

# Estudio del modelo de Ising en una dimensión empleando simulaciones computacionales

Nieto Pérez, Marco, Regal Sevilla, Mateo, Ainoo Pérez, Debinamaca, Molina O'Brien, Marcos, Mompó Ruiz, Lluís, Osa Bonillo, Matilde, (Grupo 6)

<sup>a</sup>Escuela Técnica Superior de Ingeniería de Telecomunicación, Valencia,

## Abstract

En este artículo se deducen las expresiones analíticas para la energía media, magnetización, susceptibilidad magnética y calor específico por partícula en función de la temperatura partiendo de las hipótesis del modelo propuesto por Ernest Ising. Posteriormente, se ha verificado la validez de dichos cálculos simulando una cadena de espines computacionalmente, para los casos en que el campo magnético externo es nulo o bien presenta valores positivos. Por último, se discuten los resultados obtenidos y se aportan las conclusiones pertinentes, además de una idea general de cómo se comporta el sistema.

## 1. Contexto e introducción

El modelo de Ising es un problema formulado originalmente por el físico Wilhem Lenz en 1920, resuelto por su estudiante Ernest Ising en su tesis en 1924 [1]. Su importancia se debe a que fue uno de los primeros modelos resueltos de manera exacta para un sistema interactuante, permitiendo dar una descripción del ferromagnetismo y de las transiciones de fase. La solución exacta para el caso de dos dimensiones fué obtenida por Lars Onsager en 1944. Actualmente, su importancia trasciende el campo de la física estadística y ha sido aplicado a otras áreas tales como la biología.

## 2. Resolución analítica

El modelo de Ising unidimensional consiste en tomar una cadena lineal de espines (representados como  $\sigma_i = \pm 1$ ) donde consideramos condiciones de contorno periódicas al cabo de  $N$  elementos ( $\sigma_{i+N} = \sigma_i$ ). En una dimensión dicha aproximación es equivalente a un anillo. Partiendo del Hamiltoniano

$$H = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - B \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (1)$$

donde  $J$  es una constante de acoplamiento y  $B$  es el producto  $\mu H$ , siendo  $H$  el campo magnético externo aplicado, se llega a la siguiente expresión tras aplicar las condiciones de contorno

$$H = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - \frac{B}{2} \sum_{i=1}^N (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \quad (2)$$

Considerando la colectividad canónica (el número de espines no varía) se puede calcular la función de partición como  $Z = \sum_{\sigma_i} e^{-\beta H}$ . Dicha expresión puede ser formulada como

$$Z_N = \sum_{\sigma_i} e^{\sum_{i=1}^N K \sigma_i \sigma_{i+1} + b \frac{\sigma_i + \sigma_{i+1}}{2}} \quad (3)$$

donde  $K$  es el producto  $\beta J$  y donde  $b$  es el producto  $\beta B$ . El sumatorio en el exponente de la exponencial puede ser factorizado de manera cíclica y por tanto podemos reescribir la función de partición como un producto de términos definidos como

$$\mathbb{T}_{\sigma\sigma'} = e^{K\sigma\sigma' + b\frac{\sigma+\sigma'}{2}} \quad (4)$$

que pueden ser considerados los elementos de una matriz  $\mathbb{T}$ , llamada matriz de transferencia, gracias a los cuales llegamos a la expresión siguiente para la función de partición

$$Z_N = \sum_{\sigma_i} \mathbb{T}_{\sigma_1\sigma_2} \mathbb{T}_{\sigma_2\sigma_3} \dots \mathbb{T}_{\sigma_{N-1}\sigma_N} \mathbb{T}_{\sigma_N\sigma_1} = \sum_{\sigma_1=\pm 1} (\mathbb{T}^N)_{\sigma_1\sigma_1} \quad (5)$$

Lo cual es equivalente a  $Z_N = \text{Tr}(\mathbb{T}^N)$ , y al tratarse  $\mathbb{T}$  de una matriz simétrica sus autovalores son reales. Podemos reescribir por tanto  $Z_n$  como  $Z_n = \lambda_+^N + \lambda_-^N$ . Dichos autovalores toman los siguientes valores [2]:

$$\lambda_{\pm} = e^K \left[ \cosh(b) \pm \sqrt{\sinh^2(b) + e^{-4K}} \right] \quad (6)$$

Conociendo que el valor de  $\lambda_+$  es más grande que el de  $\lambda_-$ , podemos refactorizar la expresión de  $Z_n$  como  $Z_n = \lambda_+^N (1 + (\lambda_-/\lambda_+)^N)$ , y por tanto en el límite termodinámico ( $N \rightarrow \infty$ ) podemos considerar  $(\ln Z_N)/N \approx \ln \lambda_+$ .

