

MODELO DE ISING: UNA INTRODUCCIÓN AL MÉTODO MONTECARLO

ISMAEL QUIRANTES BAMOHAMED

Física Computacional 2020/2021



ÍNDICE

1. Fundamento teórico.	3
1.1. Introducción.	3
1.2. El modelo de Ising.	3
2. Metodología.	4
2.1. El algoritmo de Metrópolis.	4
2.2. Simulación de una red bidimensional $N \times N$.	4
2.3. Estudio de la red a diferentes tamaños y temperaturas.	5
3. Resultados y discusión.	6
3.1. Energía promedio	6
3.2. Magnetización promedio.	7
3.3. Susceptibilidad magnética promedio.	8
3.4. Calor específico promedio.	9
3.5. Función de correlación.	10
4. Conclusiones.	12
5. Anexos.	12
5.1. Expresiones utilizadas	12
5.2. Curvas de ajuste para la magnetización promedio.	13
5.3. Curvas de ajuste para la susceptibilidad magnética promedio.	13
5.4. Curvas de ajuste para el calor específico medio.	13
6. Bibliografía.	13

1. FUNDAMENTO TEÓRICO.

1.1. Introducción. Para el desarrollo del fenómeno que se va a estudiar en este texto se ha necesitado usar la física estadística. La física estadística estudia sistemas con un número de partículas del orden del Número de Avogadro ($6,022 \cdot 10^{23}$). En concreto utilizaremos la *colectividad canónica*, ya que el objeto de estudio es compatible con esta colectividad. Es por esto diremos que la probabilidad de que se suceda un microestado viene dado por:

$$P = \frac{1}{Z} e^{-\beta H} \quad (1)$$

Donde Z es la función de partición, que viene definida por la normalización de la probabilidad:

$$Z = \sum_i e^{-\beta H_i} \quad (2)$$

Donde i hace referencia a todos los macroestados compatibles. La complejidad del estudio de sistemas utilizando la física estadística reside en la obtención de la función de partición que, una vez obtenida, diremos que el sistema está resuelto. Esto es debido a que esta función está directamente relacionada con el potencial termodinámico *energía libre de Helmholtz* (A) de la siguiente manera:

$$A = -kT \ln(Z) \quad (3)$$

Donde $\beta = \frac{1}{kT}$ y k es la *constante de Boltzmann*. Una vez obtenida la función de partición pueden usarse las relaciones de Maxwell para obtener la termodinámica completa del sistema (entropía, energía interna, magnetización...).[1]

1.2. El modelo de Ising. Es un modelo propuesto por Wilhelm Lenz como tesis para su alumno Ernst Ising en 1920, la finalidad de este modelo fue la de intentar modelizar la estructura interna de metales ferromagnéticos con el objetivo de estudiar sus propiedades y cambios de fase.[2]

El modelo consiste en una red de spines" que pueden orientarse sólo en dos direcciones, en las conocidas *up* y *down* (1 y -1 para nosotros) e interactuar entre ellos.[3] Existen modelos unidimensionales y bidimensionales que han sido estudiados satisfactoriamente con y sin presencia de un campo magnético de forma numérica, sin embargo para el caso tridimensional no se ha podido elaborar un modelo ni siquiera sin presencia de un campo magnético.[1]

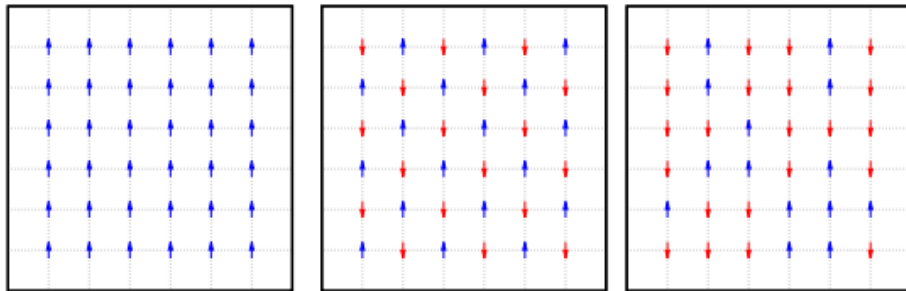


FIGURA 1. Representación de la red de espines de un modelo de ising para materiales ferromagnético (izquierda), diamagnético y paramagnético.[3]

