Tema 8: El método de Montecarlo

Hasta ahora hemos visto métodos aleatorios con probabilidades uniformes.

Las simulaciones de procesos reales deben tener en cuenta las leyes de la Física: las probabilidades vienen gobernadas por dichas leyes.

Métodos de Montecarlo

Interacción entre partículas

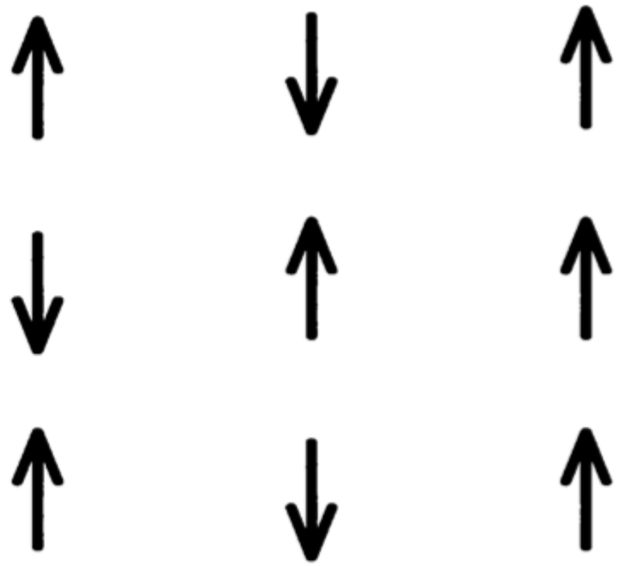
Efecto de la temperatura

Tema 8: El método de Montecarlo

8.1 Modelo de Ising y Teoría del Campo Medio

Ferromagnetismo ⟶ fenómeno cuántico ⟶ espín

Red bidimensional de espines



$s_i = \pm 1$

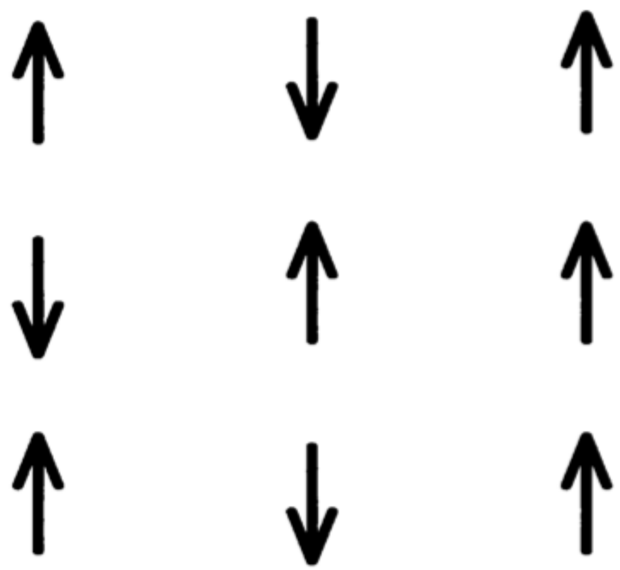
$$E = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j$$

Suma sobre todos los pares de primeros vecinos.

J>0, constante de intercambio.

Tema 8: El método de Montecarlo

8.1 Modelo de Ising y Teoría del Campo Medio



Probabilidad de microestado α:

$$P_\alpha \sim e^{-E_\alpha / k_B T}$$

N espines: 2^N microestados.

El resultado de una medida es el promedio sobre todos los microestados:

$$M = \sum_\alpha M_\alpha P_\alpha$$

$$M = \sum_i s_i$$

8.1 Modelo de Ising y Teoría del Campo Medio

Teoría del campo medio

$$M = \sum_i \langle s_i \rangle = N \langle s_i \rangle$$

Supongamos que existe un campo externo, H. La contribución a la energía es

$$E_H = -\mu H \sum_i s_i$$

Para un solo espín $E_{H\pm} = \mp \mu H$

$$P_+ = C \cdot e^{\mu H / k_B T}$$

$$C = \frac{1}{e^{\mu H / k_B T} + e^{-\mu H / k_B T}}$$

$$P_- = C \cdot e^{-\mu H / k_B T}$$

$$\langle s \rangle = \sum_{s=\pm 1} s \cdot P_\pm = P_+ - P_- = \tanh\left(\mu H / k_B T\right)$$

$$E = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j = -\mu H_{ef} s_i \qquad \text{(Campo medio)}$$

Tema 8: El método de Montecarlo

8.1 Modelo de Ising y Teoría del Campo Medio

Teoría del campo medio

Generalizando, para la energía del espín i:

$$E = -J\sum_{\langle ij\rangle} s_i s_j - \mu H s_i = -\left(J\sum_{\langle ij\rangle} s_j \right) s_i - \mu H s_i = -\mu H_{ef} s_i - \mu H s_i$$

$$\mu H_{ef} = J\sum s_j$$

Sustituyendo s_j por su valor promedio:

$$H_{ef} = \frac{J}{\mu}\sum\langle s\rangle = \frac{z\cdot J}{\mu}\langle s\rangle \quad ; \quad z: \text{nº vecinos } (4)$$