### 2.1. Magnetización media

Se define la magnetización como [3]:

$$M = - \left( \frac{\partial F}{\partial B} \right) \quad (7)$$

Siendo  $F$  la energía libre de Hemholtz, definida como  $F = -\ln(Z_N)/\beta$ , o bien, de forma equivalente:

$$M = \left( \frac{\partial \ln Z_N}{\partial b} \right) \quad (8)$$

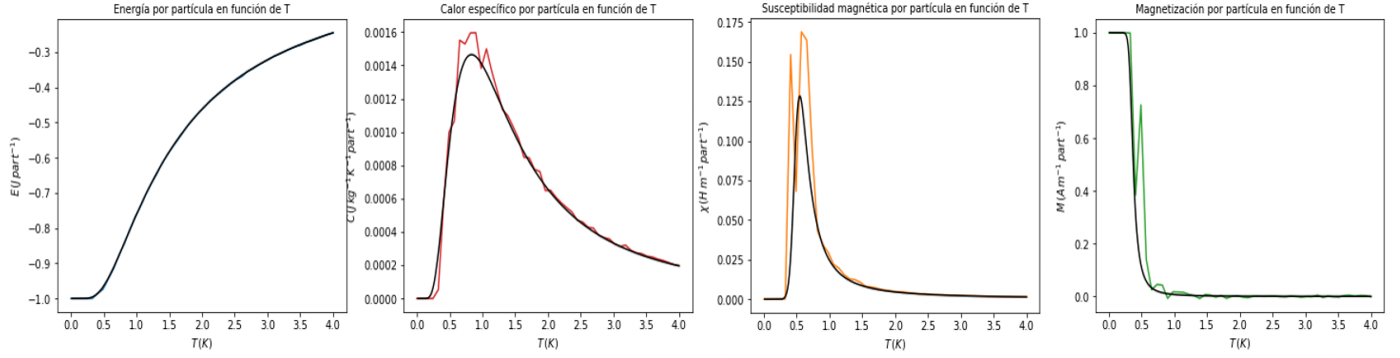


Figure 1: Expresiones de la energía, calor específico, susceptibilidad magnética y magnetización en función de la temperatura por partícula, determinadas mediante métodos computacionales (color) y de manera analítica (negro), a campo externo nulo, empleando 300 partículas y  $7.5 \times 10^5$  iteraciones.

Empleando la aproximación en el límite termodinámico calculada anteriormente, se llega a la siguiente expresión de la magnetización

$$M \approx N \left( \frac{\partial \ln \lambda_+}{\partial b} \right) = \frac{N \sinh(b)}{\sqrt{\sinh^2(b) + e^{-4K}}} \quad (9)$$

Definimos la magnetización por espín,  $\langle \sigma_i \rangle$ , como  $\langle \sigma_i \rangle = \langle M \rangle / N$ . Para el caso en que el campo externo es nulo (lo que implica  $b = 0$ ) se tiene que  $\langle \sigma_i \rangle$  tiende a 0 bruscamente para  $T > 0$ , lo cual se interpreta como un cambio de fase con  $T_c = 0$  para el caso unidimensional. La función toma un valor de 1 para el caso en que  $T = 0$ .

## 2.2. Energía media

Se define la energía como [3]:

$$E = - \left( \frac{\partial \ln Z_N}{\partial \beta} \right) \approx -N \left( \frac{\partial \ln \lambda_+}{\partial \beta} \right) \quad (10)$$

Siendo la segunda equivalencia la aproximación en el límite termodinámico. Conociendo la expresión de  $\lambda_+$  podemos calcular la expresión en dicho límite. Por su extensión, se omite en este documento pero puede ser visualizada en el código proporcionado como anexo. Para el caso en que el campo externo es nulo ( $b=0$ ), podemos reducir la expresión anterior a:

$$E_{(H=0)} = \frac{NJ(1 - e^{4K} \sqrt{e^{-4K}})}{(1 + e^{4K} \sqrt{e^{-4K}})} \quad (11)$$

## 2.3. Capacidad calorífica

Se define la capacidad calorífica como [3]:

$$C = - \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right) \quad (12)$$

