

Física Computacional

Voluntario 1:

Simulación del modelo de Ising
con la dinámica de Kawasaki



Resumen

En este trabajo se estudia el modelo de Ising a través de la dinámica de Kawasaki. Los resultados muestran cómo la dinámica de intercambio de espines influye en la formación de dominios magnéticos y en la evolución hacia el equilibrio térmico en función del número de pasos Monte Carlo. Además, se estudió la magnetización no nula para comprender mejor las transiciones de fase en el modelo de Ising. Todos los plots y programa usados se pueden encontrar en el repositorio de GitHub: Kawasaki.

Antonio B. Marín Carballo
Grado en física

Índice

1	Dinámica del modelo.	1
1.1	Temperatura de equilibrio: 1K.	1
1.2	Temperatura crítica: T_c	2
1.3	Temperatura superior a T_c : T=5 K.	3
2	Magnetización.	4
3	Densidad media de partículas por columna.	6
4	Energía media por partícula.	8
5	Densidad promedio en direccion y	10
6	Magnetización no nula.	11
6.1	Dinámica para magnetización no nula.	12
6.2	Magnetización no nula y la temperatura crítica	13
7	Conclusión	15
A	Densidad promediada entre todas las columnas	16

1. Dinámica del modelo.

Simular para varios valores de la temperatura la dinámica de este modelo. Representar varios fotogramas asociados a varias temperaturas.

Para esta sección se fija un valor de espines de $N=32$, para facilitar la convergencia. Se empezó con magnetización nula, que no es más que colocar el mismo número de espín $+1$ que de espín -1 , además se fijaron los espines en los bordes de la dirección “y”, para facilitar la observación de los dominios magnéticos, obteniendo las siguientes condiciones iniciales: A continuación se muestran

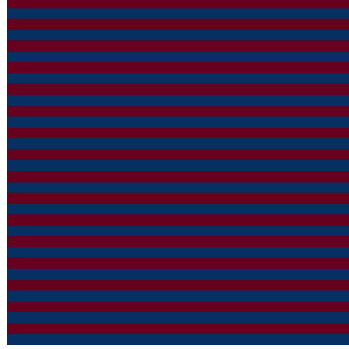


Figura 1: Condiciones iniciales: Magnetización nula, espines en 'y' fijos.

fotogramas asociados a diferentes temperaturas:

1.1. Temperatura de equilibrio: 1K.

Para $T=1$ K, se observa que a mayor número de pasos montecarlo, el sistema evoluciona más hacia el estado de equilibrio, caracterizado por la formación de dominios magnéticos, zonas donde todos los espines están alineados, $+1$ o -1 . A continuación se desglosa cada una de las tres figuras:

- Para la figura 2, donde solo se ha dejado evolucionar al sistema 1000 pasos Montecarlo, se ve como la fragmentación y la dispersión de los dominios indican que el sistema está en las primeras etapas de la evolución hacia el equilibrio. Se están comenzando a redistribuir los espines, hacia el estado de energía más favorable, pero aún falta tiempo para observar dominios más definidos.

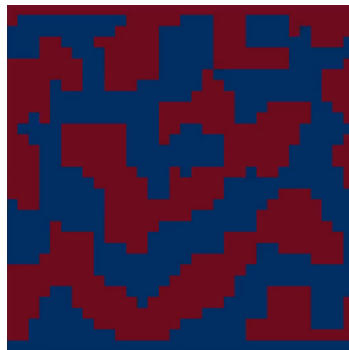


Figura 2: $T=1$, 1000 Pasos MC.

- Para la figura 3, se ve como para 100000 pasos Montecarlo resultan suficientes para que los espines hayan tenido múltiples interacciones, resultando en la consolidación de dominios en áreas más grandes. El sistema está más cerca del equilibrio, aunque aún podría haber más reestructuración y crecimiento de dominios con más pasos.



Figura 3: $T=1$, 100000 Pasos MC.

- Para la figura 4, donde se ha dejado evolucionar el sistema para un millón de pasos Montecarlo, se ven grandes dominios en forma de bandas, que indican que la dinámica de intercambio ha permitido que los espines se reorganicen casi completamente. Este patrón es indicativo de que el sistema ha alcanzado un estado donde la energía se ha minimizado, el equilibrio. Consecuentemente, cualquier cambio adicional en los dominios sería mucho más lento y menos significativo.



Figura 4: $T=1$, 1000000 Pasos MC.

1.2. Temperatura crítica: T_c

A la temperatura crítica, se observa un estado caracterizado por fluctuaciones, donde los dominios magnéticos muestran una estructura muy variable. El sistema está lejos del equilibrio, y la configuración está dominada por una mezcla de pequeñas y medianas regiones alineadas, lo que refleja la naturaleza crítica de la temperatura. A pesar de aumentar los pasos Montecarlo el sistema no tiende a dominios definidos, debido a que la temperatura crítica es un punto de transición a

partir del cuál se deja de dar la magnetización espontánea que se observó en el apartado anterior. Por tanto, el sistema seguirá mostrando características de fluctuaciones críticas, ya que los dominios de equilibrio empiezan a transicionar a un estado de desorden.

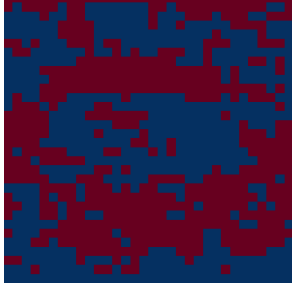


Figura 5: $T_c = 2\sqrt{2}$, 1000 pasos MC

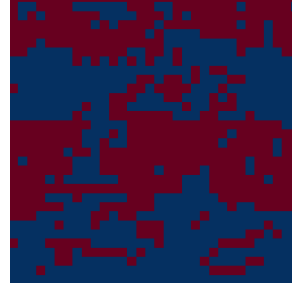


Figura 6: $T_c = 2\sqrt{2}$, 100000 pasos MC

Figura 7: Comparación de simulaciones Monte Carlo con diferente número de pasos. $T_c = 2\sqrt{2}$, $N=32$.

