

Simulación MC Modelo de Ising

Julio A. Medina
Universidad de San Carlos
Escuela de Ciencias Físicas y Matemáticas
Maestría en Física
julioantonio.medina@gmail.com

Resumen

En mecánica estadística el Modelo de Ising para la modelación teórica de un material ferromagnético consiste en considerar las interacciones de corto rango del momento dipolar magnético de spins moleculares. Los spins se configuran en un retículo n -dimensional y están discretizados.

1. Introducción

El modelo de Ising es el arquetipo para modelar el comportamiento de materiales ferromagnéticos y las transiciones de fase que puede darse en este tipo de materiales, particularmente el fenómeno de transición para-ferromagnética. Esto se puede observar fácilmente al tomar una pieza de hierro previamente magnetizado por algún campo magnético suficientemente grande para generar un imán temporal, al acercar este pedazo imantado a una fuente de calor se puede observar como rápidamente se pierden las propiedades magnéticas.

1.1. Transiciones de fase

Las transiciones de fase y los fenómenos críticos (*critical phenomena*) están asociados a una gran variedad de sistemas físicos: Fluidos simples y mezclas de fluidos, materiales magnéticos, ferromagnetos, superfluidos, superconductores y otros. La tesis doctoral de van der Waals(1873) fue la primer teoría exitosa para explicar la continuidad de los estados líquidos y gaseosos de la materia. La transición al ferromagnetismo también fue explicada a principios del siglo XX por una teoría fenomenológica propuesta por Pierre Curie y desarrollada por Weiss que está íntimamente relacionada a la teoría de van der Waals. Estas son conocidas como teorías clásicas de transición de fase y todavía se usan para describir algunos aspectos cualitativos de todo tipo de sistemas.

Estas teorías clásicas fueron sometidas a un proceso de análisis más riguroso en los años 60's. Varias cantidades termodinámicas como el calor específico, la compresibilidad y la susceptibilidad magnética presentan un comportamiento peculiar en la llamada región crítica, con divergencias asintóticas caracterizadas por una colección de exponentes críticos. Rápidamente se reconoció que el comportamiento crítico de las cantidades termodinámicas equivalentes, exhiben una caracterización universal que se puede describir por los bien definidos exponentes críticos.

1.1.1. Fenomenología de Landau

La teoría de Landau para transiciones de fases continuas se basa en la expansión de la energía libre en términos de las invariantes de los parámetros de orden. Por lo que se asume que la energía libre es una función analítica, incluso en la vecindad de un punto crítico. En muchos casos es relativamente sencillo encontrar un número aceptable de parámetros de orden asociados a una transición de fase. El parámetro de orden no es siempre un escalar, puede ser incluso un tensor para sistemas complejos. Generalmente se tiene que $\psi = 0$ en la fase con mayor simetría que usualmente se presenta a altas temperaturas en la fase desordenada, y $\psi \neq 0$ en la fase menos simétrica, mas ordenada.

Hay varios ejemplos de estos parámetros de orden:

- La transición de liquido-gas, donde ψ viene dado por $v_G - v_L$ o por $\rho_L - \rho_G$ (v es el volumen específico y ρ es la densidad de partículas)
- La transición para-ferromagnética en la cual el parámetro de orden ψ puede ser el vector de magnetización (que se convierte en un escalar para sistema uni-axiales como en el modelo de Ising) en la ausencia de un campo aplicado.
- La transición anti-ferromagnética en la cual el parámetro de orden ψ se puede asociar a la magnetización del sub-retículo.

La lista no es exhaustiva. Para un fluido puro, el parámetro de orden es un escalar y se puede escribir la expansión

$$g(T, p; \psi) = g_0(T, p) + g_1(T, p)\psi + g_2(T, p)\psi^2 + g_3(T, p)\psi^3 + g_4(T, p)\psi^4 + \dots, \quad (1)$$

donde los coeficientes g_n son funciones de los campos termodinámicos T y p . Para obtener un punto crítico simple, es suficiente que g_4 sea positivo, esto garantiza la existencia de un mínimo con respecto a ψ , por lo que se omiten términos de orden superior en la expansión de Landau. Debido a que se tiene alguna libertad para escoger ψ , siempre es posible eliminar el término cúbico en la expansión (ver [2]). Por lo que sin pérdida de generalidad, se puede escribir la expansión como

$$g(T, p; \psi) = A_0(T, p) + A_1(T, p)\psi + A_2(T, p)\psi^2 + \psi^4 \quad (2)$$

para tener un mínimo estable, los coeficientes A_1 y A_2 tienen que ser cero en el punto crítico, sin embargo es importante mencionar que la existencia de dicha expansión no puede darse por sentada, siendo la solución analítica del modelo bidimensional de Ising un conocido contraejemplo.