Empleando la regla de la cadena podemos reescribir la derivada como:

$$C = \frac{J}{k_B T} \left( \frac{\partial E}{\partial K} \right) \quad (13)$$

Para el caso en que el campo magnético externo es nulo, conociendo la expresión de la energía en dicho caso se obtiene el siguiente resultado de la derivada:

$$C_{(H=0)} = \frac{4NK^2 k_B e^{-4K} \sqrt{e^{-4K}}}{(e^{-4K} \sqrt{e^{-4K}} + 1)^2} \quad (14)$$

De igual manera que ocurriría con la energía para el caso donde el campo magnético externo no es nulo, la expresión para dicho caso de la capacidad calorífica es demasiado extensa para ser escrita en el artículo pero puede ser visualizada en el código de anexo. Para que ambas expresiones analíticas coincidan con el posterior análisis numérico ha sido necesario dividir las expresiones por  $N^2$  puesto que el cálculo computacional emplea un promedio para su cálculo.

## 2.4. Susceptibilidad magnética

Se define la susceptibilidad magnética como [3]:

$$\chi = - \left( \frac{\partial M}{\partial B} \right) \quad (15)$$

Conociendo el valor de la magnetización (9), podemos calcular dicha derivada, lo que deriva en la siguiente expresión analítica:

$$\chi = \frac{N\beta \cosh(b) e^{4K} \sqrt{\sinh^2(b) + e^{-4K}}}{e^{8K} \sinh^4(b) + 2e^{4K} \sinh^2(b) + 1} \quad (16)$$

De igual manera que ocurriría con la capacidad calorífica, para comparar la expresión a la obtenida mediante cálculo numérico ha sido necesario dividirla por un factor  $N^2$  puesto que el cálculo computacional emplea un promedio para su cálculo.

## 3. Simulaciones computacionales

Para tratar de simular una cadena de espines, se ha empleado el algoritmo de Metropolis-Hastings [4]. Consiste en tomar una configuración aleatoria inicial ( $\sigma_i = \pm 1$ ) y modificar en cada iteración del método el valor de un espín tomado de forma aleatoria. Tras recalcular la variación de energía después de realizar dicho cambio, si  $\Delta E \leq 0$  aceptamos el cambio y en caso de que  $\Delta E > 0$  aceptaremos el cambio con una probabilidad

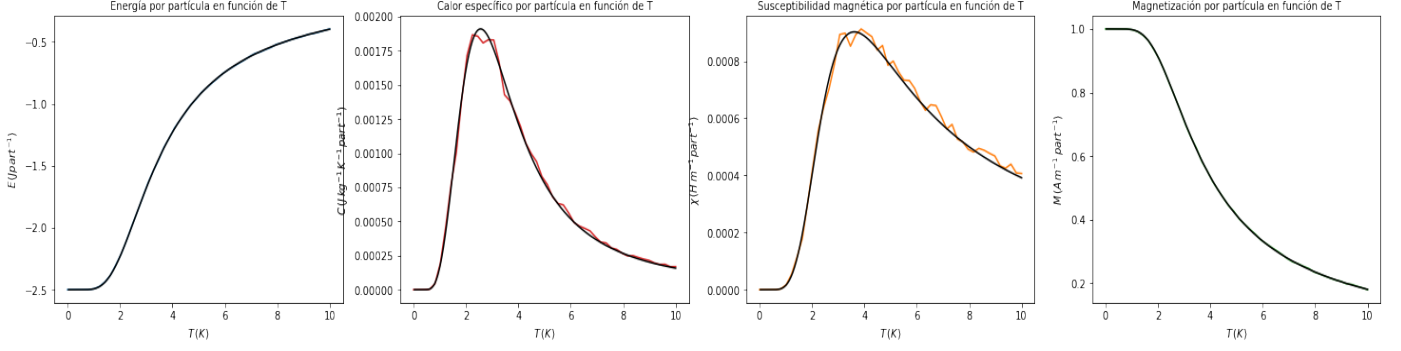


Figure 2: Expresiones de la energía, calor específico, susceptibilidad magnética y magnetización en función de la temperatura por partícula, determinadas mediante métodos computacionales (color) y de manera analítica (negro), con intensidad de campo magnético  $B = 1.5 \text{ T}$ , empleando 300 partículas y  $7.5 \times 10^5$  iteraciones.