1.3. Temperatura superior a T_c : $T=5$ K.

Para una temperatura superior a T_c , se observa que ya no ocurre magnetización espontánea, independientemente del número de pasos Monte Carlo. Debido a la alta temperatura, los espines se orientan de forma aleatoria, sin formar dominios.

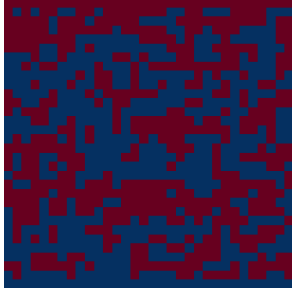


Figura 8: $T=5$ K, 1000 pasos MC.

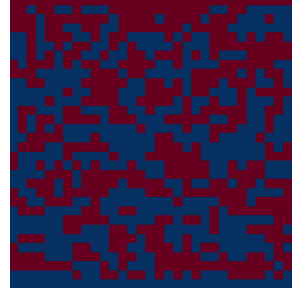


Figura 9: $T=5$ K, 100000 pasos MC.

Figura 10: Comparación de simulaciones Monte Carlo a $T=5$ K con diferente número de pasos.

2. Magnetización.

Obtener la curva de magnetización por partícula calculada por dominios como función de la temperatura para varios tamaños del sistema, promediando sobre un número suficiente de pasos Monte Carlo, para que el error sea razonablemente pequeño. Dicho promedio por dominios se realiza –en caso de una magnetización inicial nula– calculando la magnetización en cada una de las mitades (superior e inferior) del sistema.

En esta sección, para diferentes tamaños, en concreto, $N=10, 16, 32$ y 64 , se calcula la magnetización de la parte superior e inferior en función de la temperatura, en el rango de $T=[0, 5.8]$. Para el cálculo, se ha usado la expresión:

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

A continuación se muestran las figuras obtenidas, donde se representa la magnetización superior, inferior y su suma, que como se puede observar, es siempre nula, ya que se está trabajando con magnetización nula y en el modelo de Kawasaki, al solo haber intercambios de espines, la magnetización total es siempre constante.

Es importante destacar que a medida que se aumenta N , se reduce el número de pasos Monte Carlo, ya que el tiempo de compilación aumenta exponencialmente con el número de espines.

Todos los errores asociados a los cálculos están en un intervalo de confianza del 99,74 %.

- Para $N=10$, se tomaron 100.000 pasos Monte Carlo (figura 11). Se puede observar que para temperatura $T=[1, 1.2]$, la magnetización es máxima. Esto tiene sentido porque a esa temperatura es donde más dominios magnéticos existen, es decir, más espines están alineados y por tanto hay mayor magnetización. A medida que la temperatura aumenta, el sistema pierde la magnetización espontánea y en las dos mitades se tiende a 0.

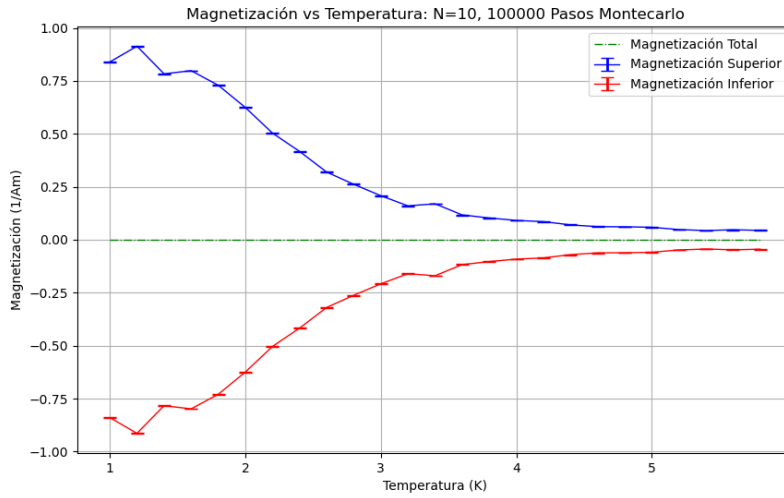


Figura 11: Magnetización superior, inferior y total. $N=10$, 100000 pasos Monte Carlo. Confianza del 99,74 %

- Una vez más, para $N=16$, (figura 12), se observa que a temperaturas altas ($T > T_c$), la magnetización tiende a 0. En este caso, la magnetización a $T=1$ no es la máxima, esto puede deberse a que se ha aumentado N y se han reducido los pasos Monte Carlo, y por tanto se dispone de menos tiempo para llegar al equilibrio. Aún así, el comportamiento global del sistema sigue el comportamiento esperado.

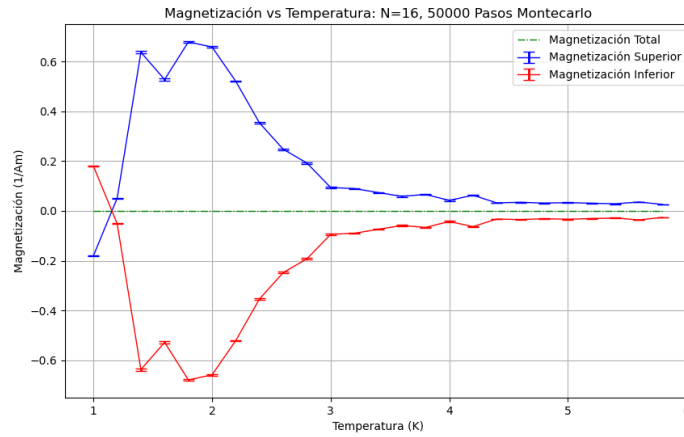


Figura 12: Magnetización superior, inferior y total. $N=16$, 50000 pasos Monte Carlo. Se puede estimar $T_c \approx 2\sqrt{2}$. Confianza del 99,74 %

- Para $N=32$, 50000 pasos Monte Carlo (figura 13), se observa de nuevo el comportamiento esperado, con magnetización espontánea $\rightarrow 0$ para $T > T_c$ y máxima para $T=1$.