Recordando que $\langle s\rangle = \tanh\left(\mu H / k_B T\right)$

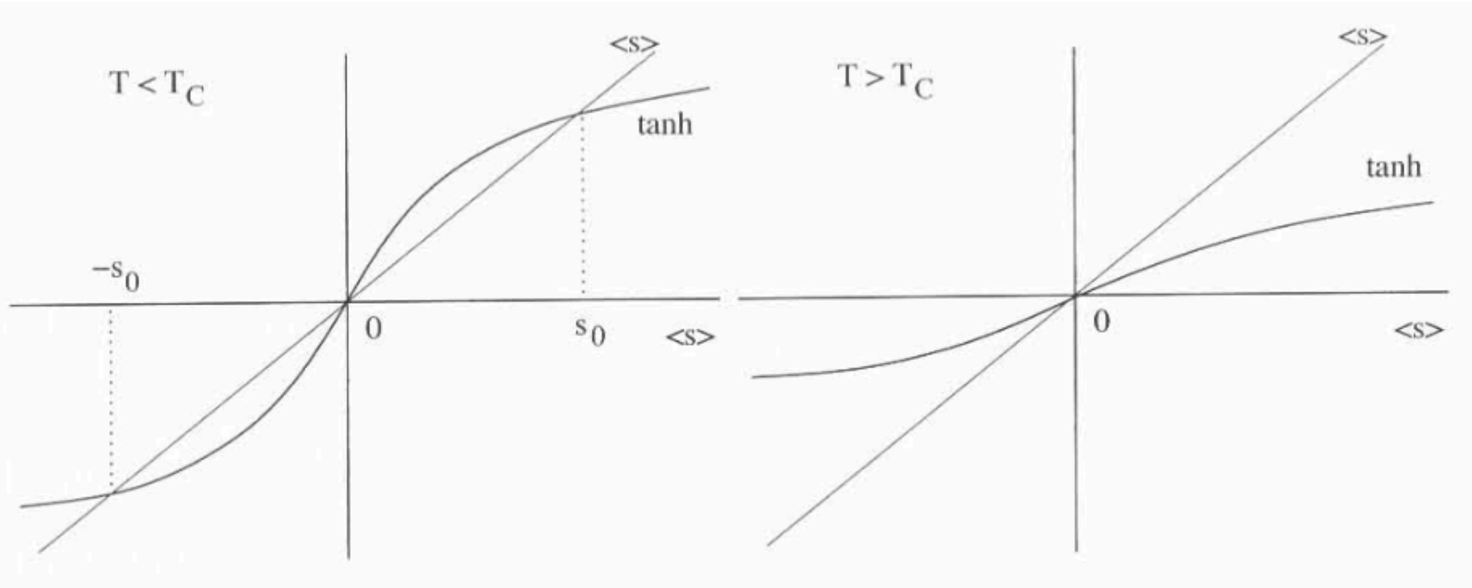
Sustituyendo el valor de H_{ef}:

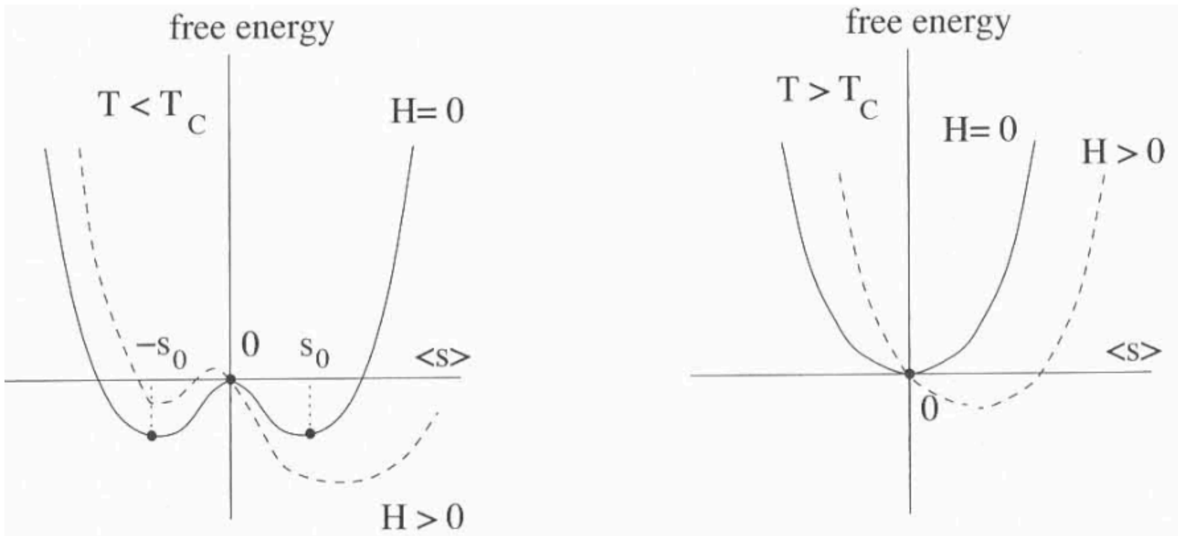
$$\langle s\rangle = \tanh\left(z\cdot J\cdot\langle s\rangle / k_B T\right)$$

Tema 8: El método de Montecarlo

8.1 Modelo de Ising y Teoría del Campo Medio

$$\langle s \rangle = \tanh\left(z \cdot J \cdot \langle s \rangle / k_B T \right)$$

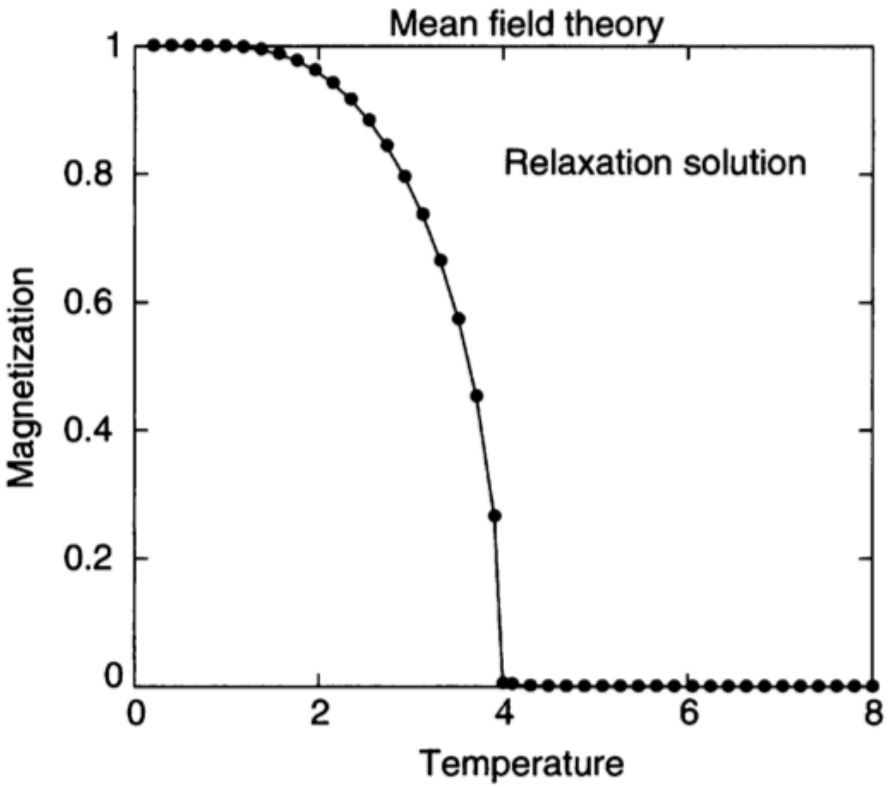




Tema 8: El método de Montecarlo

8.1 Modelo de Ising y Teoría del Campo Medio

$$\langle s \rangle - \tanh\left(z \cdot J \cdot \langle s \rangle / k_B T\right) = 0$$



