

Compumáticas II

Ejercicios de los Alumnos

Prof: Pablo Rosales

Curso 2019-2020

3 Simulaciones

3.2 Ising Model

El modelo de Ising se utiliza para modelar un material magnético, el cual está compuesto por una serie de partículas que pueden tener dos tipos de espines. Además, puede existir un campo magnético externo que tienda a alinear todos los espines. Considere una red de N puntos tal que cada sitio i de la red tiene asociado un número s_i , que puede tomar los valores $s_i = 1$ ("up", \uparrow) o $s_i = -1$ ("down", \downarrow). La energía total de dicho sistema viene dada por:

$$E = -J \sum_{i,j=pv(i)}^N s_i s_j - B \sum_{i=1}^N s_i \quad (1)$$

Analizamos la ecuación:

1. J es la constante de acoplamiento vecinal, que puede ser positiva o negativa.
2. El primer sumatorio se realiza sobre todos los pares de primeros vecinos ($pv(i)$ son los primeros vecinos de i), que son siempre 4 (arriba, abajo, derecha e izquierda).
3. B es la constante del campo magnético externo, que puede ser positiva o negativa y tiende a alinear a todos los espines en la misma dirección.

Antes de empezar a programar, pensemos un poco en la física. Recuerda que en la naturaleza, se tiende siempre a energías más bajas:

1. Si $J > 0$, ¿se favorecen alineaciones iguales ($\uparrow\uparrow$ o $\downarrow\downarrow$) o distintas ($\downarrow\uparrow$ o $\uparrow\downarrow$)? ¿Y si $J < 0$?

2. Si $B > 0$, ¿Se favorece alineación "up" \uparrow o "down" \downarrow ? ¿Y si $B=0$?

A la hora de programar, recuerda aplicar condiciones periódicas de contorno y de definir la temperatura del sistema (la energía se divide entre la temperatura al aplicar el criterio de Metrópolis).

Ejercicio 1: Vayamos poco a poco, diseñe un programa que lea una configuración dada de espines y calcule su energía considerando $J = +1$ y $B = 0$ (no hay campo magnético externo). Te ponemos un ejemplo para una red 3×3 :

\uparrow	\downarrow	\downarrow
\uparrow	\uparrow	\downarrow
\downarrow	\uparrow	\uparrow

Esta configuración tiene energía $E = -6$ (compruébalo con lápiz y papel). Este programa será una función del programa principal a la que se llamará para calcular la energía de las configuraciones que vayan surgiendo durante la simulación. ¿Qué energía tiene una configuración 3×3 con todos los espines de tipo \uparrow ? ¿Y si todos tuviesen espines de tipo \downarrow ? ¿Y si fuese de 10×10 con todos los espines de tipo \uparrow ? Divide dicha energía por el número total de espines, ¿qué resultado se obtiene?

Ejercicio 2: Empecemos la simulación por lo más sencillo: fijando $J = 1$ y $B = 0$ (no hay campo magnético externo), programe el modelo de Ising para una red 10×10 de espines inicialmente colocados al azar para una temperatura de $T = 2.0$. Para ello, siga el siguiente esquema de trabajo:

- Defina las variables de la simulación: $N = 10$, el número de sitios por lado; $J = 1$, la constante de acoplamiento vecinal; $B = 0$, la constante de campo magnético externo; $T = 2.0$, la temperatura; $Xeq = 5000$, el número de pasos Monte Carlo del equilibrado y $Xsim = 20000$, el número de pasos Monte Carlo de la simulación.
- Inicialice los espines aleatoriamente (mitad para arriba y mitad para abajo).
- Calcule la energía inicial de la configuración inicial (aleatoria)
- EQUILIBRADO: por cada paso de equilibrado, Xeq , se sigue el siguiente esquema:
 - Se elige un espín al azar y se cambia.
 - Se calcula la energía de la nueva configuración.
 - Si la energía es menor, se acepta el cambio.
 - Si la energía es mayor, se calcula $EXP = e^{-\frac{E_{final} - E_{inicial}}{T}}$ y se compara con un número aleatorio entre el 0 y el 1.
 - Si EXP es mayor que el número aleatorio se acepta el cambio.
 - Si EXP es menor que el número aleatorio se rechaza el cambio.
- SIMULACIÓN: por cada paso de simulación, $Xsim$, se sigue el mismo esquema que para el equilibrado, pero guardando la energía de la configuración final (si se ha rechazado también se guarda).

6. Calcule la energía media de toda la simulación y divídala por el número de espines ($N \times N$). Apunte el resultado en una hoja y repita la simulación con los mismo parámetros pero utilizando una red de 30×30 . ¿Es el cambio un efecto aleatorio o es que existe algún error en el código?. Antes de pasar al próximo ejercicio, asegúrese de que su programa está escrito de manera general, es decir, todas las variables definidas en el primer paso se definen solamente una vez y se utilizan de manera general durante todo el programa. O lo que es lo mismo, si se quiere cambiar alguna de ellas, solamente es necesario cambiarla en un único lugar.

Ejercicio 3: Vamos a jugar con los pasos de equilibrado y simulación. Primero, para $Xeq = 5000$ y $Xsim = 20000$ represente la energía en función del paso para el equilibrado (hay que añadirlo al código) y para la simulación (gráficas separadas). ¿Para qué sirve el equilibrado? ¿Qué ocurre si se disminuye el equilibrado a $Xeq = 50$? ¿Qué pasa si se aumenta a $Xeq = 10000$? Ahora cambie la red para que sea 30×30 con $Xeq = 5000$ y $Xsim = 20000$ ¿Qué ocurre y como se podría arreglar?

Ejercicio 4: Con los parámetros Xeq y $Xsim$ obtenidos en el ejercicio anterior, calcule la proporción de espines que más haya durante la simulación y la energía para diferentes redes, desde $N = 5$ hasta $N = 20$ de uno en uno. ¿Depende la energía de N ? ¿Depende la proporción de espines de N ?

Ejercicio 5: Para $N = 10$ y utilizando los parámetros Xeq y $Xsim$ calculados en el ejercicio 3, calcule la energía y el porcentaje de spins de los que más haya en función de la temperatura, desde $T = 1.0$ hasta $T = 3.0$ de 0.1 en 0.1. Guarde los resultados en dos archivos, pues las simulaciones pueden tardar.

Ejercicio 6: La magnetización, M es el valor absoluto de la suma de todos los espines y distingue materiales ferromagnéticos (M se acerca a la unidad) de paramagnéticos (M se acerca a cero). Se llama Temperatura de Curie a la temperatura a partir de la cual algunos materiales ferromagnéticos pierden sus propiedades magnéticas, es decir, la magnetización se anula. Calcule la temperatura de Curie del modelo de Ising para $J = 1$ y $B = 0$.

Ejercicio 7: Para una temperatura de $T = 1.5$ y para una temperatura de $T = 2.5$, elimine la etapa de equilibrado y lance para $N = 30$ una simulación con $Xsim = 1000 * 60$, guardando cada 10000 pasos, la configuración en formato array 2D (megalista). Ahora utilice matplotlib para representar las configuraciones que se van generando. NOTA: este ejercicio es algo complejo, el profesor tiene el código para hacer la gráfica con matplotlib y le dará indicaciones extras.

Ejercicio 8: Experimentación libre. ¿Qué pasa si cambiamos el valor/signo de J ? ¿Qué pasa si cambiamos el valor/signo de B ? ¿Qué pasa si además de los primeros vecinos contamos los segundos vecinos para el cálculo de la energía? ¿Qué más preguntas se te ocurren?