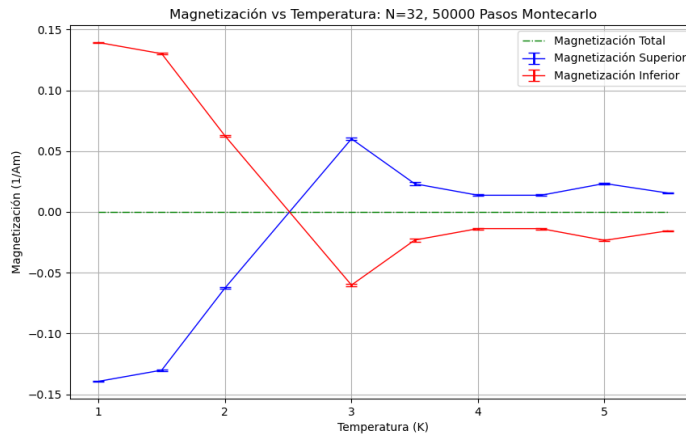


Figura 13: Magnetización superior, inferior y total. $N=32$, 50000 pasos Monte Carlo. Confianza del 99,74 %

- Para $N=64$, se hicieron de nuevo 50000 pasos Monte Carlo (figura 14), pero reduciendo el rango de temperaturas. Una vez más se puede discernir el mismo comportamiento en los otros tamaños, aunque que la magnetización es en promedio mayor, al ser mayor este sistema en dimensiones y necesitar más tiempo para estabilizarse.

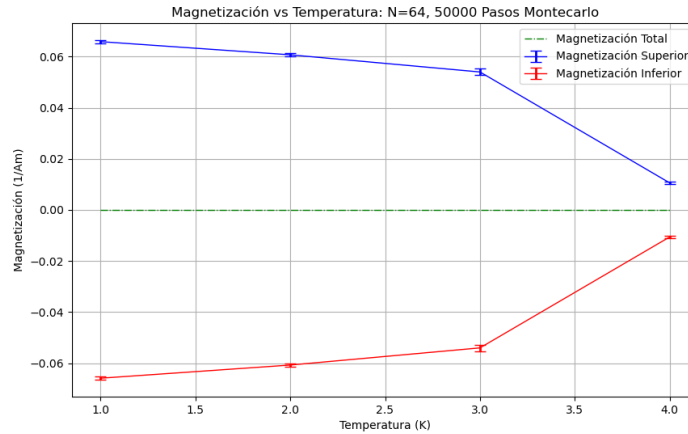


Figura 14: Magnetización superior, inferior y total. $N=64$, 50000 pasos Monte Carlo. Confianza del 99,74 %

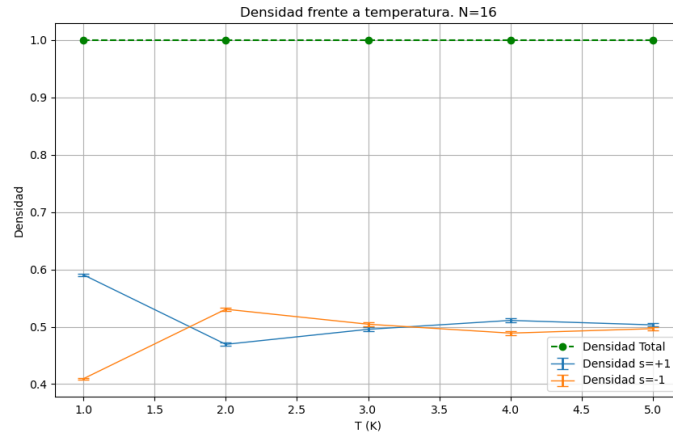
3. Densidad media de partículas por columna.

Calcular la densidad de partículas media en la dirección 'y' como función de la temperatura y para diferentes tamaños.

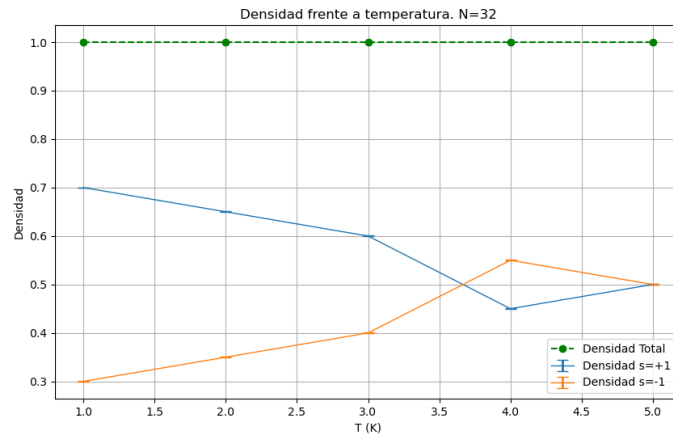
En esta sección, se calcula la densidad de espines +1 y la densidad de espines -1 por columna, en función de la temperatura, para diferentes tamaños. Es importante notar que la densidad total es siempre 1, lo que indica que se está teniendo en cuenta toda la columna y el análisis es completo.

Tanto para la figura 15b como para 15c se puede ver como para temperaturas bajas hay mucha más densidad de espín +1 que de espín -1; esto tiene sentido, ya que a estas temperaturas, como se ha visto en apartados anteriores, la magnetización es máxima, por lo tanto habrá sendos dominios magnéticos, donde se ocupe por espines del mismo tipo la mayoría de la columna.