2. METODOLOGÍA.

2.1. El algoritmo de Metrópolis. Para llevar a cabo una simulación del conocido *Modelo de Ising* hemos utilizado el algoritmo de Metrópolis. Éste se sirve de las *Cadenas de Markov*, que consiste en una visión del problema en el que el estudio estocástico del sistema tiene en cuenta que cada transición es explícitamente dependiente de los cambios de las anteriores.[4] Sea entonces una cadena de eventos sucesivos X_1, X_2, \dots, X_N :[5]

$$P_N(X_1, X_2, \dots, X_N) = P_1(X_1) T(X_1 \rightarrow X_2) T(X_2 \rightarrow X_3) \dots T(X_{N-1} \rightarrow X_N) \quad (4)$$

Es la probabilidad de que desde un estado X_1 , se transicione al X_n pasando por los estados X_2, X_3, \dots, X_{N-1} , donde $T(X \rightarrow Y)$ es la probabilidad de transicionar del estado X al Y.

A partir de unos desarrollos estadísticos que escapan del estudio de nuestro caso, se puede llegar a la *condición de balance detallado*:

$$g(X') T(X' \rightarrow X) = g(X) T(X \rightarrow X') \quad (5)$$

donde $g(X)$ es la probabilidad estacionaria de que el estado de se encuentre en el estado X.

Existen muchas funciones de transición que cumplen esta condición, pero en nuestro caso usaremos la propuesta por Metrópolis que establece:

$$T(X \rightarrow X') = \min\left(1, e^{-\beta[E(X') - E(X)]}\right) \quad (6)$$

2.2. Simulación de una red bidimensional NxN.. Ya estamos en condiciones de simular nuestra red de Ising. Vamos a suponer una red NxN donde la energía total de una macroconfiguración vendrá dada por:

$$E(S) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N s(i, j) [s(i, j+1) + s(i, j-1) + s(i+1, j) + s(i-1, j)] \quad (7)$$

y la diferencia entre transiciones vendrá dada por:

$$\Delta E = 2s(n, m) [s(n+1, m) + s(n-1, m) + s(n, m+1) + s(n, m-1)] \quad (8)$$

Trabajamos sobre una macroconfiguración dada libre, puede ser una configuración ordenada (espines alineados) o aleatoria (magnetización neta nula) y aplicamos el algoritmo de metrópolis para simular una evolución de la estructura interna del metal a partir de una temperatura dada. Para *evolucionar* al sistema, en primer lugar se elije un un punto al azar de la red (x,y), se evalúa la probabilidad de transición dada por Metropolis (6), donde $E(X') - E(X)$ es la diferencia ΔE dada en (8). A continuación de genera una probabilidad normalizada aleatoria (entre 0 y 1), y se compara con la de metrópolis, si la primera es menor, se cambia el espín de *up* a *down* o viceversa (se cambia el signo del espín).

La unidad de tiempo básica en este procedimiento es el *Paso Montecarlo* (PMC), que equivale a realizar N^2 intentos de cambio en la red. Diremos que en un PMC, de media, todos los espines han intentado cambiar al menos una vez.

2.3. Estudio de la red a diferentes tamaños y temperaturas. En este documento vamos a estudiar el comportamiento de una red del modelo de Ising. Vamos a notar que existe una temperatura, denominada *temperatura crítica* (T_c) a partir de la cual sucede el cambio de fase entre la fase ferromagnética y la paramagnética. Teóricamente, esta temperatura viene dada por:[3]

$$T_c = \frac{2}{\log(1 + \sqrt{2})} \frac{J}{k} \approx 2,269 \frac{J}{k_B} \quad (9)$$

Vamos a trabajar en unidades tales que $\frac{J}{k} = 1$, luego nuestra temperatura crítica será 2.269K.

El efecto de la transición en el metal será muy notable, especialmente, en la magnetización promedio del metal y en su calor específico:

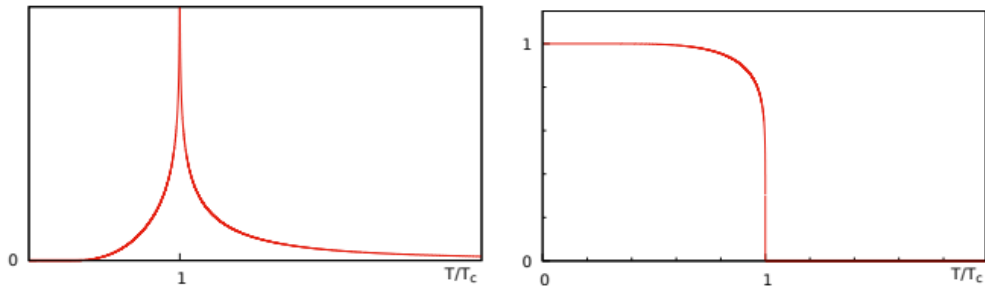


FIGURA 2. Representación del calor específico (izquierda) y magnetización (derecha) en función de T/T_c para un red ideal (infinita) [3]

Para llevar a cabo el análisis de nuestra red vamos a comparar resultados teóricos consultados en la bibliografía con los que nos arroja el modelo de ising. Para ello vamos a simular y evolucionar las redes para distintos tamaños y temperaturas para estudiar los cambios de fase y la influencia de los efectos de borde en nuestra red por ser ésta finita.