$p = e^{-\beta \Delta E}$ . Dichas iteraciones se repiten un número lo suficientemente grande para que el sistema visite una gran cantidad de configuraciones en su espacio de fases asociado. En nuestro trabajo hemos empleado un total de  $N = 300$  partículas, sobre las cuales el método de Metropolis-Hastings ha realizado un total de  $2500 \cdot N$  iteraciones. Las gráficas numéricas han sido calculadas para un valor de la inducción magnética  $B = 1.5$ .

### 3.1. Magnetización media

Podemos estimar computacionalmente la magnetización del sistema tomando la media de la suma de las listas que contienen la cadena de espines en el momento posterior a haberse aplicado cada iteración del método. Podemos sintetizar esta idea en la siguiente expresión:

$$\overline{M} = \frac{1}{n} \sum_{K=1}^n \sum_{i=1}^N \sigma_i^{(K)} \quad (17)$$

Donde  $N$  es el número total de espines,  $n$  el número de iteraciones del método,  $K = 1, 2, \dots, n$  el número de configuraciones ensayadas y  $\sigma_i^{(K)}$  el valor del espín  $i$  en la configuración  $K$ . Su cálculo es el mismo para el caso de campo externo nulo o con un valor positivo. En ambos casos se ha aplicado el algoritmo en bucle pasando como parámetro al programa una serie de valores equiespaciados para la temperatura. Como resultado se ha obtenido una estimación de la magnetización en función de ésta (ver fig. 1, fig. 2).

### 3.2. Energía media

Podemos estimar la energía media del sistema como la media de los hamiltonianos. Partiendo de la expresión (1) deducida anteriormente se tiene que para campo magnético externo nulo, y por tanto  $B = 0$ , la expresión del hamiltoniano puede calcularse como:

$$H_{(H=0)}^{(K)} = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i^{(K)} \sigma_{i+1}^{(K)} \quad (18)$$

En consecuencia, la expresión de la energía media puede escribirse como

$$\overline{E} = \frac{1}{n} \sum_{K=1}^n H_{(H=0)}^{(K)} \quad (19)$$

De manera similar a la magnetización, calculando la energía media del sistema tomando como parámetro inicial distintos valores de temperatura se puede hallar una aproximación a la curva de la energía media en función de la temperatura (ver fig. 1).

Para el caso donde existe un campo magnético externo no nulo, el hamiltoniano a promediar es el de la expresión (1) pero esta vez considerando el término  $-B \sum_{i=1}^N \sigma_i^{(k)}$ . También se ha hallado numéricamente su dependencia con la temperatura (ver fig. 2).

### 3.3. Capacidad calorífica

Para obtener numéricamente la capacidad calorífica, necesitamos calcular la fluctuación de la energía media y dividir el resultado por  $k_B T$ , siendo  $k_B$  la constante de Boltzmann. Para ello es necesario obtener el valor medio del cuadrado de la energía, que se puede obtener promediando los cuadrados de los hamiltonianos tras cada iteración. En primer lugar, considerando un campo externo nulo, se ha calculado la capacidad calorífica como:

$$\overline{C} = \frac{1}{k_B T^2} \left[ \left( \frac{1}{n} \sum_{K=1}^n H_{(H=0)}^{(K)2} \right) - \left( \frac{1}{n} \sum_{K=1}^n H_{(H=0)}^{(K)} \right)^2 \right] \quad (20)$$

Al igual que con los dos parámetros anteriores, se ha hallado su dependencia con la temperatura (ver fig. 1).

Para el caso en que el campo externo es no nulo, se ha calculado la capacidad calorífica siguiendo el método anterior pero calculando los hamiltonianos con el término  $-B \sum_{i=1}^N \sigma_i^{(k)}$ . Nuevamente se ha hallado una aproximación numérica de la función analítica deducida en la primera sección (ver fig. 2).

### 3.4. Susceptibilidad magnética

En este caso es necesario nuevamente calcular la fluctuación de una variable, en este caso de la magnetización media. De igual manera que ocurría con la capacidad calorífica es necesario dividir el resultado por  $k_B T$ . El valor medio del cuadrado de la magnetización se obtiene promediando el cuadrado de la suma