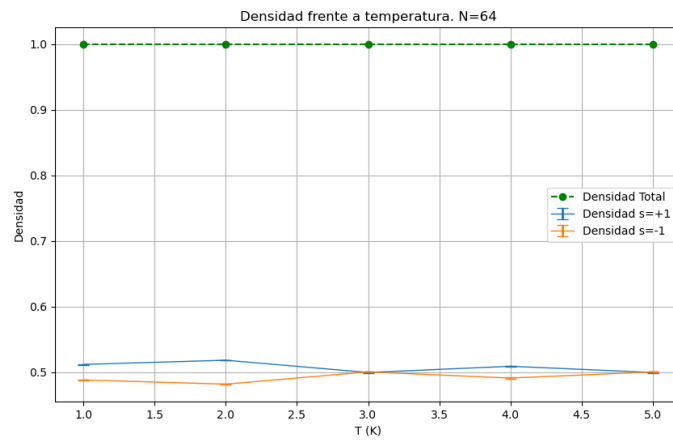
Al subir la temperatura y perder el sistema la magnetización espontánea, las densidades +1 y -1 son prácticamente iguales, debido a la aleatoriedad del sistema y su desorden, los espines toman cualquier valor de forma homogénea.



(a) Densidad de espín +1, espín -1 y su suma. $N=16$. 10000 pasos Monte Carlo. Confianza del 99,74 %



(b) Densidad de espín +1, espín -1 y su suma. $N=32$. 10000 pasos Monte Carlo. Confianza del 99,74 %



(c) Densidad de espín +1, espín -1 y su suma. $N=64$. 50000 pasos Monte Carlo. Notar que al ser mayor N , hay dificultad en la convergencia a temperaturas bajas. Confianza del 99,74 %

Figura 15: Comparación de densidades de espín para diferentes valores de N .

4. Energía media por partícula.

En esta sección, se calcula la energía media por partícula, con la siguiente expresión, promediada sobre el total de pasos Monte Carlo:

$$e_N = \frac{\langle E(s) \rangle}{2N} \quad (2)$$

Como se puede observar en las figuras 16, 17, 18 y 19, hay un mínimo de energía para $T=[1, 1.2]$, lo cuál tiene sentido, ya que es la temperatura de equilibrio, donde se consigue la energía más baja posible.

Para 2-3 K, hay una serie de fluctuaciones, que indican una transición de fase. En el rango de la temperatura crítica, el sistema experimenta grandes fluctuaciones en la energía debido a la competencia entre el orden causado por las interacciones entre espines y el desorden inducido por la energía térmica.

Durante la transición de fase, pequeñas perturbaciones pueden cambiar el estado del sistema de una configuración ordenada a una desordenada y viceversa. Esto resulta en un aumento de la energía.

A altas temperaturas $T > T_c$ K, la energía térmica domina y los espines están orientados aleatoriamente. En este estado desordenado, la energía del sistema es mayor comparada con la del estado ordenado, y esta aumenta de manera uniforme.

Para $N=16$ y $N=32$: La energía muestra un aumento pronunciado y fluctuaciones a temperaturas más bajas, lo que podría corresponder a efectos de tamaño finito ¹o efectos de transición de fase.

Para $N=64$: La curva parece más suave y el comportamiento de la transición de fase es más evidente, con un claro cambio en la pendiente alrededor de $T \approx 2.5-3$, que está más cerca de la temperatura crítica esperada para el modelo de Ising en 2D.

Para $N=128$: La curva se vuelve totalmente homogénea y cumple el comportamiento habitual, se eliminan todos los efectos de tamaño finito del sistema, aunque con coste de error debido al coste computacional de hacer $N=128$.

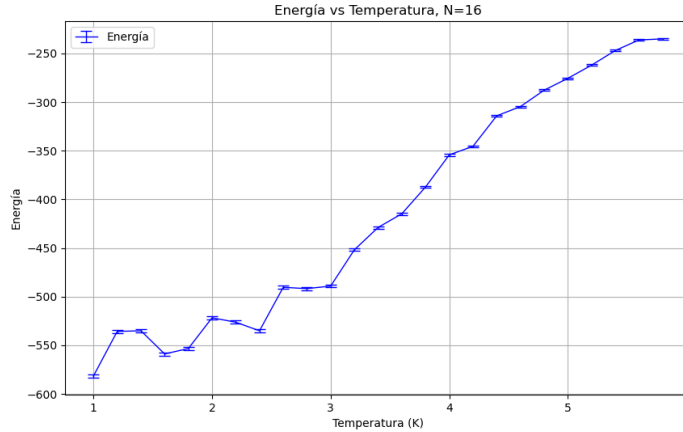


Figura 16: Energía media por partícula. $N=16$, 100000 pasos Monte Carlo. Confianza del 99,74 %

¹El tamaño finito del sistema ($N=16$, $N=32$, $N=64$) puede causar desviaciones del comportamiento esperado en un sistema infinito. Estos efectos podrían manifestarse como fluctuaciones más pronunciadas o transiciones menos marcadas, lo cual se puede ver en las curvas.