Para un ferromagneto uniaxial, se tiene una expansión de Landau más simple (debido a la simetría), por lo que la energía libre de Helmholtz se puede escribir como

$$f(T, m) = f_0(T) + A(T)m^2 + B(T)m^4 + \dots \quad (3)$$

con esto se obtiene

$$g(T, H, m) = f_0(T) - Hm + A(T)m^2 + B(T)m^4 + \dots \quad (4)$$

En el punto crítico se tiene que $H = 0$ y $A(T) = 0$, en la vecindad del punto crítico se puede escribir

$$A(T) = a(T - T_c) \quad (5)$$

con $a > 0$, $B(T) = b > 0$, y $f_0(T) \approx f_0(T_c)$. Por lo que se puede escribir

$$g(T, H, m) = f_0(T_c) - Hm + a(T - T_c)m^2 + bm^4. \quad (6)$$

1.2. Modelo de Ising

La mayoría de experimentos en la vecindad de los puntos críticos indican que los exponentes críticos asumen valores universales, que difieren bastante de las teorías clásicas (un ejemplo se presenta en la fenomenología de Landau). Ahora se ha reconocido que los valores de los exponentes críticos dependen de solo unos cuantos ingredientes:

- La dimensión de los sistemas físicos.
- La dimensión de los parámetros de orden. Para ferromagnetos uniaxiales el parámetro de orden es un escalar.
- El rango de las interacciones microscópicas.

Debido al comportamiento universal de los exponentes críticos, es suficiente analizar sistemas simples más no triviales como es el caso del modelo de Ising. El modelo de Ising considera las interacciones ferromagnéticas entre las moléculas de un material como un modelo discreto, esto consiste en asignar un valor discreto a la orientación relativa del momento dipolar magnético (spin), se asigna $+1$ a una orientación paralela al eje y en el retículo formado por las posiciones discretizadas de las moléculas. ver fig. 1. y se le asigna -1 a la orientación anti-paralela.

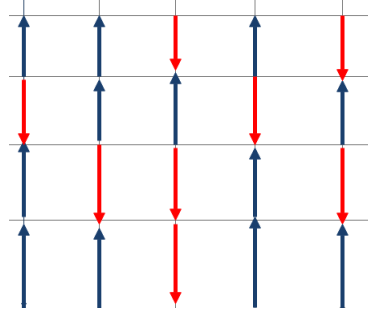


Figura 1: Retículo de spins

Se considera en el análisis la interacción entre spines vecinos σ_i , donde $\sigma_i = \pm 1$ representa el spin en la posición (x, y) del retículo, la fuerza de la interacción entre vecinos se rige por una constante J de modo que el Hamiltoniano del sistema se puede escribir de la siguiente manera.

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (7)$$

donde H es un campo magnético externo aplicado a la región donde se encuentra el retículo de moléculas, N es el número total de moléculas en el retículo

y la energía J se puede interpretar como un parámetro cuántico de interacción electrostática, en la primera sumatoria se hace la observación que $\langle ij \rangle$ significa la suma de las interacciones de los vecinos más cercanos (vecinos próximos), estos son por ejemplo si se toma a la posición (x, y) sus vecinos serían $(x, y + 1)$, $(x, y - 1)$, $(x - 1, y)$, $(x + 1, y)$, los vecinos se pueden ver en color azul en la fig 2. y la posición (x, y) se aprecia en color rojo. El primer término de 7 representa la energías de interacción introducidas para llevar a un estado ferromagnético ordenado, el segundo término representa la interacción entre el campo magnético aplicado H y los spines del sistema esta interacción es de carácter puramente paramagnético.

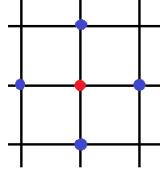


Figura 2: Vecinos mas cercanos

Tomando el caso en el que $H = 0$ la ecuación 7 se convierte en

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad (8)$$

Para resolver el problema de Ising se tiene que encontrar la función de partición canónica

$$Z(T, H, N) = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp(-\beta \mathcal{H}) \quad (9)$$

con $\beta = \frac{1}{K_B T}$, K_B es la constante de Boltzmann, y T es la temperatura en Kelvins. De esta función de partición se tiene que la energía libre por sitio viene dada por

$$g = g(T, H) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[-\frac{1}{\beta N} \ln Z_N \right] \quad (10)$$

En una dimensión es relativamente sencillo obtener una expresión para esta energía libre, por ejemplo por medio la técnica de matrices de transferencia, que también puede usarse en dimensiones mayores, para obtener una solución a la cadena de Ising. Sin embargo esta solución es engañosa como fue demostrado por Ising(1925) ya que al ser una función analítica de T y H prohíbe la existencia de magnetización espontánea y de cualquier transición de fase.