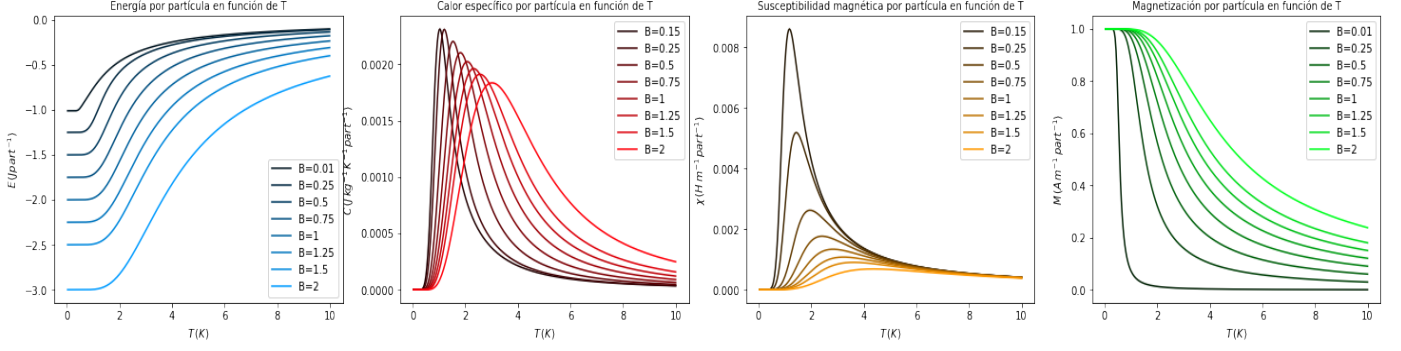


Figure 3: Variaciones de las dependencias de la energía, calor específico, susceptibilidad magnética y magnetización respecto de la temperatura por partícula para diferentes valores de  $B$ . Se ha tomado  $N = 300$ .

de los espines en cada configuración posterior a realizar cada iteración. La expresión resultante puede escribirse como:

$$\bar{\chi} = \frac{1}{k_B T} \left[ \frac{1}{n} \sum_{K=1}^n \left( \sum_{i=1}^N \sigma_i^{(K)} \right)^2 - \left( \frac{1}{n} \sum_{K=1}^n \sum_{i=1}^N \sigma_i^{(K)} \right)^2 \right] \quad (21)$$

El método es idéntico para el caso de campo magnético externo nulo y no nulo. Se han hallado las respectivas aproximaciones numéricas de sus dependencias con la temperatura (ver fig. 1, fig. 2).

## 4. Discusión de los resultados

Tras haber implementado el algoritmo de Metropolis-Hastings para la resolución del modelo de Ising en 1D, haber obtenido los resultados analíticos y haber comparado ambos dos, vamos a proceder a la discusión de los resultados obtenidos en las gráficas.

### 4.1. Resultados sin campo externo

#### 4.1.1. Energía media

Como podemos apreciar en la gráfica, la energía aumenta a medida que aumentamos la temperatura del sistema. Tanto para el caso analítico como numérico el comportamiento del sistema es el mismo coincidiendo prácticamente en todos los valores. Que la energía aumente a medida que aumenta la temperatura es intuitivo ya que, a medida que se da ese aumento, los átomos se mueven más, como comúnmente se suele decir, generando una mayor energía en el sistema.

Desde el punto de vista del algoritmo de Metropolis, la probabilidad de aceptar un cambio al aumentar la temperatura aumenta con lo que se vuelve cada vez más fácil aceptar un cambio de tal manera que la energía va tendiendo a un equilibrio ya que se dará un cambio constantemente espines cambiarán su valor entre +1 y -1. Este equilibrio se alcanzaría para una energía media por partícula de 0. Esto último tiene sentido dado que la energía viene determinada por el signo del espín 1 de tal manera que en el equilibrio, a temperatura infinita, se supone que la mitad estarán con valor +1 y la otra mitad con valor -1 por lo que tiene sentido que la energía acabe tendiendo a 0 y se

aproxime a este valor a medida que aumenta la temperatura. Por último también apreciamos como al inicio la energía parece mantenerse constante para bajas temperaturas. Desde el punto de vista físico, esto se debe a que a bajas temperaturas los espines apenas presentan movimiento. En base al algoritmo, esto es debido a que a temperaturas bajas la probabilidad de aceptar un cambio es prácticamente 0.