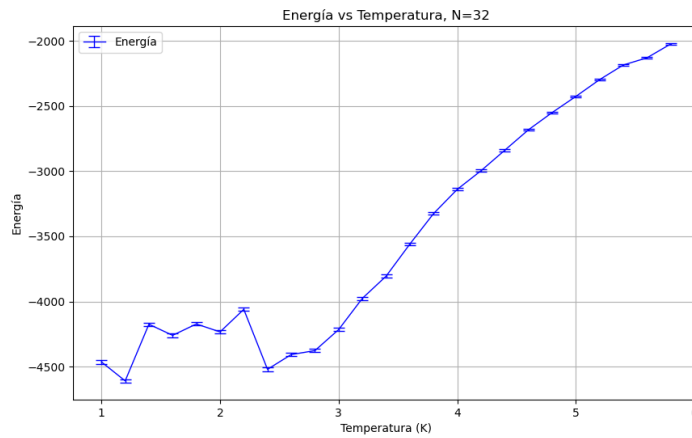


Figura 17: Energía media por partícula. N=32, 100000 pasos Monte Carlo. Confianza del 99,74 %

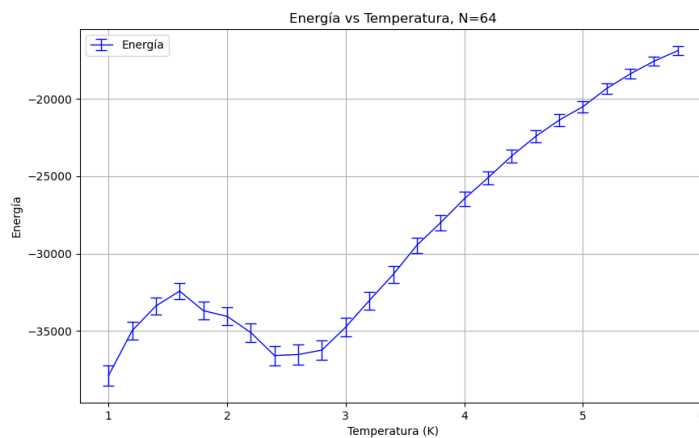


Figura 18: Energía media por partícula. N=64, 50000 pasos Monte Carlo. Confianza del 99,74 %

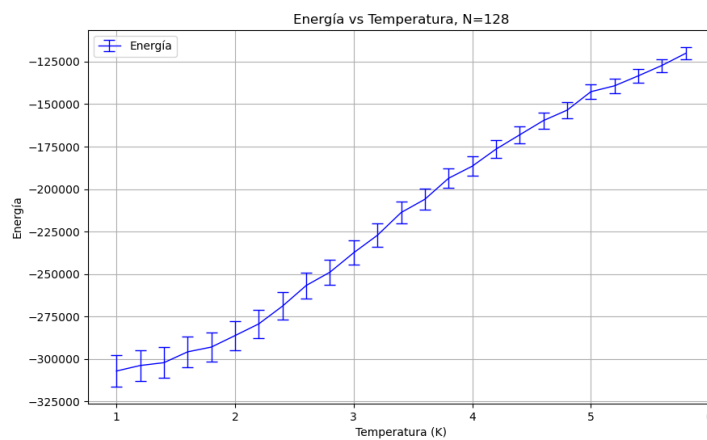


Figura 19: Energía media por partícula. N=128, 1000 pasos Monte Carlo. Confianza del 99,74 %

5. Densidad promedio en direccin y

Calcular densidad de partículas promedio en la dirección y para varias temperaturas.

En esta sección, se define la densidad de cada espín como:

$$\sigma_i = (s_i + 1)/2 \quad (3)$$

Podemos entonces interpretar el sistema como un gas reticular ('lattice gas'), donde $\sigma_i = 1$ indica presencia de partícula y $\sigma_i = 0$ indica ausencia.

La densidad total será entonces:

$$\rho = \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i \quad (4)$$

Por tanto, podemos graficar una dependencia entre la densidad total y una posición fija 'y'. Se obtienen, para diferentes tamaños, las figuras 20, 21.

Como se puede observar, las densidades más altas y más bajas se encuentran a temperatura $T=1$ K, esto concuerda con todo lo comentado anteriormente, a la temperatura de equilibrio, hay dominios magnéticos muy grandes, por lo tanto en una fila donde haya un dominio espín +1 la densidad será, en su mayoría, 1, mientras que en el caso de espín -1, será próxima a 0.

Como se ve, a mayor temperatura, la densidad es *aproximadamente constante*, lo que indica ausencia de dominios magnéticos, ya que hay desorden de espines e igual densidad de los dos.

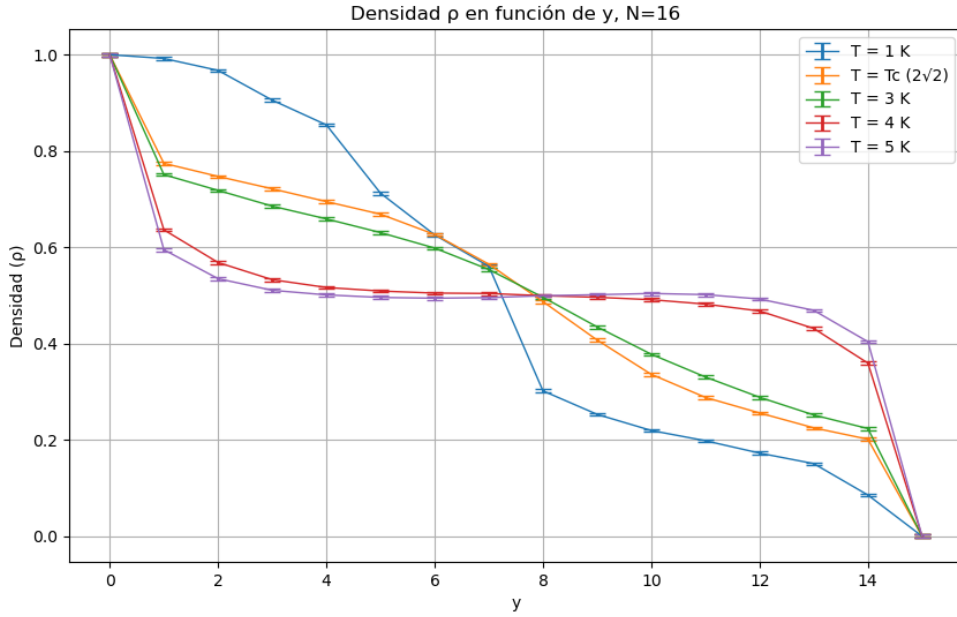


Figura 20: Densidad de partículas promedio en la dirección y para diferentes temperaturas. $N=16$. 120000 Pasos MC. Confianza del 99,74 %