Varias técnicas de aproximación han sido desarrolladas para resolver el modelo de Ising en 2 y 3 dimensiones, algunas de ellas bastante sencillas y útiles que conducen a resultados cualitativos razonables para diagramas de fase. Como se mencionó, las transiciones de fase se asocian al comportamiento no-analítico de la energía libre en el límite termodinámico, como consecuencia se debe tener cautela al utilizar truncaciones o expansiones perturbativas alrededor del punto crítico.

Lars Onsager(ver [4], [3], [1]) encontró una solución analítica analítica al modelo de Ising para un retículo cuadrado, con iteraciones de vecinos próximos en la ausencia de campo externo($H = 0$), 8. Para $T \rightarrow T_c$ el calor específico diverge acuerdo a la forma logarítmica asintótica

$$cH = 0 \sim \ln |T - T_c|, \quad (11)$$

con una temperatura crítica bien definida

$$T_c = \frac{2J}{K_B \ln(1 + \sqrt{2})} \quad (12)$$

1.3. Solución Exacta Modelo de Ising en 1D

En una dimensión se tiene que el Hamiltoniano 7 se convierte en

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - H \sum_l \lim_{s \rightarrow 0} s_{i=1}^N \sigma_i \quad (13)$$

La función de partición viene dada por

$$Z_N = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left[K + \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{L}{2} \sum_{i=1}^N (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right], \quad (14)$$

donde $K = \beta J$, $L = \beta H$ y el segundo término se ha reescrito tomando ventaja de una forma más simétrica, por conveniencia se toman condiciones de frontera periódicas, i.e. $\sigma_{N+1} = \sigma_1$

2. Metodología

2.1. Método de Monte Carlo

2.1.1. Ecuación maestra

Se introduce lo que se conoce como ecuación maestra(ver [?]) para la evolución temporal de procesos estocásticos Markovianos. Si $P(x, t)$ es la probabilidad de encontrar un sistema en el estado microscópico y , en el tiempo t . Derivando esta probabilidad se tiene

$$\frac{\partial}{\partial t} P(y, t) = T_0 - T_f \quad (15)$$

donde la tasa de probabilidad de cambiar al estado y esta dada por

$$T_0 = \sum_{y'} P(y', t) w(y' \rightarrow y) \quad (16)$$

donde $w(y' \rightarrow y)$ puede ser interpretado como la probabilidad que el sistema pase del estado y' al estado y en un intervalo de tiempo muy pequeño. Análogamente la tasa de probabilidad de cambio $y \rightarrow y'$ esta dada por

$$T_f = P(y, t) \sum_{y'} w(y \rightarrow y') \quad (17)$$

La ecuación maestra se convierte en

$$\frac{\partial}{\partial t}P(y, t) = \sum_{y'} \left[P(y', t)w(y' \rightarrow y) - P(y, t)w(y \rightarrow y') \right] \quad (18)$$

Para un estado estacionario $P(y, t)$ no es una función explícita del tiempo, por lo que para el equilibrio se tiene

$$\frac{\partial}{\partial t}P(y, t) = 0 \quad (19)$$

Entonces se tiene la siguiente condición de equilibrio llamado principio de balance detallado

$$P(y', t)w(y' \rightarrow y) = P(y, t)w(y \rightarrow y') \quad (20)$$

2.1.2. Metodo de Monte Carlo

El estudio de sistemas en equilibrio en mecánica estadística esta interesado en el calculo de promedios de la forma

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_C A(C) \exp(-\beta \mathcal{H})}{\sum_C \exp(-\beta \mathcal{H})} \quad (21)$$

donde la suma indica que se toman en cuenta todas las posibles configuraciones microscópicas del sistema asociado con el Hamiltoniano \mathcal{H} , para el caso del modelo de Ising 2D se tiene un retículo de $N = n \times n$ sitios, esto significa que la suma en 21 se hace sobre $2^N = 2^{n^2}$ configuraciones. El hecho que el numero de configuraciones crece como 2^{n^2} hace que no sea práctico utilizar este tipo de expresión para realizar cálculos numéricos. La solución consiste en realizar promedios sobre un numero mucho mas pequeño de las configuraciones de equilibrio mas representativas del sistema,

$$\langle A \rangle = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M A_i \quad (22)$$

Es importante saber bajo que condiciones se puede realmente obtener el valor esperado de la cantidad A de este promedio aritmético sobre las configuraciones representativas M , también es importante saber como seleccionar el numero M de configuraciones representativas.