(T en unidades de J/k_B)

8.1 Modelo de Ising y Teoría del Campo Medio

Podemos aproximar, para x pequeño:

$$\tanh(x) \approx x - \frac{x^3}{3}$$

$$\langle s \rangle = \tanh\left(z \cdot J \cdot \langle s \rangle / k_B T\right) \quad \Rightarrow \quad \langle s \rangle \approx \frac{z \cdot J \cdot \langle s \rangle}{k_B T} - \frac{1}{3}\left(\frac{z \cdot J \cdot \langle s \rangle}{k_B T}\right)^3$$

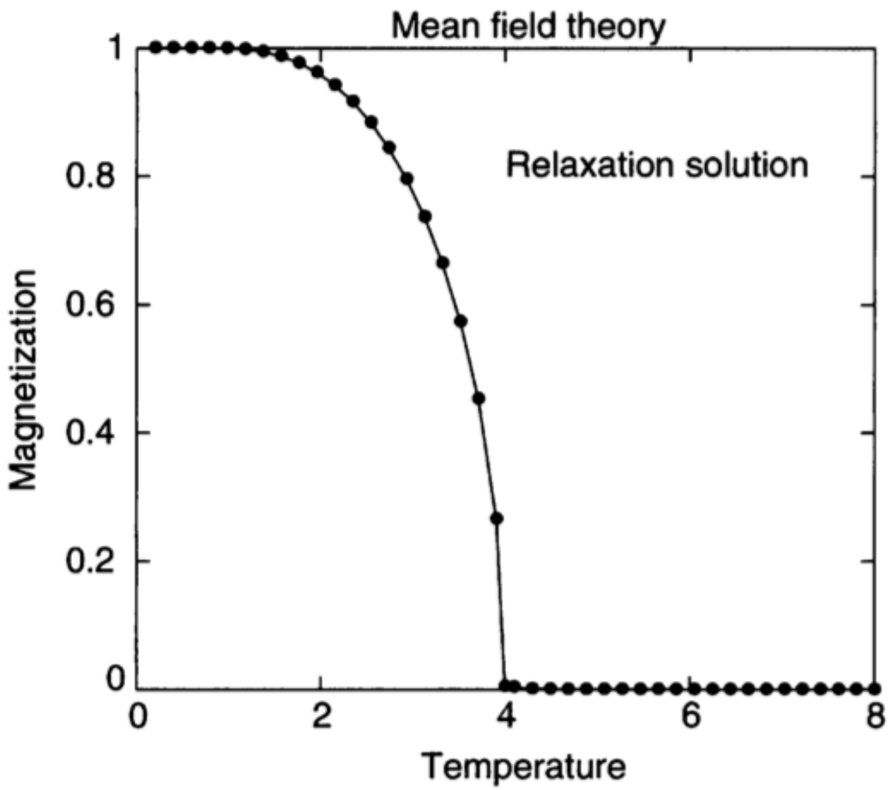
$$\langle s \rangle = 0$$

$$\langle s \rangle = \sqrt{\frac{3}{T}\left(\frac{k_B T}{z \cdot J}\right)^3}\left(\frac{z \cdot J}{k_B} - T\right)^{1/2} \sim \left(T_c - T\right)^{\beta}$$

$$T_c = \frac{z \cdot J}{k_B} = 4$$

$$\beta = 1/2$$

8.1 Modelo de Ising y Teoría del Campo Medio



$$\langle s \rangle \sim (T_C - T)^{\beta} \quad ; \quad \mathrm{T} \to \mathrm{T}_C = \frac{zJ}{k_B} \quad , \quad \frac{J}{k_B} = 1 \quad , \quad \beta = 1/2$$

Tema 8: El método de Montecarlo

8.2 El método de Montecarlo: el algoritmo de Metropolis

Modelo: sistema de espines en contacto con un baño térmico a temperatura T.

Equilibrio dinámico

Método de Montecarlo: números aleatorios para simular la interacción del sistema con el baño térrmico.

- Se elige un espín, s_i
- Se le da la vuelta: $s_i \longrightarrow -s_i$
- Se calcula la energía necesaria: $E_{volteo} = E_i - J\sum_{\langle ij \rangle}(-s_i)s_j$
- Si es favorable, se lo deja volteado
- Si no es favorable, le damos la "oportunidad" de voltear mediante un número aleatorio, comparando dicho número con el factor de Boltzmann, $\exp(-E_{volteo}/k_B T)$

Es final menos inicial, es decir, al revés. Cuidado que igual aparece mal en algún otro punto del pdf.

Algoritmo de Metropolis

Tema 8: El método de Montecarlo

8.2 El método de Montecarlo: el algoritmo de Metropolis

Supongamos un sistema con un número grande de espines. Elegimos uno de ellos y lo volteamos.