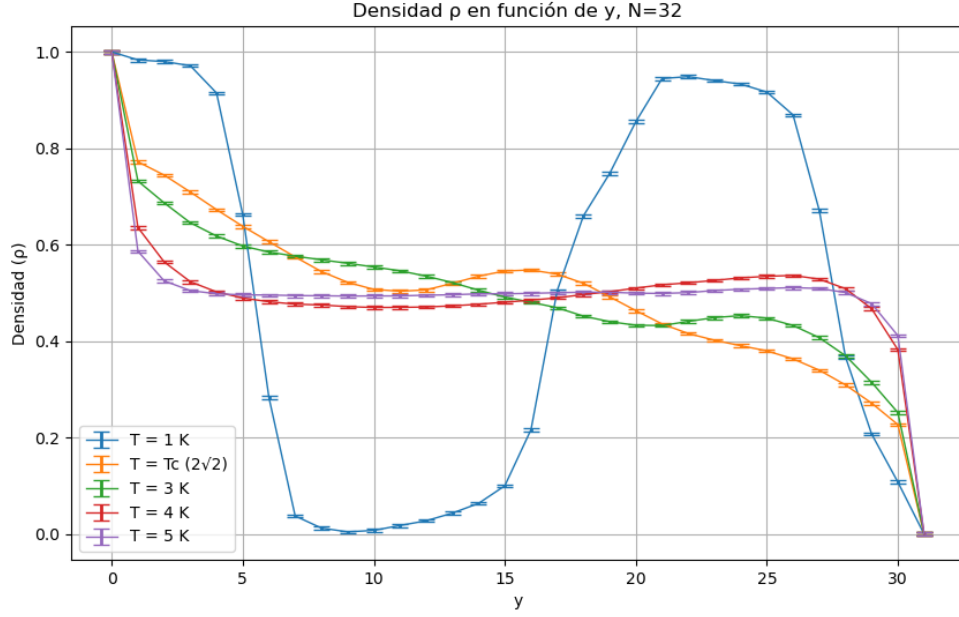


Figura 21: Densidad de partículas promedio en la dirección y para diferentes temperaturas. $N=16$. 120000 Pasos MC. Confianza del 99,74 %

6. Magnetización no nula.

Realizar los puntos 1-6 anteriores partiendo de una magnetización no nula. Recordemos que la magnetización por partícula puede tomar valores entre -1 y 1, i.e. $m \in [-1, 1]$. Por tanto si fijamos $m = m_o$ el promedio ‘por dominios’ de la magnetización se realizará, en este caso, promediando por separado la fracción $x = (1 + m_o)/2$ con $x \in [0, 1]$ inferior del sistema, y la fracción $1 - x$ superior del mismo. De esta manera, para $T \rightarrow 0$, tendremos:

$$m = x(+1) + (1 - x)(-1) = m_o \quad (5)$$

Observamos que si $m_o = 0$ tenemos que $x = 1/2$, es decir, tenemos que promediar la magnetización por separado en la mitad inferior y en la mitad superior del sistema, como habíamos explicado en el punto 2. Representar la curva de magnetización frente a temperatura y comprobar que es discontinua por debajo de una temperatura crítica. Dicha discontinuidad se hará más pronunciada conforme el tamaño del sistema sea mayor.

6.1. Dinámica para magnetización no nula.

En esta sección se comentan los plots en la propia figura.



Figura 22: $T=1$, 500000 Pasos MC. Magnetización no nula. Se forman sendos dominios magnéticos propios de la temperatura de equilibrio. Que haya más espines de un tipo que de otros solo afecta al tamaño de ciertos dominios.

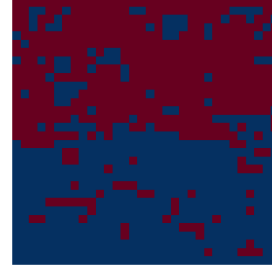


Figura 23: $T=T_c$, 500000 Pasos MC. En esta figura se puede ver claramente la naturaleza transitoria de la temperatura crítica, se ve como hay dos sendas bandas de dominios, up y down, que están transicionando, al perder la magnetización espontánea a un estado de desorden, perdiendo poco a poco los dominios magnéticos.

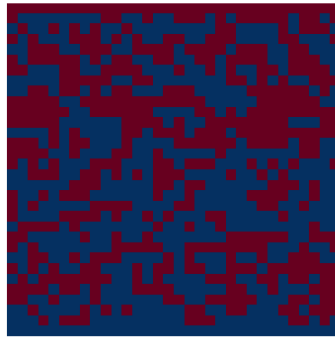


Figura 24: $T=5$, 500000 Pasos MC. En esta figura se puede ver la ausencia total de dominios magnéticos, no hay magnetización espontánea debido a la temperatura y por tanto hay total desorden.

6.2. Magnetización no nula y la temperatura crítica

A continuación se representa la magnetización de las dos mitades en función de la temperatura. Se han hecho dos tipos de plots:

- Usando una malla aleatoria para cada temperatura. Es decir, una magnetización m_o diferente para cada temperatura.
- Usando siempre la misma malla, teniendo por lo tanto la misma m_o para todo T .

Ahora bien, restringiendo la malla a dos partes de obtiene la figura 25, donde se observa que efectivamente es discontinua por debajo de la temperatura crítica, pero que a partir de ella es continua.