De acuerdo con el método de Monte Carlo se selecciona una secuencia de configuraciones independientes, estas se denominan cadenas de Markov. Algunas de las configuraciones iniciales están lejos del equilibrio pero como función del tiempo se generan muchas mas configuraciones de equilibrio que son utilizadas para promediar 22.

Como ya fue discutido si se identifica a $w(y \rightarrow y')$ como la probabilidad de transición por unidad de tiempo del estado y a y' se tiene a la ecuación maestra 18 y la condición 20.

En equilibrio, esto es después de tomar en cuenta varios términos de la secuencia las probabilidades deberían tender a los valores de Gibbs,

$$P_0(y) = \frac{1}{Z} \exp[-\beta \mathcal{H}(y)] \quad (23)$$

donde Z la función de partición canónica esta definida en 9. De la condición 20 se tiene

$$P_0(y)w(y \rightarrow y') = P_0(y')w(y' \rightarrow y) \quad (24)$$

. Se escogen probabilidades que satisfacen

$$\frac{w(y \rightarrow y')}{w(y' \rightarrow y)} = \exp(-\beta\Delta\mathcal{H}) \quad (25)$$

donde $\Delta\mathcal{H} = \mathcal{H}(y') - \mathcal{H}(y)$ es la diferencia de energías entre las configuraciones y y y' .

Otras dos probabilidades de transición utilizadas en las simulaciones de monte Carlo son el algoritmo de Glauber y la prescripción de Metropolis, en esta simulación se ha escogido a la prescripción de Metropolis,

$$w(y \rightarrow y') = \begin{cases} \frac{1}{\tau} \exp(-\beta\Delta\mathcal{H}), & \Delta\mathcal{H} > 0 \\ \frac{1}{\tau}, & \Delta\mathcal{H} < 0 \end{cases} \quad (26)$$

donde el tiempo τ se interpreta como "step de Monte Carlo", se ha escogido $\tau = 1$.

2.1.3. Método de Monte Carlo para el Modelo de Ising

Se presentan a continuación los pasos del método de Monte Carlo y el diagrama de flujo para generar la cadena de Markov.

1. Escoger una configuración inicial de spins en el retículo.
2. Se selecciona un sitio al azar y se calcula la energía en ese sitio para las interacciones con los vecinos mas cercanos.
3. Verificar el signo de E .
4. Si E es positiva se hace el cambio de spin en el sitio indicado, esto es $\sigma_i = -\sigma_i$.
5. Si E es negativa pero $\exp(-\beta\Delta\mathcal{H}) > p_t$, donde p_t es un numero aleatorio entre 0 y 1, se cambia al spin, de otra manera se reinicia el ciclo.

con estos pasos se hace una simulación de MC con la prescripción de Metropolis.