$$\text{Microestado 1 } (E_1) \longrightarrow \text{Microestado 2 } (E_2)$$

$$E_1 > E_2$$

$$P_{1\to 2} = 1$$

$$P_{2\to 1} = \exp(-E_{volteo}/k_B T) = \exp\left(-(E_1 - E_2)/k_B T\right)$$

$$N_{1\to 2} = N_{2\to 1}$$

$$P_1 \cdot P_{1\to 2} = P_2 \cdot P_{2\to 1}$$

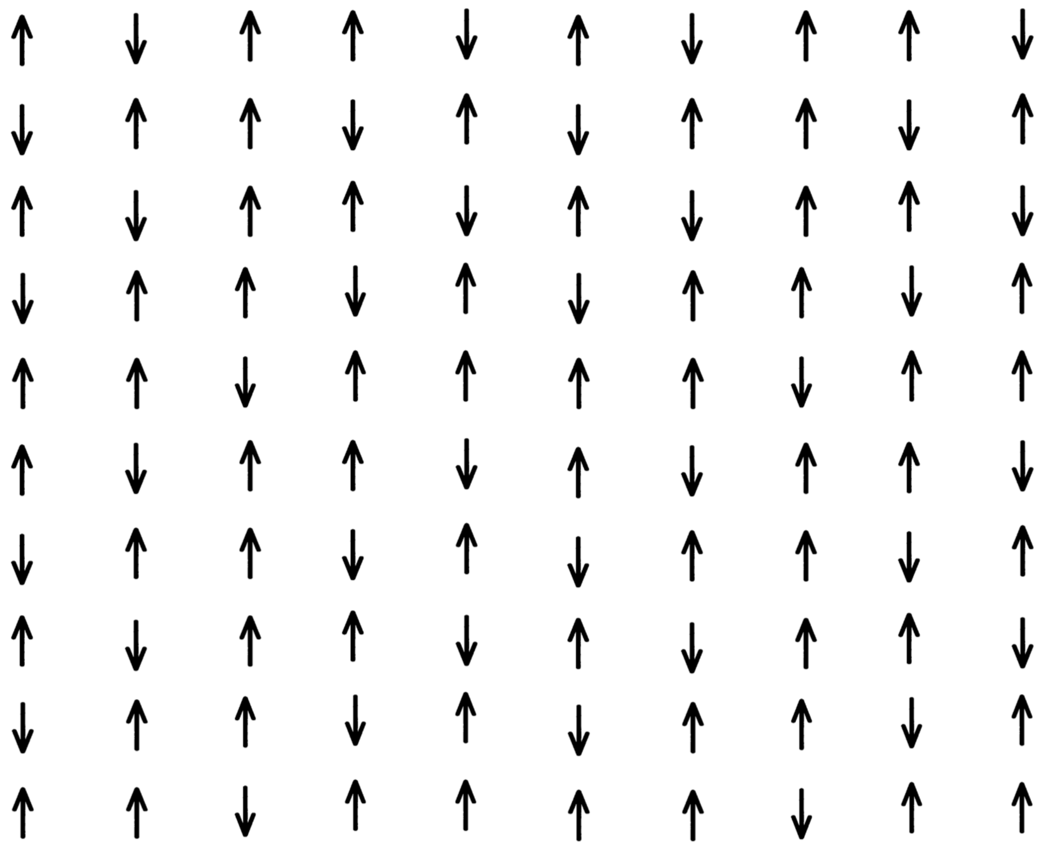
$$\frac{P_1}{P_2} = \frac{P_{2\to 1}}{P_{1\to 2}} = \frac{\exp\left(-(E_1 - E_2)/k_B T\right)}{1} = \exp\left(-(E_1 - E_2)/k_B T\right)$$

Compatible con $P_\alpha \sim e^{-E_\alpha/k_B T}$

Tema 8: El método de Montecarlo

8.3 Transición de fase de segundo orden en el modelo de Ising

Segundo orden: En ausencia de campo magnético externo.



$$E = -J\sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - \mu H \sum_i s_i$$

$$H = 0$$

$$E = -J\sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j$$

Energía en unidades de J:

$$E = -\sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j$$

Temperatura en unidades de J/k_B

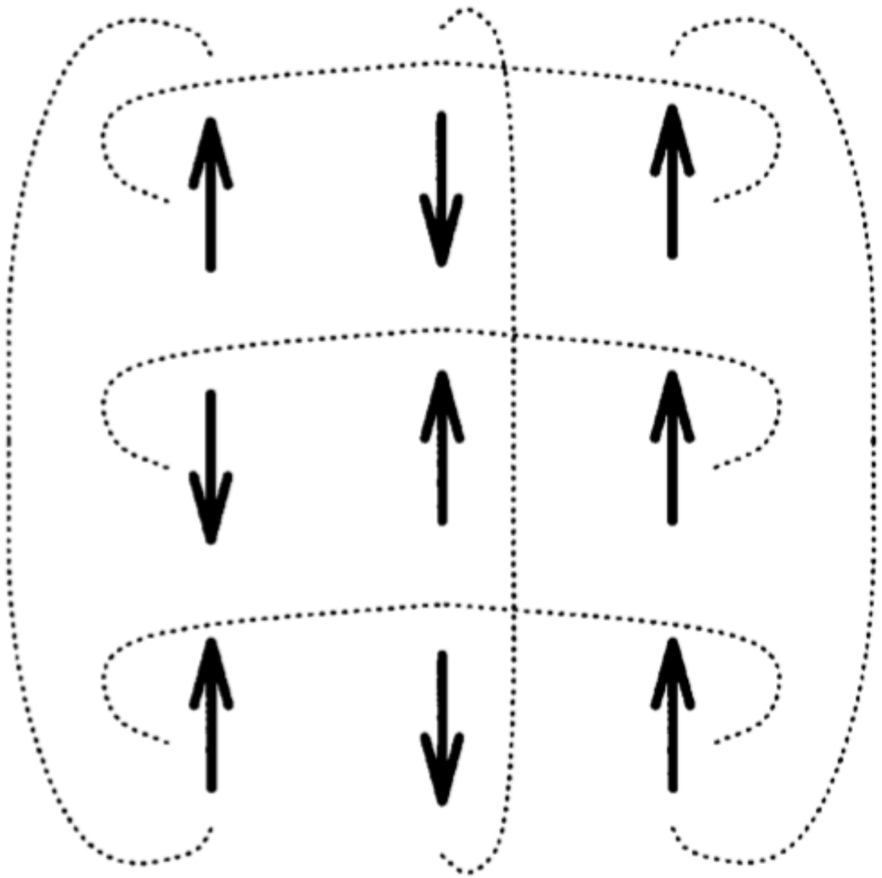
8.3 Transición de fase de segundo orden en el modelo de Ising

Algoritmo a utilizar:

- Fijar los valores de T y H
- Inicializar los espines de la red a un valor arbitrario
- Crear un bucle temporal. En cada paso de tiempo:
    - Recorrer todos los espines del sistema
        - Para cada espín, calcular la energía necesaria para su volteo. Para los espines de los bordes y esquinas aplicar condiciones de contorno periódicas

8.3 Transición de fase de segundo orden en el modelo de Ising

Condiciones de contorno periódicas:



8.3 Transición de fase de segundo orden en el modelo de Ising

Algoritmo a utilizar:

- Fijar los valores de T y H
- Inicializar los espines de la red a un valor arbitrario
- Crear un bucle temporal. En cada paso de tiempo:
  - Recorrer todos los espines del sistema
    - Para cada espín, calcular la energía necesaria para su volteo. Para los espines de los bordes y esquinas aplicar condiciones de contorno periódicas
    - Si $E_{volteo} \leq 0$, voltear el espín
    - Si $E_{volteo} > 0$, generar un número aleatorio, r, ente 0 y 1 y compararlo con $\exp(-E_{volteo}/k_B T)$
      - Si $r \leq \exp(-E_{volteo}/k_B T)$, voltear el espín
      - Si $r > \exp(-E_{volteo}/k_B T)$, dejar el espín como estaba
    - Pasar al siguiente espín
  - Antes de pasar al siguiente paso temporal, calcular las magnitudes de interés, como M, o E
- Almacenar y/o representar las magnitudes de interés en función del tiempo

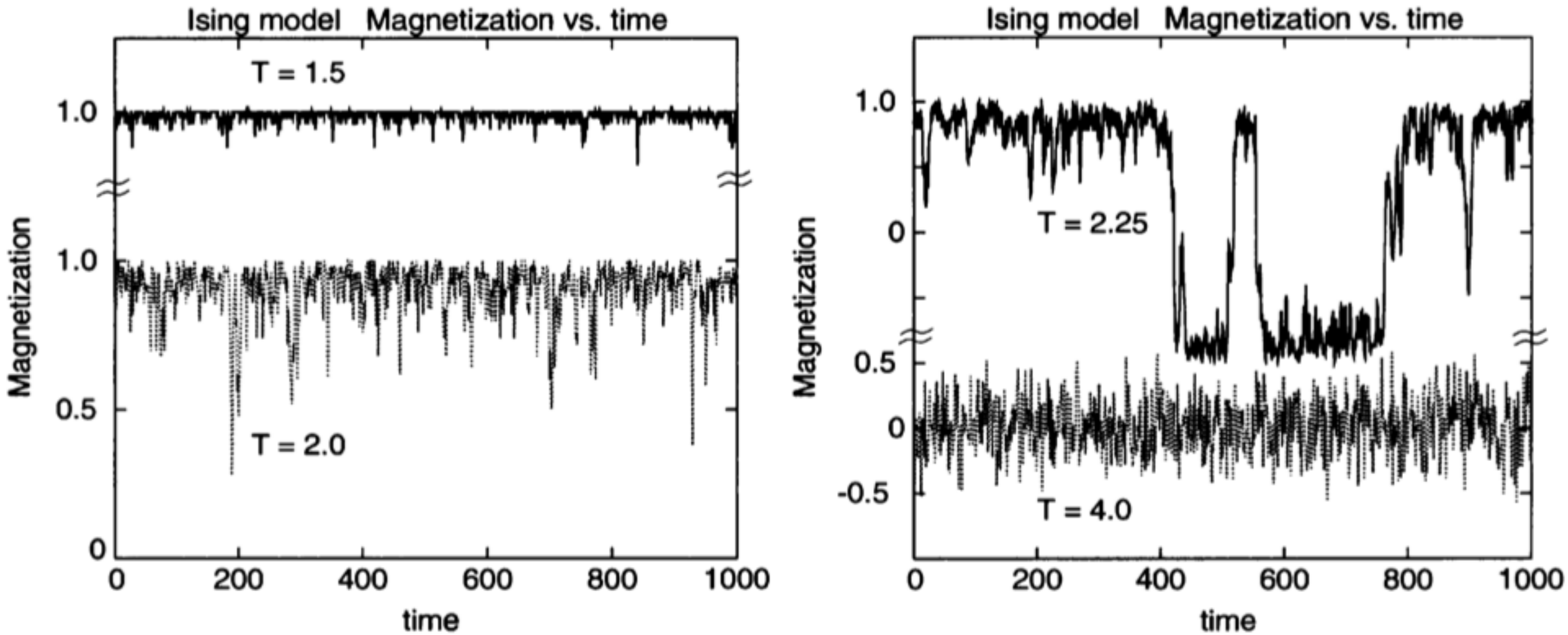
$$M = \sum_i s_i$$

$$E = -\sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j$$

Tema 8: El método de Montecarlo

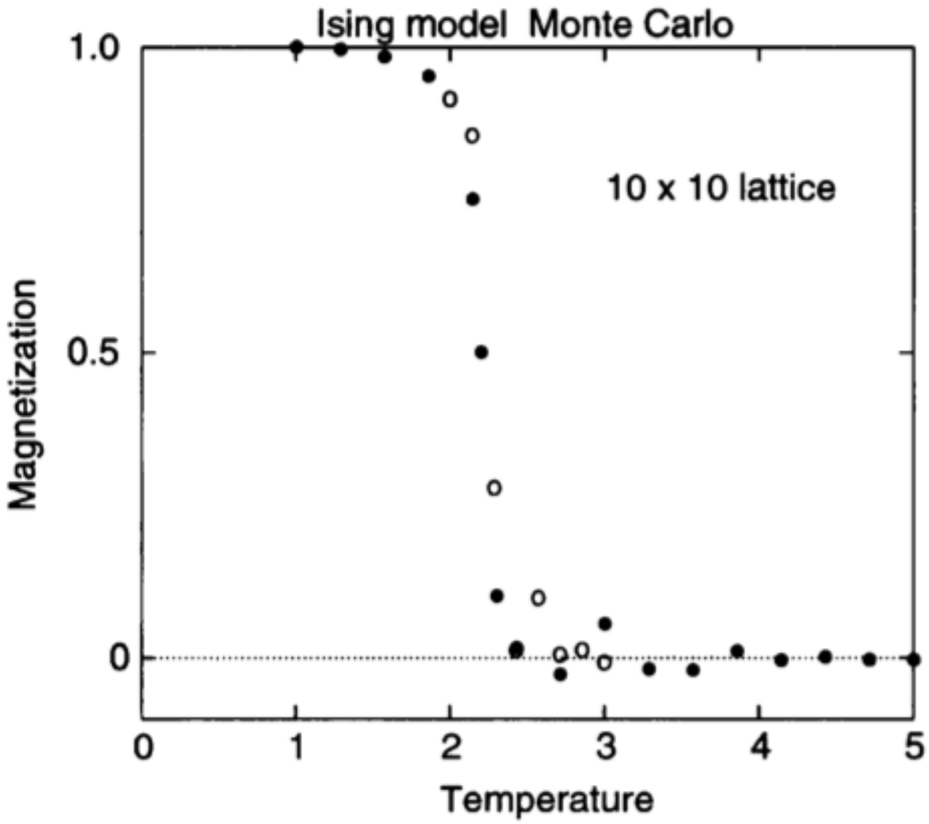
8.3 Transición de fase de segundo orden en el modelo de Ising