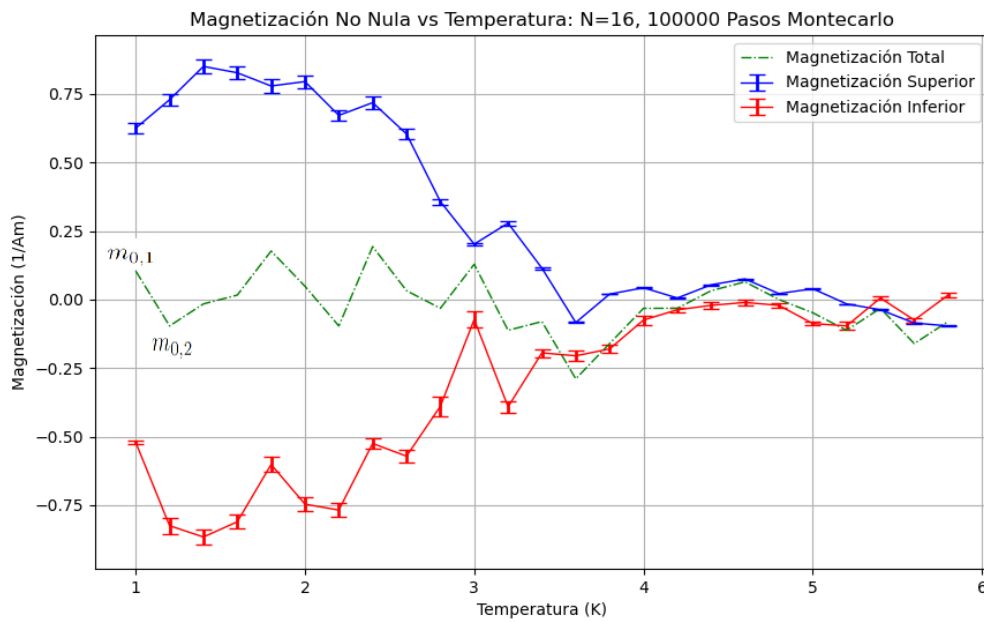


Figura 25: Magnetización no nula en función de la temperatura para mallas aleatorias. $N=16$. 1000000 de pasos MC. Confianza del 99,74 %

Ahora bien, para magnetización fija, limitado por un $N \cdot x$, se tiene la figura 26, donde se vuelve a observar la discontinuidad ya mencionada antes de la temperatura crítica. Al aumentar N , esta discontinuidad se hace mayor. Es importante observar que la T_c va cambiando con el tamaño del sistema ².

²Los demás apartados se pueden encontrar en el anexo, por falta de espacio.

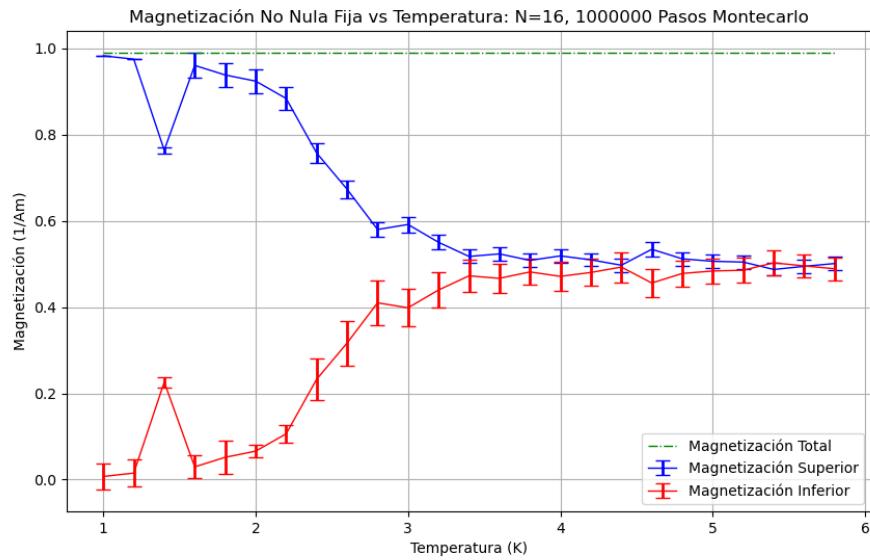


Figura 26: Magnetización no nula en función de la temperatura para malla de magnetización fija. N=16. 1000000 de pasos MC. Confianza del 99,74 %

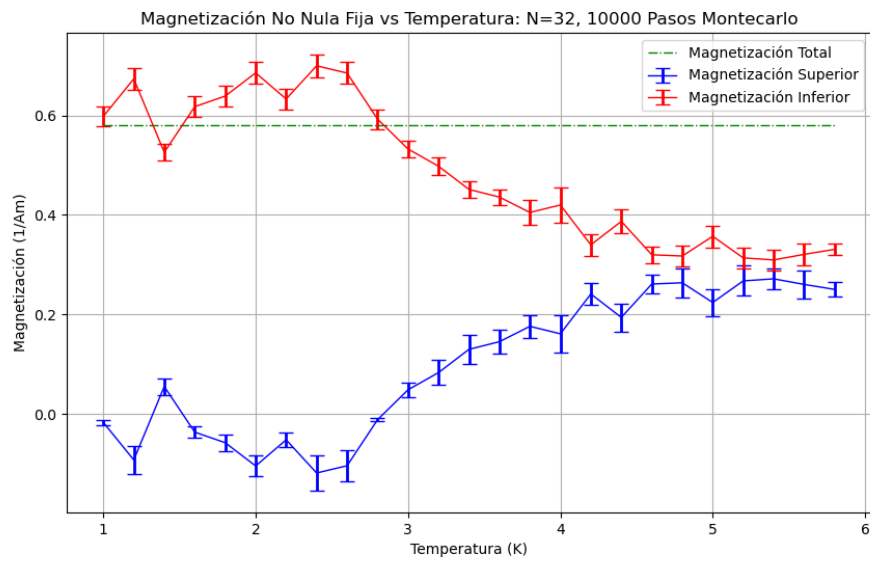


Figura 27: Magnetización no nula en función de la temperatura para malla de magnetización fija. N=32. 10000 pasos MC. Confianza del 95,44 %

7. Conclusión

El estudio realizado mediante simulaciones Monte Carlo del modelo de Ising con dinámica de Kawasaki explica cómo la temperatura afecta la formación de dominios y la magnetización en un sistema de espines en 2D.