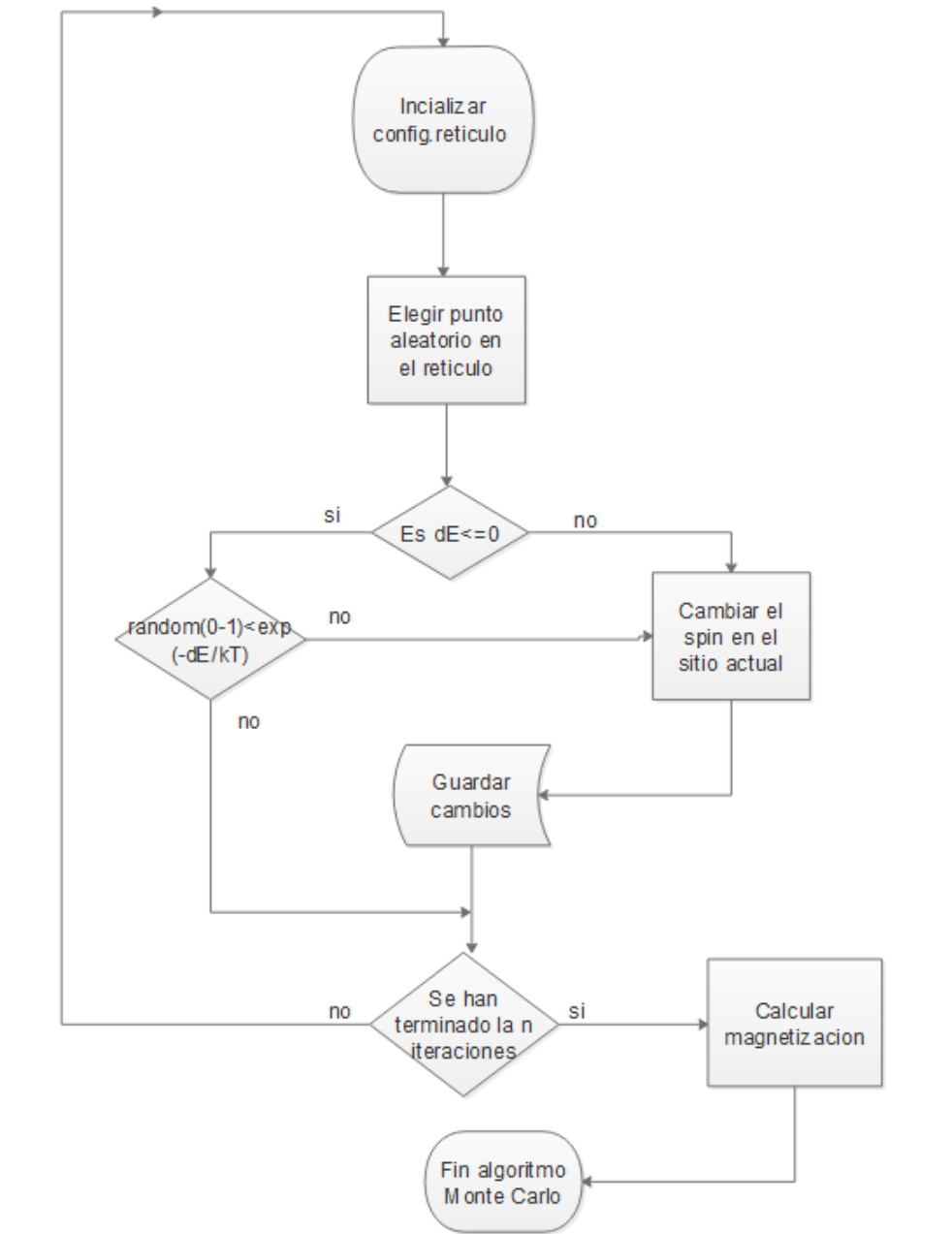


Figura 3: Diagrama de flujo

2.2. Tiempos de cómputo

Para poder describir el tiempo de cómputo de la implementación realizada del método de Monte Carlo con la prescripción de Metropolis se corren distintos tipos de simulaciones para poder analizar el comportamiento del tiempo de

cómputo con respecto a la variación de otro parámetro

2.2.1. Tamaño del retículo

Para poder analizar el comportamiento del tiempo de cómputo en función del tamaño del retículo se hace una simulación para un rango de tamaño de retículos de $N \in [10 - 500]$ con un intervalo de 10 entre cada simulación. En la siguiente figura se puede apreciar como el tiempo de cómputo incrementa exponencialmente en función de N . Se hace la observación que para se tiene un retículo de $N \times N$, para está simulación el número de iteraciones de Monte Carlo se mantiene fija, $n = 10000$

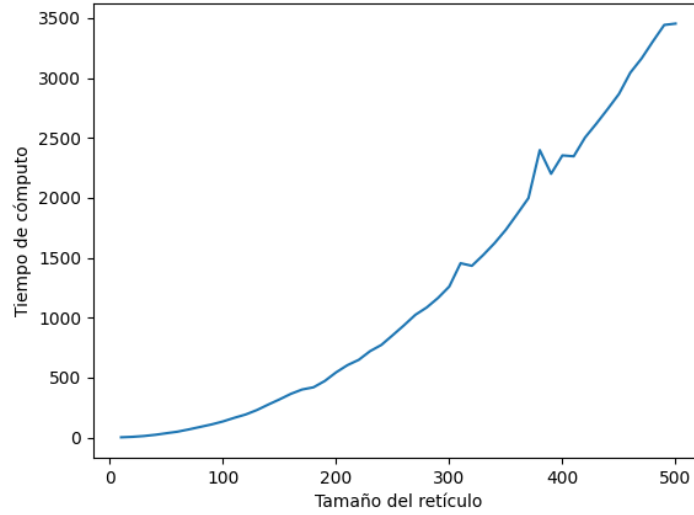


Figura 4: Tiempo(s) vrs. N

2.2.2. Temperatura

De nuevo para analizar el comportamiento del tiempo de cómputo se realizó una simulación con un tamaño de retículo fijo $N = 50$, pero se varia la temperatura en un rango de $T \in [1 - 100]$, en este caso también se fija el número de iteraciones de Monte Carlo en $n = 10000$, se hace la importante observación que en todas las simulaciones se usan unidades de física teórica en las que $K_B = 1$