#### 4.1.2. Magnetización

La dependencia de la magnetización presenta una caída abrupta a una cierta temperatura llamada temperatura crítica o temperatura de Curie [5]. Esta temperatura determina el momento en el que se da una transición de fase, de ferromagnético a paramagnético. Teóricamente en una dimensión la temperatura crítica es 0 por lo que no se daría esta transición de fase. Sin embargo, en los cálculos realizados dicha temperatura crítica se encuentra entre 0.5 y 1, un desplazamiento poco relevante como para producir algún cambio apreciable en el resultado final. Cualitativamente se puede apreciar el comportamiento de este es tendiendo a 0 lo cual se corresponde con la Ley de Curie del paramagnetismo, que depende de manera inversamente proporcional a la temperatura, tendiendo a cero para altos valores de ésta. Dicha ley puede expresarse como:

$$\vec{M} = \chi \vec{H} = \frac{C}{T} \vec{H} \quad (22)$$

donde  $C$  es la constante de Curie,  $\vec{H}$  el campo magnético externo, y  $T$  la temperatura.

#### 4.1.3. Capacidad calorífica

El calor específico es la variación de la energía media respecto a la temperatura. Si nos fijamos en la gráfica del calor específico, se observa que el valor es máximo justo en la temperatura crítica, es decir, cuando el sistema cambia de fase. Esto se debe a que para este valor de temperatura, la variación de energía media por partícula es máxima debido a que la probabilidad de que se lleve a cabo un cambio o no es equiprobable en la temperatura crítica. Por ello, en la gráfica observamos una gran cantidad de picos y fluctuaciones en la zona de la temperatura crítica.

#### 4.1.4. Susceptibilidad magnética

El comportamiento de la susceptibilidad magnética es parecido al del calor específico. Esta magnitud nos indica cuán susceptible es un material a ser magnetizado. Al calcularse a partir de las fluctuaciones de la magnetización, esta presenta un pico justamente en la zona donde la magnetización comienza a decaer, es decir, cuando entramos en la transición de fase. Esto tiene sentido dado que en ese momento encontramos que la magnetización pasa de un pico a empezar a tender a 0 y, siguiendo la ley de Curie, en consecuencia la susceptibilidad varía consecuentemente. En términos del algoritmo de Metrópolis es el momento en el cual la probabilidad de aceptar y de rechazar el el cambio es muy parecida con lo cual es donde las fluctuaciones se vuelven más relevantes. Por otro lado, a medida que aumenta la temperatura, que entramos en comportamiento paramagnético, esta susceptibilidad se vuelve pequeña siguiendo la Ley de Curie nuevamente y, la hipótesis propia de materiales paramagnéticos que dice que esta susceptibilidad es cercana a 0 pero positiva.

### 4.2. Resultados con campo externo

#### 4.2.1. Energía media

El comportamiento del sistema es exactamente el mismo que en el caso sin campo. Sin embargo, como se puede apreciar en la gráfica, la energía inicial es mayor en valor absoluto que en el caso sin campo. Esto se debe a que al añadir un campo externo, los espines interaccionan con él, aumentando su campo interno por lo que cada espin aumenta su energía debido a que tratan de alinearse con este campo. Por otro lado vemos que la temperatura no comienza a aumentar hasta alcanzadas temperaturas mayores que sin campo debido a que al presentar un campo propio cada espín, provocar su movimiento es más complicado ya que se influyen entre ellos tratando de mantener su comportamiento. A partir del algoritmo vemos que esto es debido también a que aumenta la energía lo que provoca un aumento en los incrementos de la misma y, en consecuencia, hasta no alcanzar temperaturas suficientemente altas la probabilidad de aceptar cambios es muy baja.

#### 4.2.2. Magnetización

Al añadir campo magnético es más difícil desalinear los espines al influirse entre ellos. Por lo tanto, se necesitará más temperatura para pasar de ferromagnético a paramagnético dado que esto aumenta su energía y provoca un mayor movimiento de estos que consigue desalinearlos. Además, la caída de la magnetización será más lenta. En la cuarta gráfica de la figura 2 en comparación con la de la figura 1, podemos ver que la magnetización tiende a cero para una temperatura mayor. Por lo que la temperatura crítica es mayor cuando hay campo magnético. Desde el punto de vista del algoritmo, al añadir campo los incrementos de energía aumentan al aumentar las energías lo que provoca que la probabilidad de aceptar el cambio disminuya, lo cual explica que la caída de la magnetización sea más lenta.

#### 4.2.3. Capacidad calorífica

Al añadir el campo magnético, se necesita una mayor temperatura para alcanzar el máximo del calor específico. Esto es de-

bido a que la diferencia de energía media es mayor con campo que sin campo, entonces el valor máximo de calor específico alcanzado es mayor. Este pico además vuelve a coincidir de nuevo con la zona donde aparece la temperatura crítica por acercarnos nuevamente a la zona en la que se produce el cambio de fase.