En primer lugar vamos a notar que existe un importante resultado termodinámico, que establece que en un entorno cercano a la temperatura crítica, una función termodinámica se comporta según la siguiente ley de potencias:[2]

$$A(T) \propto \left| \frac{T_c - T}{T_c} \right|^e \quad (10)$$

donde e hace referencia al exponente crítico, que es característico de cada función termodinámica. La teoría nos ofrece distintos exponentes críticos para cada función termodinámica que vamos a estudiar:[6]

Función	Exponente Crítico (e)
Magnetización	$1/8$
Susceptibilidad Magnética	$-7/4$
Calor específico	0
Función de Correlación	$1/4$

TABLA 1. Exponentes críticos para diferentes funciones termodinámicas.

De aquí en adelante, en el documento se estudiará si los resultados obtenidos por nuestra simulación concuerdan con los resultados teóricos y se realizará una valoración de éstos. Las magnitudes experimentales obtenidas se han obtenido explícitamente a partir de las expresiones que serán descritas en el apartado Anexo.

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN.

Los resultados experimentales obtenidos en este documento son en realidad un promedio realizado sobre 10^6 Pasos Montecarlo, donde se han ido tomando medidas cada 100 Pasos Montecarlo.

3.1. Energía promedio. A continuación representamos, para diferentes tamaños y temperaturas los valores de la energía promedio obtenida a partir de la ecuación (7):

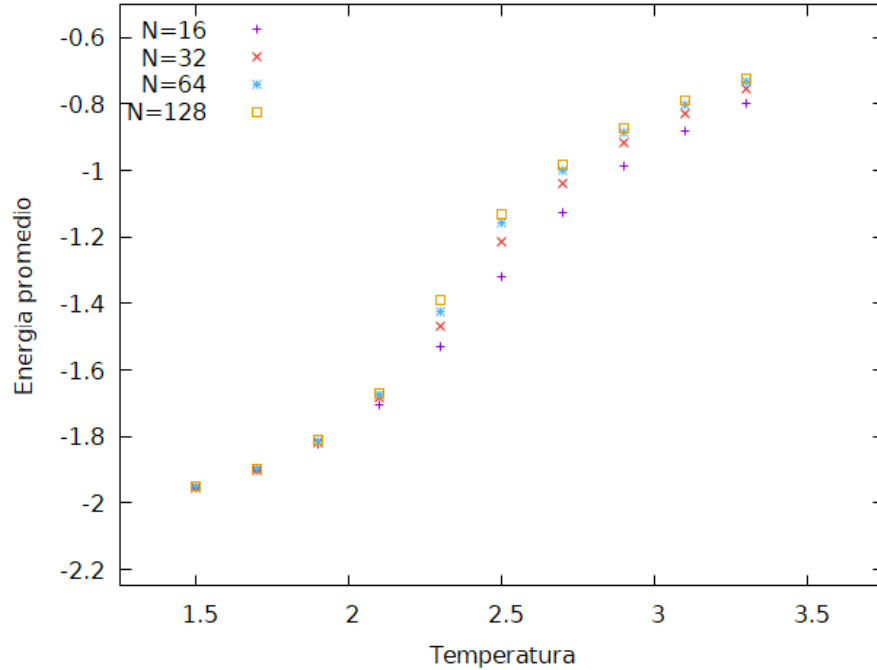


FIGURA 3. Representación de la energía promedio para diferentes redes en función de la temperatura.

Podemos observar que el tamaño de la red no afecta de forma significativa a los resultados obtenidos, que son muy similares entre sí, excepto en torno a la temperatura crítica, donde vemos

que existe cierta disparidad, pero no demasiada.

Un resultado teórico sería el de una red de tamaño tendiendo a infinito, pero no disponemos de potencia computacional suficiente para simularla, por lo que nos quedamos con que el resultado más cercano a la realidad debe ser el de la red con tamaño $N=128$.