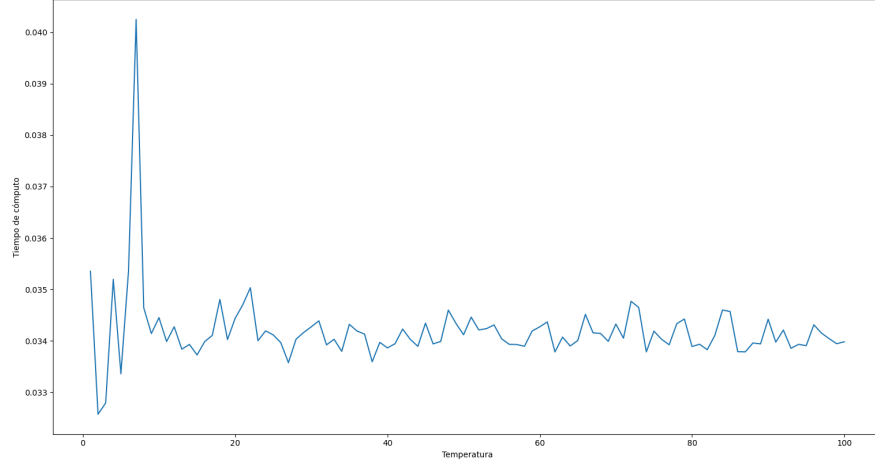


Figura 5: Tiempo(s) vrs. Temperatura

El tiempo de computo para n (número de iteraciones) y N (tamaño del retículo) y una temperatura variable se mantiene constante, esto es consistente con la implementación del algoritmo de Monte Carlo para el modelo de Ising. Durante esta simulación también se registró como se comporta la magnetización promedio por sitio cuando se hace variar la temperatura, en este caso se puede ver una transición de fase, i.e. se empieza con un material magnetizado que después de una temperatura crítica llega a estar totalmente desmagnetizado, transición ferro-paramagnética.

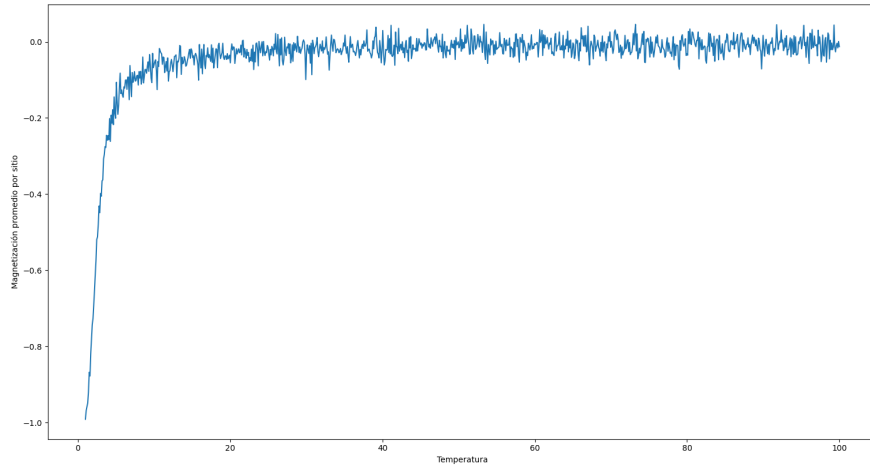


Figura 6: Magnetización vrs. Temperatura

2.2.3. Iteraciones de Monte Carlo

Otro parámetro de interés para evaluar el tiempo de cómputo es el número de iteraciones de Monte Carlo utilizadas durante la simulación, en este caso se hace variar $n \in [100, 10000]$, con un tamaño de retículo fijo $N = 50$ y temperatura $T = 5$, en este caso el tiempo de cómputo es lineal como se puede apreciar el gráfico