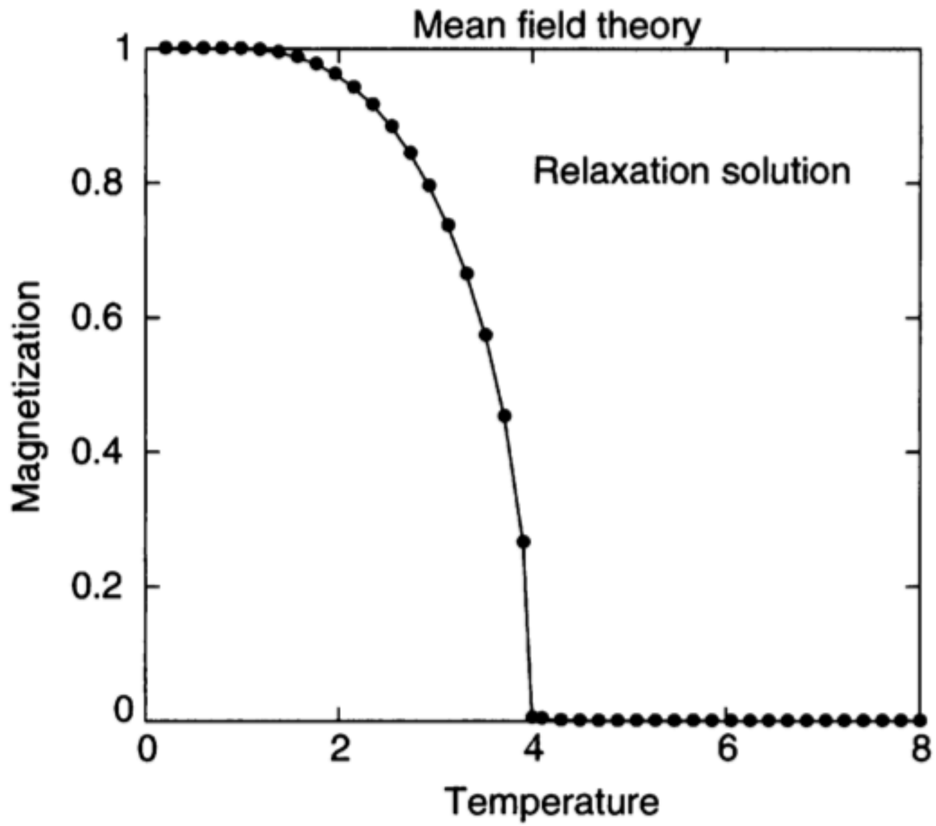
Temperatura crítica del modelo de ising es 2.27 en dos dimensiones.



Tema 8: El método de Montecarlo

8.3 Transición de fase de segundo orden en el modelo de Ising





$$M \sim (T_c - T)^{\beta}$$

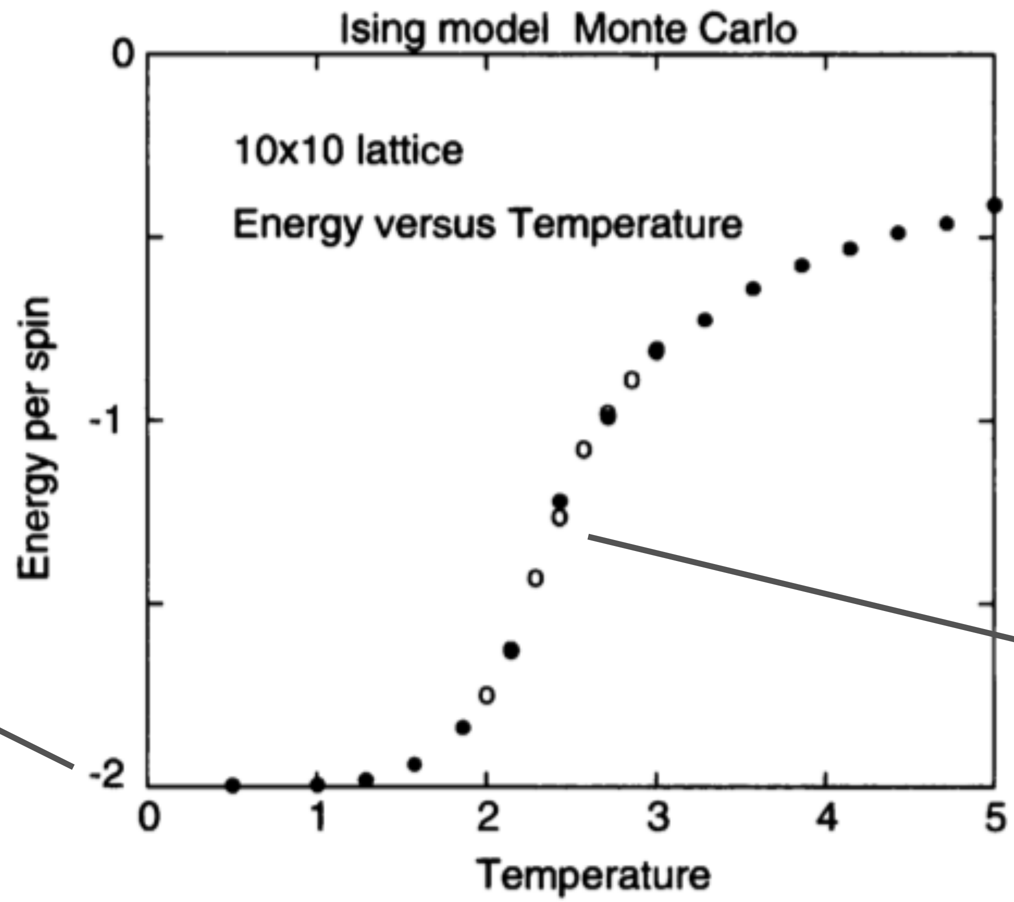
$\beta \approx 1/8$ $\qquad$ $\beta = 1/2$

Valor que obtendremos, (más abrupto)

Tema 8: El método de Montecarlo

8.3 Transición de fase de segundo orden en el modelo de Ising

La energía mínima en -2 y máxima debería ser próxima a 0. No llegamos porque va a haber zonas donde los spines estén orientados en un sentido y otras zonas en otro sentido ya que un spin local de cierta manera influye en los que están alrededor (fenómeno de correlación) si está hacia arriba los de alrededor tenderán a estarlo aunque en promedio debería haber 50/50 y por eso ser 0, pero habrá zonas donde haya cierta energía por este fenómeno.