#### 4.2.4. Susceptibilidad magnética

Al añadir campo magnético, la temperatura crítica aumenta, por lo que el valor máximo de la susceptibilidad magnética se ve desplazado. Respecto al valor máximo, este es menor con campo que sin campo debido a que al haber campo externo, el material es menos susceptible a ser magnetizado debido a que ya tiene una magnetización previa. Es decir, a medida que el campo se hace más grande es menos susceptible de magnetizarse más. Desde el punto de vista del algoritmo, la susceptibilidad es inversamente proporcional a  $k_b T$ , por lo que si aumentamos la temperatura para poder realizar la transición de fase, el valor se reduce.

## 5. Estudio del comportamiento del sistema

En esta sección se detalla cómo afecta la variación de ciertos parámetros a los resultados, tanto para el caso de las curvas analíticas como para los resultados numéricos.

### 5.1. Variación del campo magnético externo

Se han graficado las magnitudes comentadas en la anterior sección para diferentes valores de campo externo (ver fig. 3). Comenzando por la energía, se puede apreciar lo mencionado en la anterior sección, y es que, a mayor campo magnético externo mayor es la energía inicial en valor absoluto dado que este campo propio de espines aporta energía a estos. Además vemos que a mayor campo magnético más tarda la energía en aumentar por lo comentado en la anterior sección, y es que la probabilidad de aceptar los cambios a medida que aumenta la energía es muy baja si la temperatura no es lo suficientemente alta. Físicamente, los espines se fuerzan más a no moverse por la presencia del campo medio. Esto además provoca que se necesiten temperaturas más altas para alcanzar el equilibrio de energía en 0.

En segundo lugar se observa que el calor específico no es muy diferente a diferentes campos magnéticos externos, el comportamiento es cualitativamente el mismo con la única diferencia en el punto en el que se alcanzan los máximos dado que al desplazar la temperatura crítica los máximos de fluctuaciones energéticas tardan más en aparecer. Por otro lado, los máximos de esta magnitud son más bajos a mayor campo magnético debido a que las fluctuaciones de energía se dan a temperaturas más altas y al ser esta magnitud inversamente proporcional a la temperatura al cuadrado el máximo disminuye.

En tercer lugar observamos la susceptibilidad magnética. Tal como se mencionó en la cuarta sección, disminuye su pico a medida que se aumenta el campo magnético debido a que al haber un mayor campo este el material tiende menos a magnetizarse, digamos que tiende a un límite de imantación. En base

al algoritmo, las fluctuaciones de la magnetización son menos bruscas al haber más campo por lo que este pico no es tan pronunciado. Cualitativamente, el comportamiento sigue siendo el mismo para todos los casos ya que tiende a 0 siguiendo la ley de Curie al aumentar la temperatura.

Por último, la magnetización sigue el comportamiento esperado. Para campos muy bajos vemos como rápidamente tiende a 0 con una pendiente casi vertical siguiendo la lógica del modelo de Ising en 1D donde la temperatura crítica se alcanza en el 0. A medida que se aumenta el campo, como mencionamos en la anterior sección, la caída de magnetización es más suave al desplazarse la temperatura crítica y debido a que es más complicado desalinear los espines al influirse entre ellos con su campo medio.

## 5.2. Variación del número de partículas simuladas

Las dos gráficas numéricas que presentan una tendencia más alejada a su valor analítico son la capacidad calorífica y la susceptibilidad magnética. Se han graficado diferentes tendencias, tanto numéricas como analíticas para diferentes números de partículas (ver fig. 4, 5). Cabe mencionar que, tal como se ha mencionado en la primera sección, para la expresión analítica de  $C$  y de  $\chi$  ha sido necesario dividir por un factor  $N$ . Por tanto, el número de partículas pasa a ser un parámetro de la función analítica y en consecuencia no es única, sino que depende de la  $N$  con la que estemos calculando.