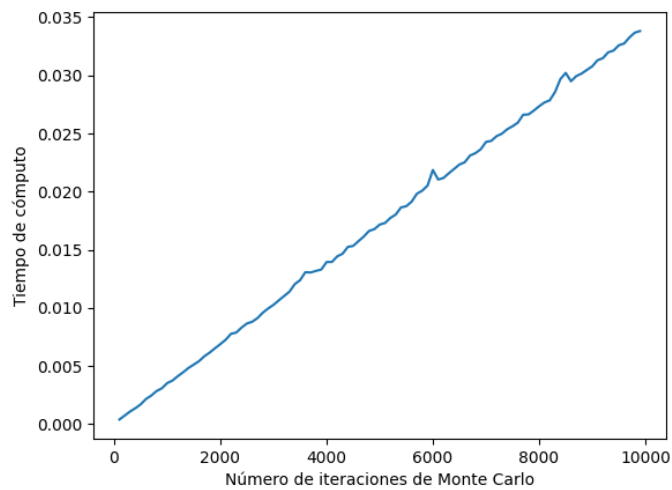


Figura 7: Tiempo(s) vrs. no. iteraciones

3. Resultados

Para poder evaluar el comportamiento del algoritmo de Monte Carlo se puede usar la magnetización promedio, en este caso es interesante ver como el comportamiento del parámetro J que mide describe como se comportan las interacciones entre spins y H la intensidad del campo magnético externo aplicado en el Hamiltoniano 7, afectan en la simulación numérica del modelo de Ising, también es de interés ver como J/H afecta el comportamiento en general .

Para el caso en el que $H = 0$ se tiene el Hamiltoniano 8 en este caso cuando no hay mas interacción que la que se tiene por los efectos entre spins, para este caso se hace una simulación con $J = 1$ el tamaño del retículo es $N = 50$ es decir que se tienen $N \times N = 250$ sitios, la temperatura varia en un rango $T \in [0, 10]$ y se tienen $n = 10000$ iteraciones de Monte Carlo, se escoge a estado aleatorio del retículo como el estado en el que todos los spins tiene valor $\sigma_i = -1$ es decir que el material ferromagnético esta totalmente magnetizado.

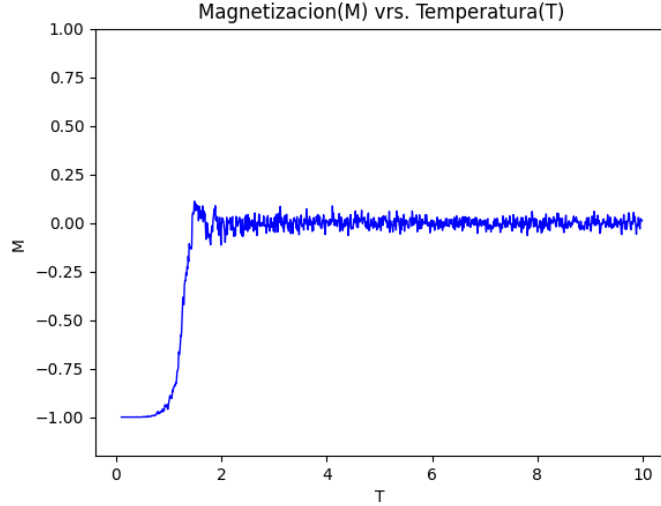


Figura 8: Magnetización vrs. Temperatura

En este caso se puede observar claramente como después de cierta temperatura crítica se observa una transición de fase en el material ferromagnético, una vez alcanzando el equilibrio solo se tienen pequeñas fluctuaciones alrededor de una magnetización $M = 0$. Para las mismas condiciones que en el caso anterior pero con la diferencia que ahora se tiene el estado aleatorio escogido para iniciar la simulación es en el que todos los spins $\sigma_i = +1$

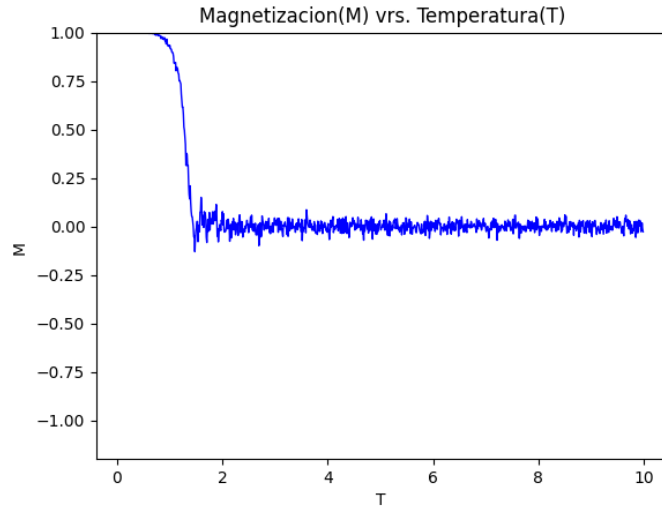


Figura 9: Magnetización vrs. Temperatura

se obtiene el resultado esperado, se inicia con un material ferromagnético magnetizado que tiene una transición a un estado sin propiedades magnéticas. Para el caso en el $J/H = 1$ y se empieza en el estado en el que todos los spins $\sigma_i = +1$ se obtiene el siguiente resultado