$E=-4N/2$

$E_{spin}=-2$

Punto de inflexión en el punto de la temperatura crítica. La pendiente toma un valor máximo pero no infinito como debería ser con millones de partículas.

Máximo en $c=d\langle E\rangle/dT$

$$c \sim \frac{1}{|T-T_c|^{\alpha}}$$

Calor específico.

8.3 Transición de fase de segundo orden en el modelo de Ising

Estrategia para representar el calor específico frente a la temperatura:

$$\langle E \rangle = \frac{1}{N}\sum_i E_i \qquad i \rightarrow \text{pasos temporales}$$

N no es el número de spines sino el número de espacios temporales.

La varianza se define como:

$$(\Delta E)^2 \equiv \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$$

donde

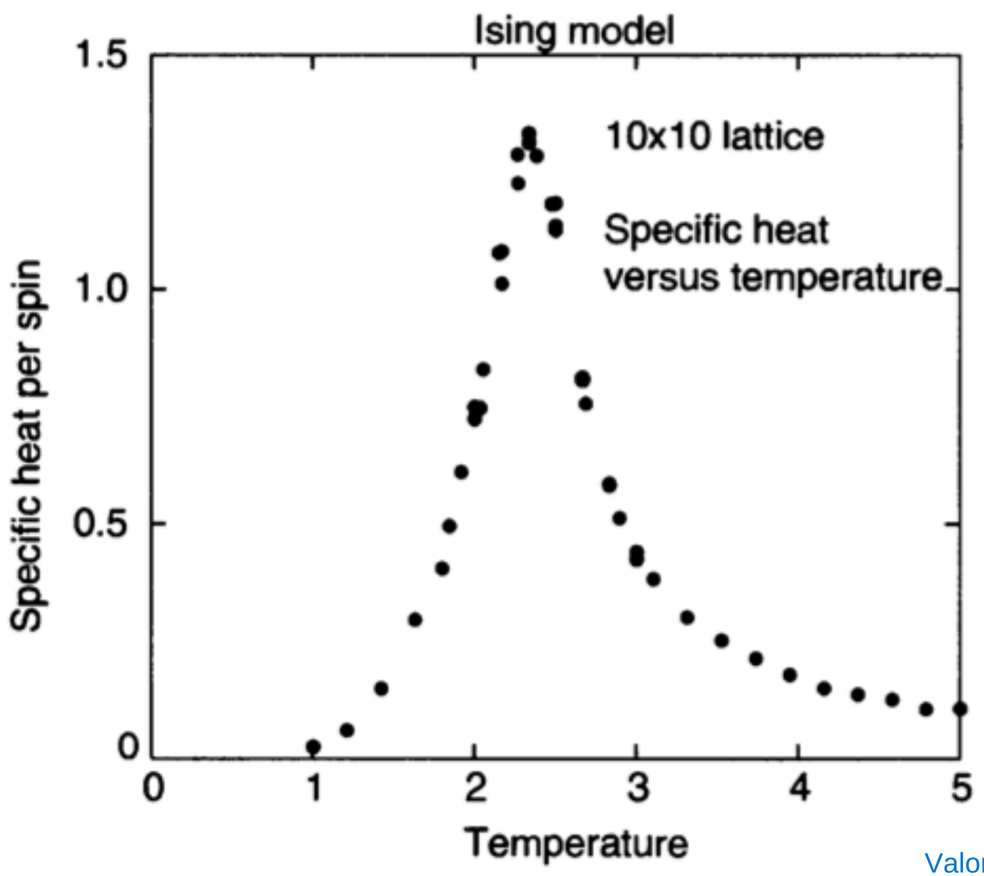
$$\langle E^2 \rangle = \frac{1}{N}\sum_i E_i^2$$

Según el Teorema de Fluctuación-Disipación:

$$C = \frac{(\Delta E)^2}{k_B T^2}$$

8.3 Transición de fase de segundo orden en el modelo de Ising

$$C = \frac{(\Delta E)^2}{k_B T^2}$$

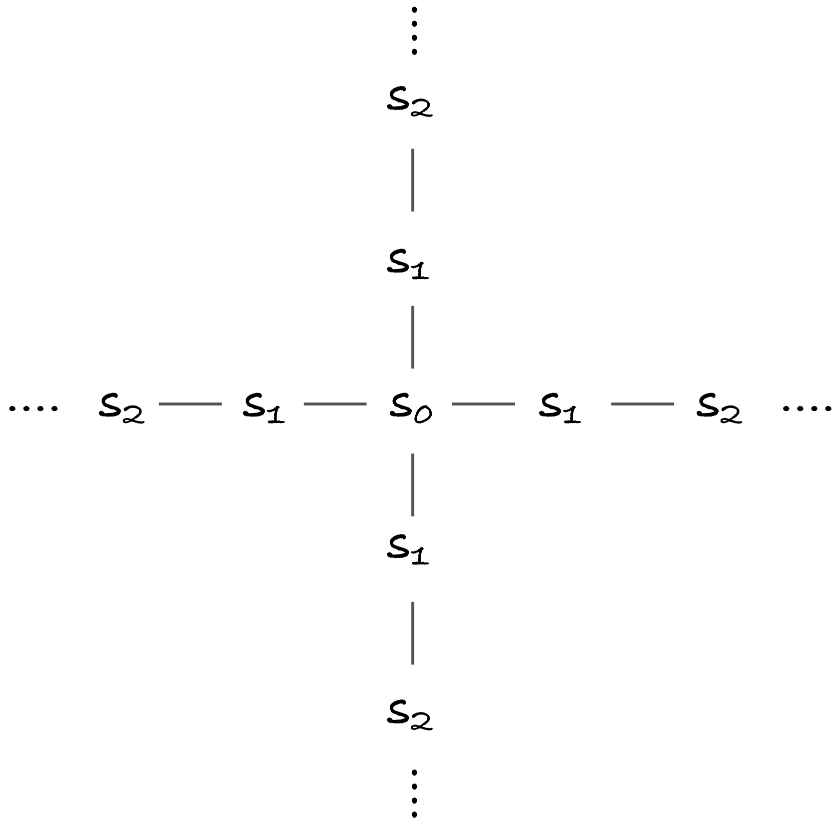


La tendencia es que al aumentar el número de espines tiene que ser una delta. Más estrecho y más alto.