3.2. Magnetización promedio. La magnetización es una forma de cuantificar el momento dipolar magnético neto de la estructura interna de un metal. Como estamos simulando un metal ferromagnético, vamos a obtener magnetizaciones no nulas por debajo de la temperatura crítica y magnetizaciones que caen a cero rápidamente (nula en el caso ideal de red infinita), por encima de esta. Si representamos las magnetizaciones calculadas con la fórmula (15) del anexo y ajustamos a la ley de potencias general (10) en el estado ferromagnético ($T < T_c$) obtenemos:

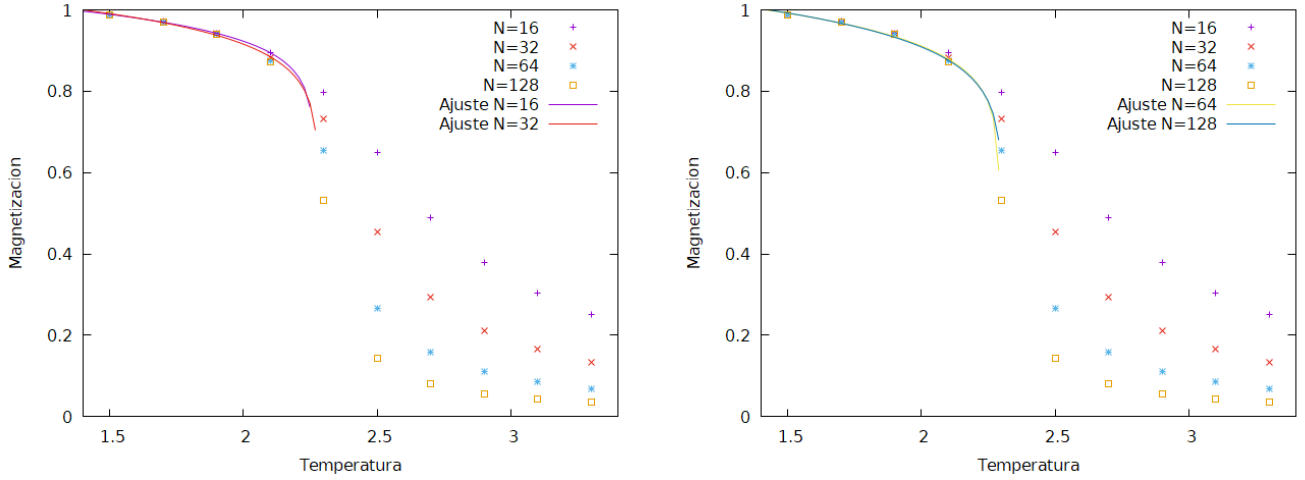


FIGURA 4. Representación de la magnetización calculada en función de la temperatura. En la izquierda se ve el ajuste para la red de 16x16 y 32x32 y en la derecha la de 64x64 y 128x128.

A partir de las expresiones de ajuste que se pueden encontrar en el anexo, podemos obtener una temperatura crítica y exponente crítico experimentales:

N	T_c	e	ϵ_{T_c} (%)	ϵ_e (%)
16	$2,2617 \pm 0,0027$	$0,0646 \pm 0,0016$	0.32	42.32
32	$2,278 \pm 0,004$	$0,077 \pm 0,004$	0.39	38.36
64	$2,2912 \pm 0,0026$	$0,085 \pm 0,006$	0.97	32
128	$2,3007 \pm 0,0009$	$0,090 \pm 0,008$	1.40	28

TABLA 2. Temperaturas y exponentes críticos para diferentes tamaños de red con sus errores absolutos.

Como podemos ver obtenemos un valor de temperatura crítica muy exacto, con un error máximo del 1 %. Sin embargo debemos notar que los errores para el exponente crítico es elevado (no tanto para la red de 128x128), pero este se va reduciendo conforme aumenta el tamaño de la red. Finalmente, si la red es infinita, sabemos que convergerá al resultado teórico, cosa que no podemos probar en este documento porque no disponemos de la potencia de computación requerida.

3.3. Susceptibilidad magnética promedio. La susceptibilidad magnética es una forma de cuantificar el grado de respuesta de un material a ser magnetizado por la presencia de un campo magnético.[6] Procedemos de la misma forma, solo que para cada tamaño esta vez vamos a ajustar a una curva de la forma:

$$\chi(T) = \frac{a}{T_c} \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^e \quad (11)$$

Finalmente obtenemos las siguientes curvas de ajuste (pueden encontrarse en el apartado anexos):

