante una simulación Metrópolis-Monte Carlo.

1. Descripción:

El modelo de Ising es un sistema sencillo que se usa para simular el comportamiento magnético de algunos materiales. El modelo unidimensional consiste en un arreglo de *N espines* en posiciones fijas a los que se les permite apuntar en dos direcciones: arriba o abajo. En general, los espines interactúan entre sí y con un campo magnético externo, a partir de estas interacciones se define la energía del sistema. Además, el sistema se encuentra en contacto con un baño térmico a temperatura *T*.
A pesar de la simplicidad del modelo, este permite estudiar el comportamiento de materiales ferromagnéticos y antiferromagnéticos a distintas temperaturas. Los modelos en 2D y 3D exhiben incluso las transiciones de fase que se observan en la naturaleza. El modelo en 1D no muestra la existencia de una temperatura crítica, pero funciona para simular las propiedaddes termodinámicas de los materiales.
Se recomienda establecer una estrategia de resolución de problemas siguiendo los pasos del método Pólya.

1.1. Simulación del modelo de Ising

a. Escriba una rutina que implemente el algoritmo Metrópolis simular un modelo de Ising en 1D. Para probar su simulación use inicialmente los siguientes parámetros: $J = 1$ (comportamiento ferromagnético) y $k_B T = 1$ y $nEspines = 20$. Pseudocódigo:

   I. inicialice un arreglo de N entradas. Use condiciones de contorno periódicas para el arreglo de espines, por ejemplo: `arregloEspines[0] = arregloEspines[N+1]`,

   II. inicialice los valores de los espines que determinen la alineación hacia arriba o hacia abajo,

III. guarde el estado actual del arreglo de espines,
IV. calcule la energía del sistema de espines.
V. elija un espín del arreglo usando una distribución uniforme,
VI. calcule la energía del sistema si se cambiara la dirección del espín seleccionado,
VII. calcule ΔE,
VIII. calcule la probabilidad de aceptación de la transición P_a,
IX. se acepta o se rechaza la transición,
X. repita desde el tercer paso.

b. Investigue el estado de equilibrio al que tiende el sistema, observando el comportamiento para una ejecución del modelo de Ising usando tres configuraciones iniciales: configuración inicial ordenada (espines fríos, deben simularse los casos espines arriba y espines abajo) y una configuración desordenada (espines calientes, configuración aleatoria)

c. Genere gráficas del comportamiento para `nEspines = 100`, donde se muestre en el eje vertical el sistema de espines y en el eje horizontal el estado del sistema para cada paso del tiempo con `nPasos = 1000`.

d. Comente acerca del estado de equilibrio alcanzado por el sistema, ¿depende de la configuración inicial? Use como base la discusión del modelo de Ising en $\S 15{,}2$ de [1].

1.2. Propiedades termodinámicas del modelo de Ising

Para una configuración determinada de espines α_j la energía y la magnetización vienen dadas por

$$E_{\alpha_j} = -J \sum_{i=1}^{N-1} s_i s_{i+1}, \tag{1}$$

$$\mathcal{M}_j = \left| \sum_{i=1}^{N} s_i \right|, \tag{2}$$

La energía interna del sistema $U(T)$ es el promedio de las energías para cada configuración:

$$U(T) = \langle E \rangle \tag{3}$$

donde el promedio se hace sobre el sistema en equilibrio.
El calor específico del sistema se calcula por definición:

$$C = \frac{1}{N} \frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}T} \tag{4}$$

En este caso, la derivación numérica no es conveniente ya que U presenta fluctuaciones estadísticas. Una mejor manera de estimar el calor específico es calcular las fluctuaciones de la energía para un número arbitrario M de ejecuciones de la simulación y así calcular el calor específico de la siguiente manera:

$$U_2 = \frac{1}{M}\sum_{t=1}^{M} E_t^2 \tag{5}$$

$$C = \frac{1}{N^2}\frac{U_2 - (U)^2}{k_B T^2} = \frac{1}{N^2}\frac{\langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2}{k_B T^2} \tag{6}$$

Use la simulación del modelo de Ising 1D para estudiar las propiedades termodinámicas del modelo y comparar los resultados de la simulación con las soluciones analíticas del sistema.

a. Modifique la simulación para medir el comportamiento de la energía interna y la magnetización del sistema de espines en el tiempo.

b. Se van a utilizar tres configuraciones iniciales: todos los espines hacia arriba, todos los espines hacia arriba y todos los espines ordenados de manera aleatoria.

c. Para calcular los resultados de la simulación debe esperarse a que el sistema entre en el estado de equilibrio. Es decir, ejecute la simulación del modelo de Ising por un tiempo suficiente. Con el sistema en equilibrio calcule los valores de energía y magnetización para un solo valor de temperatura.

d. Para reducir las fluctuaciones aleatorias en el cálculo de los valores promedio haciendo varias ejecuciones de la simulación. Es decir, ejecute la simulación un número `nSimulaciones = 20` para el mismo valor de temperatura. Finalmente calcule el promedio de las variables medidas para definir el resultado de la simulación. De esta manera se obtienen valores de energía y magnetización para una temperatura.

e. Ejecute simulaciones para cada configuración inicial para obtener gráficas del comportamiento de: la energía interna U, la magnetización $\mathcal{M}$ y calor específico para el intervalo $0 < k_B T \leqslant 5$. Deben generarse 9 gráficas.

f. Compare los resultados obtenidos con las soluciones analíticas presentadas en $\S$ 15.3.1. de [1]. Es decir, en cada gráfico resultante de las simulaciones debe superponerse la gráfica de la solución analítica del sistema, con los parámetros adecuados según sea el caso.

g. Finalmente, comente los resultados obtenidos: para cada gráfica discuta si los resultados coinciden con las predicciones analíticas, compare los resultados finales obtenidos para cada configuración y finalmente comente si el algoritmo de metrópolis es una herramienta efectiva para simular el modelo de Ising 1D.

2. Entrega:

1. Fecha de entrega: 25 de mayo de 2022.
2. Se puede presentar de manera individual o en parejas.
3. La entrega se tecDigital en el rubro TS13.
4. Debe entregarse un reporte de resultados que contenga:
   - enlace al código usado para generar las simulaciones,
   - una sección de resultados con las gráficas obtenidas de forma ordenada,
   - y una sección discusión donde comente los resultados obtenidos y haga sus conclusiones finales.
5. El código debe estar alojado en un repositorio de acceso público en sitios web como `github.com` o `gitlab.com`.
6. Debe tomar en cuenta las buenas prácticas de programación a la hora de escribir su código. Principalmente las buenas prácticas respecto a
   - la asignación de los nombres adecuados a las variables, arreglos y funciones,
   - uso de funciones para realizar tareas repetitivas,
   - uso de comentarios cuando sean necesarios,
   - y al uso de expresiones sencillas y legibles.
7. La calificación de la tarea se hará basada en una rúbrica de evaluación que se hará disponible en tecDigital.

Referencias

[1] P. J. . B. C. Landau, R. H., *A Survey of Computational Physics: Introductory Computational Science*. Princeton University Press, Princeton, 2011.