A temperaturas bajas (1 K), el sistema tiende a formar dominios bien definidos, alcanzando el equilibrio después de un número significativo de pasos Monte Carlo.

A la temperatura crítica, el sistema exhibe fluctuaciones considerables, sin formar dominios claramente definidos, lo que refleja la naturaleza de transición de fase en este punto.

A temperaturas superiores a T_c , la magnetización espontánea no se produce y los espines se orientan de forma aleatoria.

Estos comportamientos se han constatado mediante el estudio de diferentes observables.

Para la magnetización, se ve como a temperaturas bajas los valores de m por dominios son máximos, ya que los espines están ordenados por dominios, sin embargo, a medida que la temperatura aumenta, la magnetización baja, debido que a partir de la transición de fase a la T_c , se pierde la magnetización espontánea del sistema, y el desorden se maximiza.

Para el observable energía, se observa que esta sube con la temperatura. Antes y durante la temperatura crítica, se encuentran fluctuaciones de energía debidas a la transición de fase. Estos son efectos de tamaño finito, despreciables cuando $N \rightarrow \infty$.

Para el observable densidad de espín $+1$, se ve como, para temperaturas bajas, se encuentran valores máximos o mínimos absolutos en la dirección y , ya que habrá dominios magnéticos de gran tamaño, dominados por espines de tipo $+1$ (valor máximo) o por espines de tipo -1 (valor mínimo). A temperaturas altas, por encima de T_c , se observan densidades $+1$ cuasi-constantes, de valor 0.5, ya que, debido al desorden, las posibilidades de encontrar $+1$ o -1 son iguales.

Para la magnetización no nula, se han obtenido figuras consecuentes con la teoría, habiendo discontinuidades en las figuras de magnetización previas a la T_c , reflejando de forma clara la transición de fase.

A. Densidad promediada entre todas las columnas

En esta parte del anexo se promedia la densidad entre todas las columnas, para comprobar un correcto funcionamiento de la simulación utilizada: La densidad *promediada entre todas las columnas* será, para una magnetización nula, siempre 0.5 para cada tipo de espín, y uno de forma total, como se ve en la figura 28.

Para magnetización no nula, habrá diferentes valores de densidad en la malla, como es lógico, figura ??.

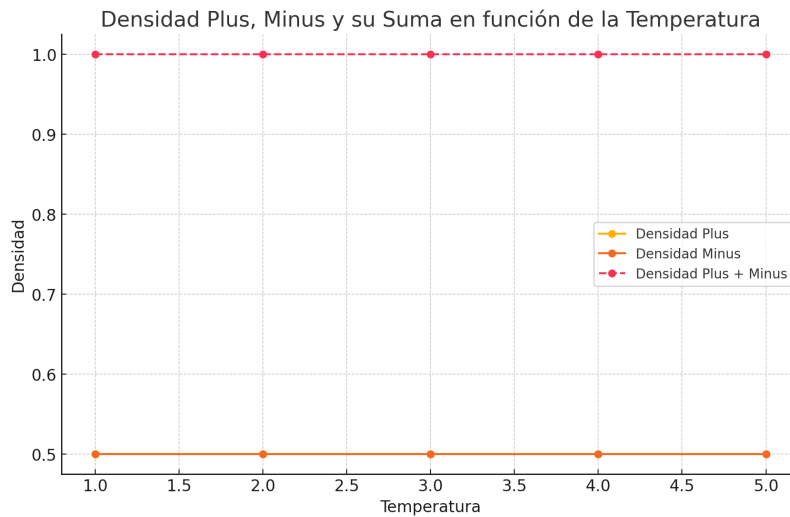


Figura 28: Densidad promediada entre columnas en función de la temperatura. Magnetización nula.

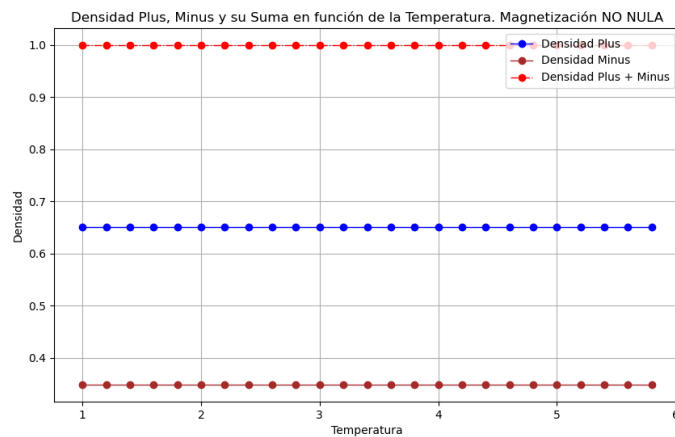


Figura 29: Densidad promediada entre columnas en función de la temperatura. Magnetización NO nula.

Referencias

- [1] Lavis, D. A., & Bell, G. M. (1999). Statistical Mechanics of Lattice Systems.
- [2] Newman, M. E. J. (2013). Computational Physics. Createspace Independent Publishing Platform.
- [3] Para el cálculo de los observables: <https://ergodic.ugr.es/cphys/LECCIONES/ising/ising-SLIDES.pdf>