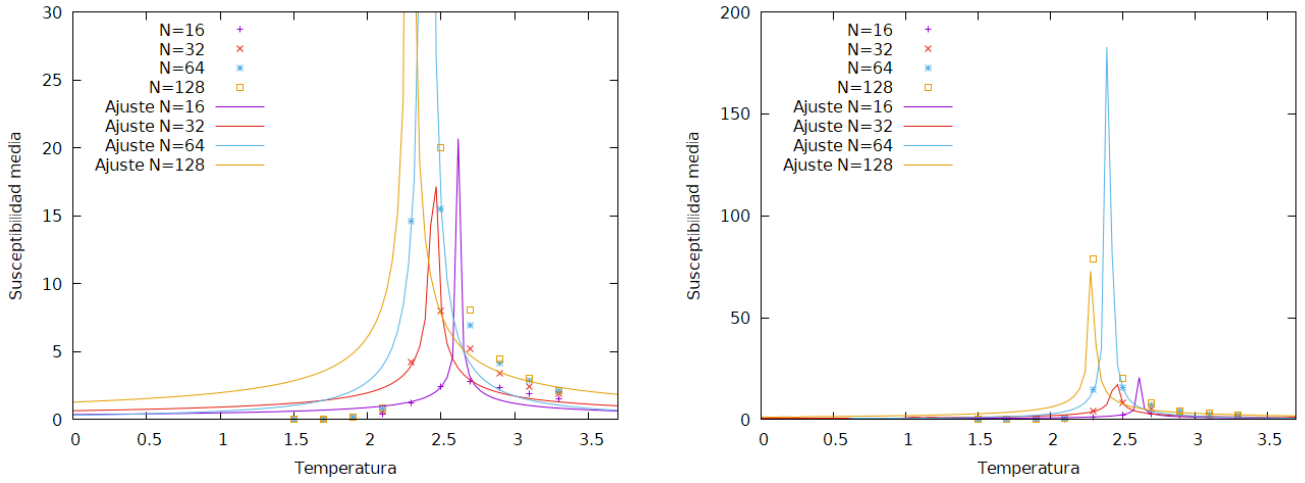


FIGURA 5. Representación de la susceptibilidad magnética en dos vistas diferentes. En las dos se incluyen las curvas que ajustan a todos los tamaños de red estudiados.

Nuevamente vamos a estudiar las temperaturas y exponentes críticos que hemos obtenido con los ajustes para cada tamaño:

N	T_c	e	ϵ_{T_c} (%)	ϵ_e (%)
16	$2,62 \pm 0,03$	$-0,60 \pm 0,21$	15	65
32	$2,45 \pm 0,004$	$-0,65 \pm 0,29$	8	62
64	$2,405 \pm 0,008$	$-1,21 \pm 0,24$	5.9	30
128	$2,290 \pm 0,026$	$-0,8 \pm 0,7$	0.9	54

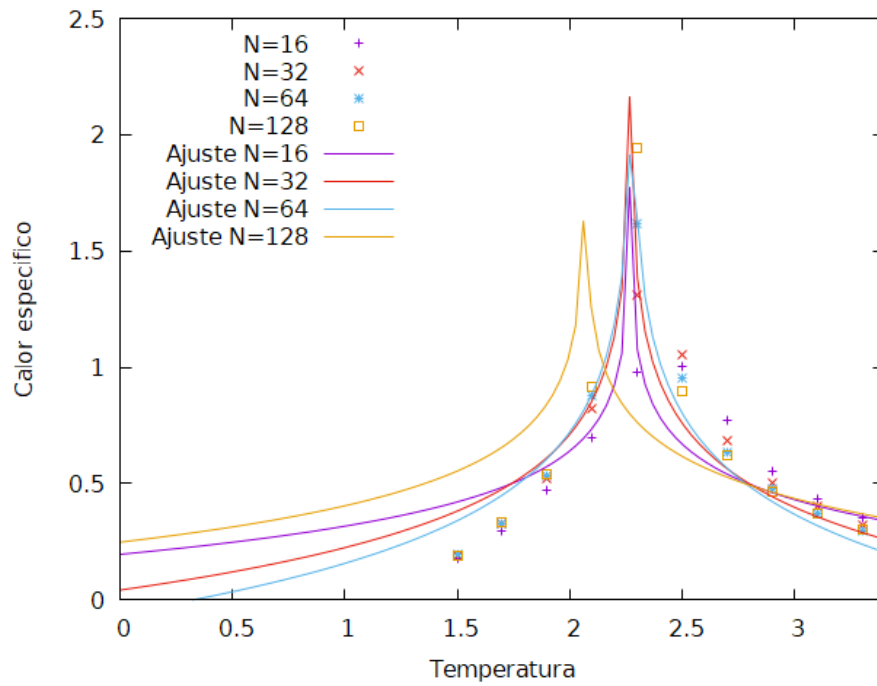
TABLA 3. Temperaturas y exponentes críticos para diferentes tamaños de red con sus errores absolutos.