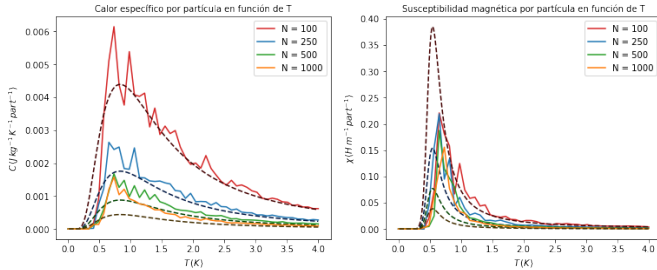


Figure 4: Tendencias analíticas y sus respectivas aproximaciones numéricas para la capacidad calorífica y susceptibilidad magnética por partícula, para diferentes números de partículas simuladas. En todas las simulaciones se ha empleado un número de iteraciones de  $300 \times N$ .

Se puede apreciar que, para el caso en que el campo externo es nulo (ver fig. 4), es necesario tomar un número de iteraciones considerable para que la tendencia de la gráfica simulada coincida con la numérica. Podemos estimar el orden de las iteraciones necesarias en  $N^2$  para el caso de la capacidad calorífica, ya que habiéndose tomado  $300 \times N$  iteraciones, solo las gráficas de 250 y 100 partículas presentan una buena aproximación a su tendencia analítica. Para el caso de la susceptibilidad magnética, se aprecia como el orden de iteraciones debe ser mayor que  $N^2$ , ya que ni tan solo para 100 partículas presentamos una aproximación adecuada. Por otro lado, se aprecia como un aumento en el número de partículas ayuda a la suavización de la curva computada, presentando fluctuaciones menos pronunciadas. Sin embargo, tal como se puede observar, un aumento del número de partículas es perjudicial para obtener

una buena aproximación si dicho aumento no va acompañado de una cantidad mucho mayor de iteraciones.

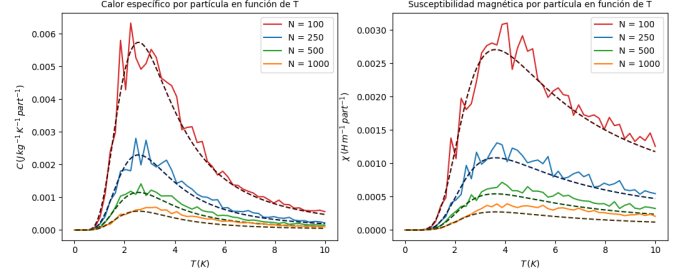


Figure 5: Tendencias analíticas y sus respectivas aproximaciones numéricas para la capacidad calorífica y susceptibilidad magnética por partícula, para diferentes números de partículas simuladas e intensidad de campo magnético  $B = 1.5$ . En todas las simulaciones se ha empleado un número de iteraciones de  $300 \times N$ .

Sin embargo, tal como se puede apreciar en la figura donde se grafican las dependencias en función del número de partículas con un campo externo (ver fig. 5), la convergencia a las tendencias analíticas es mucho mejor que para el caso sin campo externo, tanto para  $C$  como para  $\chi$ . En este caso podemos deducir nuevamente que a un mayor número de partículas la suavidad de la curva computada es mayor, pero no es necesario un número tan desorbitado de iteraciones para que dicha curva tome una forma similar a la de su correspondiente analítica.

## 6. Conclusiones

Como bien se ha comprobado en el apartado de simulaciones computacionales, el algoritmo de metropolis es un buen método para aproximar el modelo de Ising, aunque a bajas temperaturas se vuelve ineficiente debido a que nos acercamos a la temperatura crítica y esto produce oscilaciones a la hora de calcular los resultados. A pesar de que la temperatura crítica se sitúe teóricamente en el cero, se aprecia como las máximas fluctuaciones de las gráficas y la caída abrupta de la magnetización se dan para un valor de temperatura ligeramente más elevado. El sentido físico de las tendencias de las distintas magnitudes ya se ha tratado en profundidad en el apartado de discusión de resultados. Por otra parte, a la hora de graficar los resultados se ha llegado a la conclusión de que a partir de cierto número de partículas es más importante aumentar el número de pasos que el número de partículas para lograr buenas aproximaciones.

## References

- [1] Ernst Ising. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus - zeitschrift für physik a hadrons and nuclei, Feb 1925.
- [2] J. Ricardo Arias-Gonzalez. Apuntes de física estadística, tema 6: Sistemas con interacción. 2023.
- [3] Paul D. Beale R.K. Pathria. *Statistical Mechanics*. Katey Birtcher, 4 edition, 2022.
- [4] W. K. Hastings. Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications. *Biometrika*, 57(1):97–109, 04 1970.
- [5] Nicola A. Spaldin. *Magnetic Materials: Fundamentals and Applications*. Cambridge: Cambridge University Press, 2010.