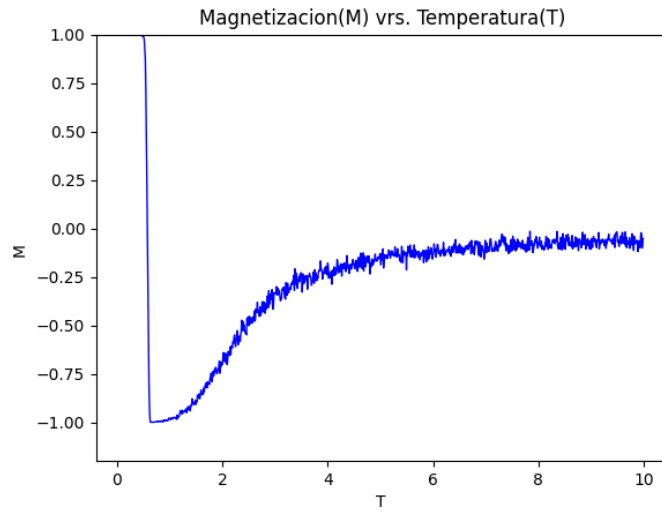


Figura 10: Magnetización vrs. Temperatura

En este caso se puede ver claramente la influencia del campo magnético externo H , ya que el sistema tiende a alinearse con este para después empezar a pa-

sar totalmente al desorden característico de la transición de fase. En el repositorio de GitHub https://github.com/Julio-Medina/Ising_Model/tree/main se pueden encontrar animaciones de estos procesos.

En el caso en que $J/H = \frac{1}{10}$ se obtiene el siguiente resultado en el que $T \in [0, 1, 50]$

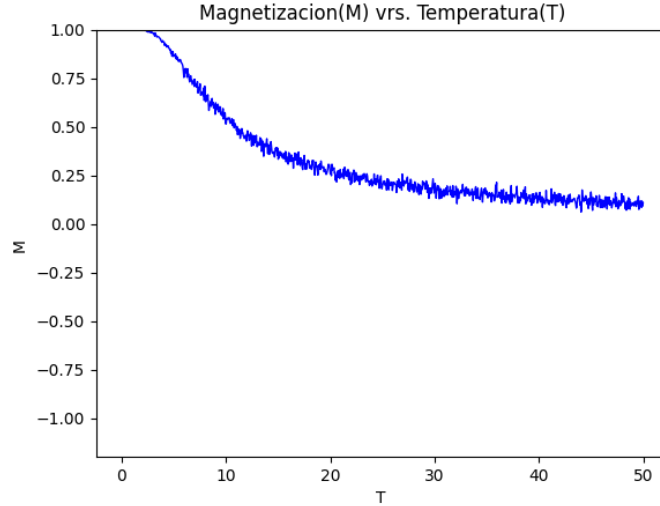


Figura 11: Magnetización vrs. Temperatura

En este caso también se puede ver el efecto que tiene $H \neq 0 > J$ de incrementar la temperatura crítica T_c por lo que se necesita simular el sistema a mayores temperaturas para ver la transición de fase, es importante notar que en este caso la temperatura T_c tiene un incremento aproximado de un factor de 10, esto es consistente con la solución analítica del modelo de Ising 12.

4. Conclusiones

El método de Monte Carlo es una buena opción para encontrar el comportamiento aproximado del modelo de Ising, a través de la prescripción de Metropolis. En general se observaron las transiciones de fase esperadas, de un estado ferromagnético a uno paramagnético, ver figuras

Referencias

- [1] R.J. Baxter *Exactly solved models in statistical physics*. Academic Press. First Edition.
- [2] Silvio R.A Salinas. *Introduction to Statistical Physics*. Springer. First Edition.

- [3] Lars Onsager. *Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition*. Phys. Rev 65, 117, 1944. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.65.117>
- [4] R.K. Pathria *Statistical Mechanics*. Elsevier.Third Edition.