Como vemos hemos obtenido errores algo elevados para el exponente crítico, sin embargo excelentes resultados para la temperatura crítica. Esto nos indica que ha habido algún tipo de error en el cálculo de datos que revisando el programa no he podido encontrar.

3.4. Calor específico promedio. El calor específico es una función termodinámica que indica la cantidad de calor que se le debe de aportar al sistema para elevar su temperatura en una unidad[8]. Podemos notar en la tabla (1) que el exponente crítico es nulo en este caso. A partir de [2] podemos ver que es posible realizar un estudio análogo si ajustamos los calores específicos obtenidos a las siguientes curvas:

$$C_N = a \cdot \ln \left(\left| \frac{T_c - T}{T_c} \right| \right) + e \quad (12)$$

Donde e es de nuevo el exponente crítico. Es por ello que cuanto más se acerque este valor en el ajuste a 0, más correcto habrá sido nuestro estudio. Ajustando y representando de forma análoga a las anteriores obtenemos:



A partir de los ajustes obtenidos obtenemos los valores que se nos piden:

N	T_c	ϵ_{T_c} (%)
16	$2,27 \pm 0,05$	0.04
32	$2,269 \pm 0,024$	0
64	$2,1 \pm 0,011$	0.35
128	$2,27 \pm 0,4$	7.44

TABLA 4. Temperaturas críticas para diferentes tamaños de red con sus errores absolutos.

No cabe ninguna duda que debe existir algún problema ya que como es apreciable el resultado empeora conforme aumenta el tamaño de la red, cosa que debería suceder al contrario. Sin embargo cabe destacar que los errores son del orden de 0.1 % y 1 %, cosa que no está mal del todo. Se debe mencionar también que el error en el exponente crítico es también elevado, tal y como puede verse en las curvas de ajuste en el apartado de anexos, aunque tampoco son excesivamente altos.

3.5. Función de correlación. Esta función establece un valor estadístico del orden de un sistema. El orden del sistema implicará como de relacionadas estarán entre si, en nuestro caso, las diferentes variables termodinámicas estudiadas. Este orden puede establecerse de forma temporal, especial y ambas a la vez. En nuestro caso nos restringiremos a una medida de una función de correlación espacial [9].

A partir de [9] podemos obtener el valor del exponente crítico en un entorno muy cercano a la temperatura crítica. La relación teórica establece:

$$f(i) \approx \frac{1}{i^\eta} \quad (13)$$

donde η es el exponente crítico que se quiere obtener e i es la distancia radial a la que se quiere estudiar la función. Si elegimos la red de 128x128 (la que en teoría debería arrojar mejores resultados), obtenemos:

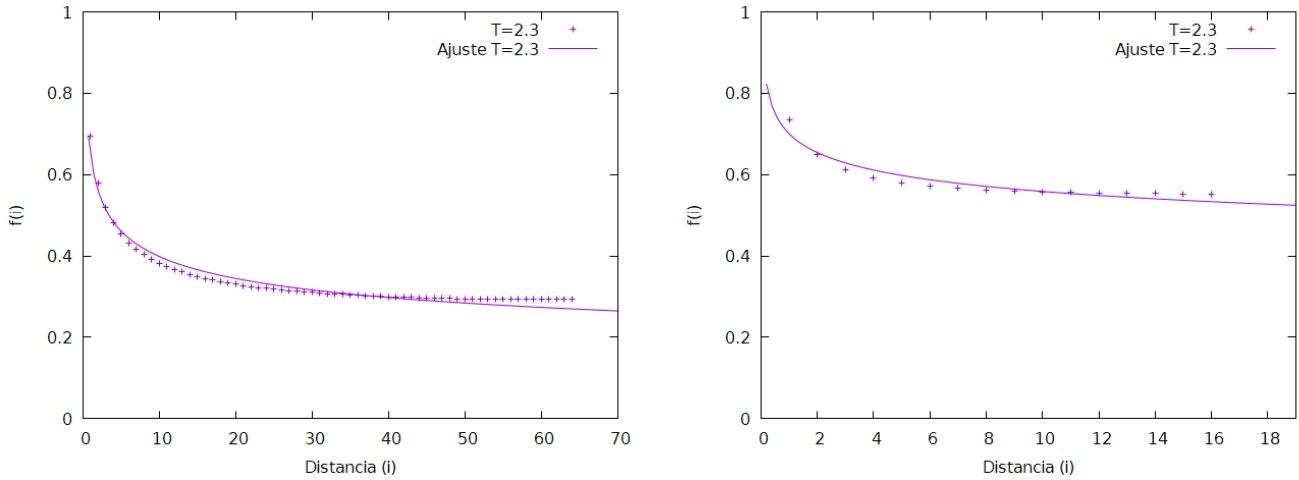


FIGURA 6. Representación y ajuste de la función de correlación para $T \approx T_c$, en concreto $T=2.3$ para la red de 128x128 (izquierda) y 32x32 (derecha)

Finalmente se ha obtenido un valor para el exponente crítico usando simplemente esta temperatura de $0,210 \pm 0,004$, lo que supone un error del 68 %. No es un dato demasiado bueno, síntoma de algún error que se está arrastrando durante el análisis. Es por ello que también se ha incluido en

el documento la obtención de este cociente para la red de 32x32, que hasta ahora nos ha arrojado resultados satisfactorios. Finalmente se ha obtenido un cociente crítico de $0,098 \pm 0,008$, lo que supone un error del 21 %, un resultado bastante más bueno que el anterior.

Se nos pide también un estudio de la longitud de correlación (ξ), que es la longitud radial promedio que establece el límite de influencia de los espines de la red sobre uno determinado. Para temperaturas, en general, alejadas del punto crítico se obtiene la siguiente relación teórica[9]:

$$f(i) \approx \frac{1}{i^\nu} e^{-i/\xi} \quad (14)$$

Es por esto que concluimos que la longitud de correlación va a ser función de la temperatura. Representando y ajustando cada función de correlación para cada temperatura, obtenemos:

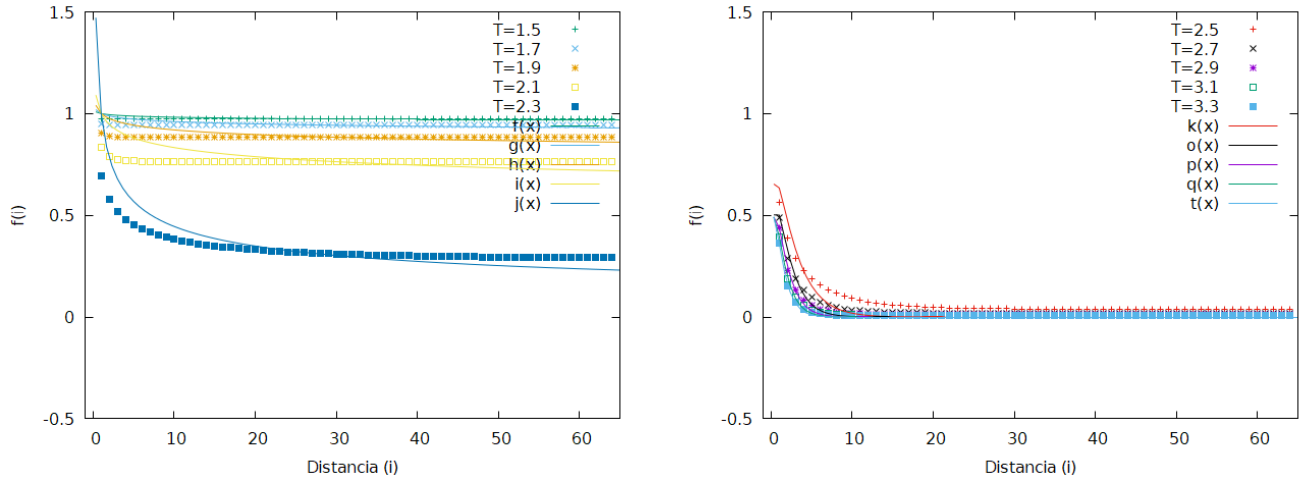


FIGURA 7. Representación y ajuste de la función de correlación para todas las temperaturas estudiadas.

Como se puede ver las funciones de correlación caen a cero una vez pasada la temperatura crítica, algo esperado ya que, como sabemos, se ha pasado del estado ferromagnético al paramagnético y el orden del sistema es cada vez menor. A partir de los ajustes hechos podemos obtener la longitud de correlación para cada temperatura:

T	ξ	T	ξ
1.5	$7,391E8 \pm 1,478E7$	2.5	$2,2 \pm 0,3$
1.7	$7,246E8 \pm 1,449E7$	2.7	$1,4 \pm 0,1$
1.9	$3,204E8 \pm 6,408E6$	2.9	$1,22 \pm 0,05$
2.1	$2,499E8 \pm 5,000E6$	3.1	$1,079 \pm 0,029$
2.3	$4,022E7 \pm 8,044E5$	3.3	$0,984 \pm 0,020$

Nuevamente hemos obtenido resultados coherentes con la teoría, hemos obtenido longitudes de correlacion de cientos de millones de unidades de longitud para temperaturas por debajo de la crítica, mientras que para temperaturas superiores hemos obtenido longitudes de pocas unidades de longitud e incluso de décimas de estas. Esto pone en evidencia las dos fases en la que se encuentra el metal a las diferentes temperaturas estudiadas (ferromagnética y paramagnética).

4. CONCLUSIONES.

En general podemos decir que hemos obtenido resultados satisfactorios, hemos obtenido a partir de diferentes funciones termodinámicas la temperatura crítica de un metal ferromagnético con errores no superiores en ningún momento del 20 %.

Sin embargo no podemos decir lo mismo de los exponentes críticos característicos de cada función termodinámica donde hemos obtenido errores más superiores. Es posible que estos errores hubiesen sido reducidos si se hubiesen tomado más medidas de todas las funciones estudiadas en el documento de temperaturas más cercanas a la crítica, ya que este punto es funcionalmente muy conflictivo.

También cabe notar es posible que algo no se esté haciendo del todo bien ya que evaluando algunas de las funciones hemos tenido errores superiores en la red de 128x128 que en la de 64x64, síntoma de que algo no va del todo bien.

Para terminar, añadir que estas incongruencias tampoco son gravísimas teniendo en cuenta que el conocimiento sobre el tema que se tenía antes de redactar el documento eran muy escasos por no decir nulos, y se ha obtenido en todo caso resultados muy coherentes y concordes con la teoría.

5. ANEXOS.

5.1. Expresiones utilizadas.

· Calor específico:

$$m_N = \left\langle \frac{1}{N^2} \left| \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N s(i, j) \right| \right\rangle \quad (15)$$

$$c_N = \frac{1}{N^2 T^2} [\langle E(S)^2 \rangle - \langle E(S) \rangle^2] \quad (17)$$

· Magnetización promedio:

· Función de correlación:

· Energía media:

$$e_N = \frac{\langle E(S) \rangle}{N^2} \quad (16)$$

$$f(i) = \frac{1}{N^2} \sum_{(n,m)} \langle s(n, m) s(n + i, m) \rangle \quad (18)$$

5.2. Curvas de ajuste para la magnetización promedio.

N	Ecuación
16	$f(T) = 1,06095 * \frac{2,26172-T}{2,26172}^{0,0646314}$
32	$f(T) = 1,07588 * \frac{2,27774-T}{2,27774}^{0,0766703}$
64	$f(T) = 1,08484 * \frac{2,29118-T}{2,29118}^{0,0845324}$
128	$f(T) = 1,09093 * \frac{2,30077-T}{2,30077}^{0,0897772}$

5.3. Curvas de ajuste para la susceptibilidad magnética promedio.

N	Ecuación
16	$f(T) = \frac{0,975541}{2,61954} * \frac{T-2,61954}{2,61954}^{-0,603742}$
32	$f(T) = \frac{1,60725}{2,45059} * \frac{T-2,45059}{2,45059}^{-0,649293}$
64	$f(T) = \frac{0,775508}{2,40453} * \frac{T-2,40453}{2,40453}^{-1,20736}$
128	$f(T) = \frac{2,95084}{2,29042} * \frac{T-2,29042}{2,29042}^{-0,750848}$

5.4. Curvas de ajuste para el calor específico medio.

N	Ecuación
16	$f(T) = -0,207976 * \ln(abs(\frac{2,26781-T}{2,26781})) + 0,196328$
32	$f(T) = -0,313994 * \ln(abs(\frac{2,2693-T}{2,2693})) + 0,0426839$
64	$f(T) = -0,369504 * \ln(abs(\frac{2,27763-T}{2,27763})) - 0,056101$
128	$f(T) = -0,23629 * \ln(abs(\frac{2,06656-T}{2,06656})) - 0,248635$

6. BIBLIOGRAFIA.

1. Simulación del modelo de Ising con el método de Monte Carlo, Gelover-Santiago, Angélica L.
2. Una revisión del modelo de Ising y su aplicación en sociología a través del modelo de Sznajd. Asier García Berdote.
3. Acoplamiento spin-red en el modelo de Ising en dos dimensiones. Lucas Pili.
4. Cadena de Márkov. Wikipedia.
5. Diapositivas de teoría de ergodic.ugr.es/cphys.
6. Voluntario 1.- Modelo de Ising. Alicia Amat Rodríguez.
7. Susceptibilidad magnética. Wikipedia.
8. Calor específico. Wikipedia.
9. Función de correlación (mecánica estadística). Wikipedia.