Valor que depende del campo magnético obtenido con una fórmula en la que no usamos ningún campo magnético.

Comportamiento similar para la susceptibilidad magnética: $\chi = dM / dH$; $\chi = \frac{(\Delta M)^2}{k_B T^2}$

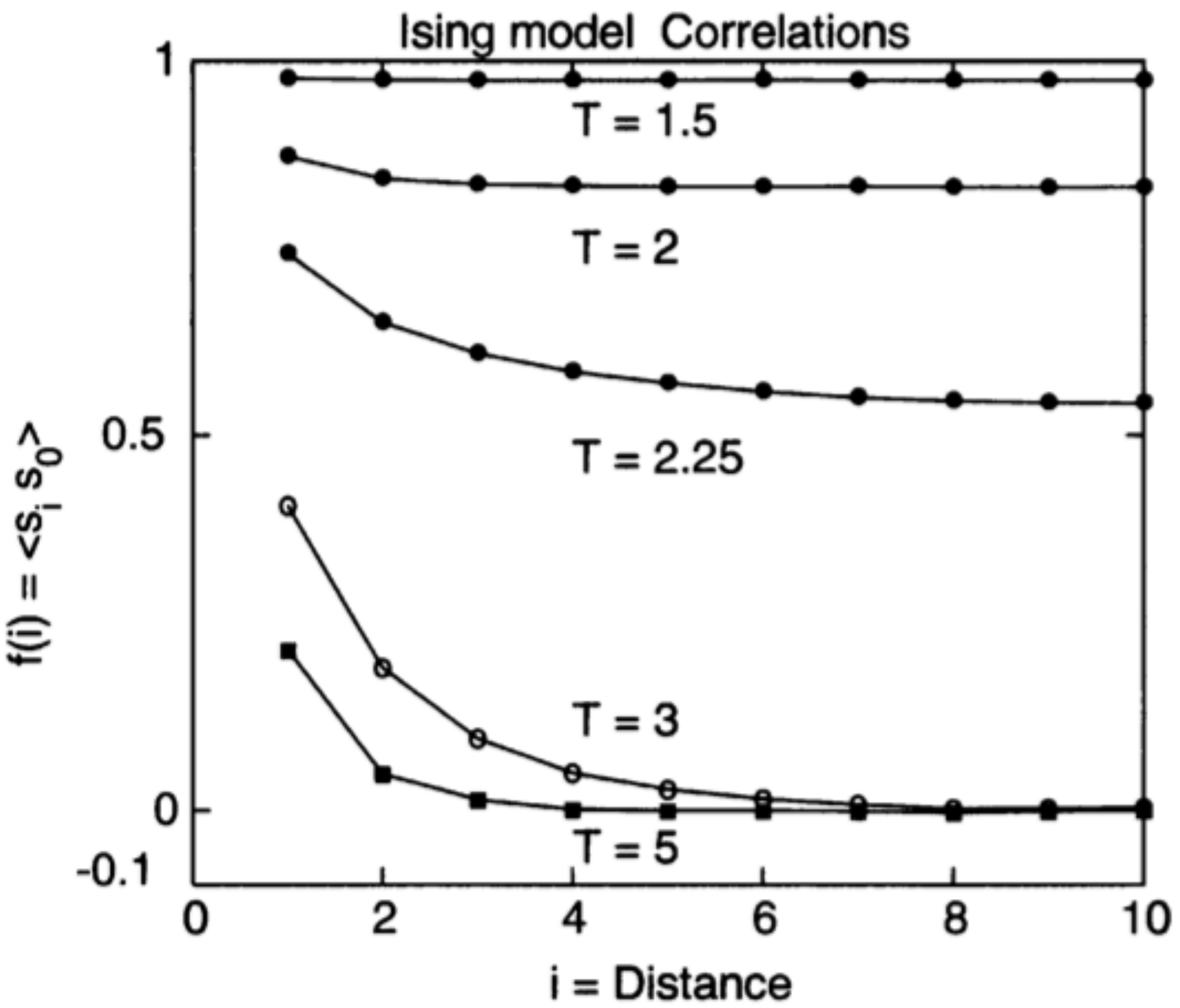
8.3 Transición de fase de segundo orden en el modelo de Ising



Función de correlación: $f(i) = \langle s_0 s_i \rangle$

Con esto cuantificamos cuánto de lejos llega la influencia del átomo central en otros. En i ponemos el valor del vecino, es decir, para los primeros vecinos i = 1 y para segundos i = 2. Calculamos todos y hacemos un promedio entre ellos. Llegamos hasta una distancia igual a la mitad del tamaño de la malla de spines.

8.3 Transición de fase de segundo orden en el modelo de Ising



Aquí en 20x20 spines. Que salga un valor alto no quiere decir que haya una gran correlación. A temperaturas bajas (1.5) todos tienen una misma dirección. A partir de T=2 vemos como se influye más sobre los primeros vecinos que en el resto, hay una cierta correlación.

Pasado el punto crítico la distancia de correlación vuelve a disminuir, aunque claramente hay un efecto de correlación muy marcado. Queda más evidenciado el efecto. Conforme aumenta la temperatura la distancia de correlación va disminuyendo.

Distancia de correlación = ver como es la influencia de un átomo (central) sobre sus vecinos.

8.3 Transición de fase de segundo orden en el modelo de Ising

$$f(i) \sim c_1 + c_2 \exp(-r_i/\xi)$$

$$c_1 = \lim_{r_i \to \infty} f(i)$$

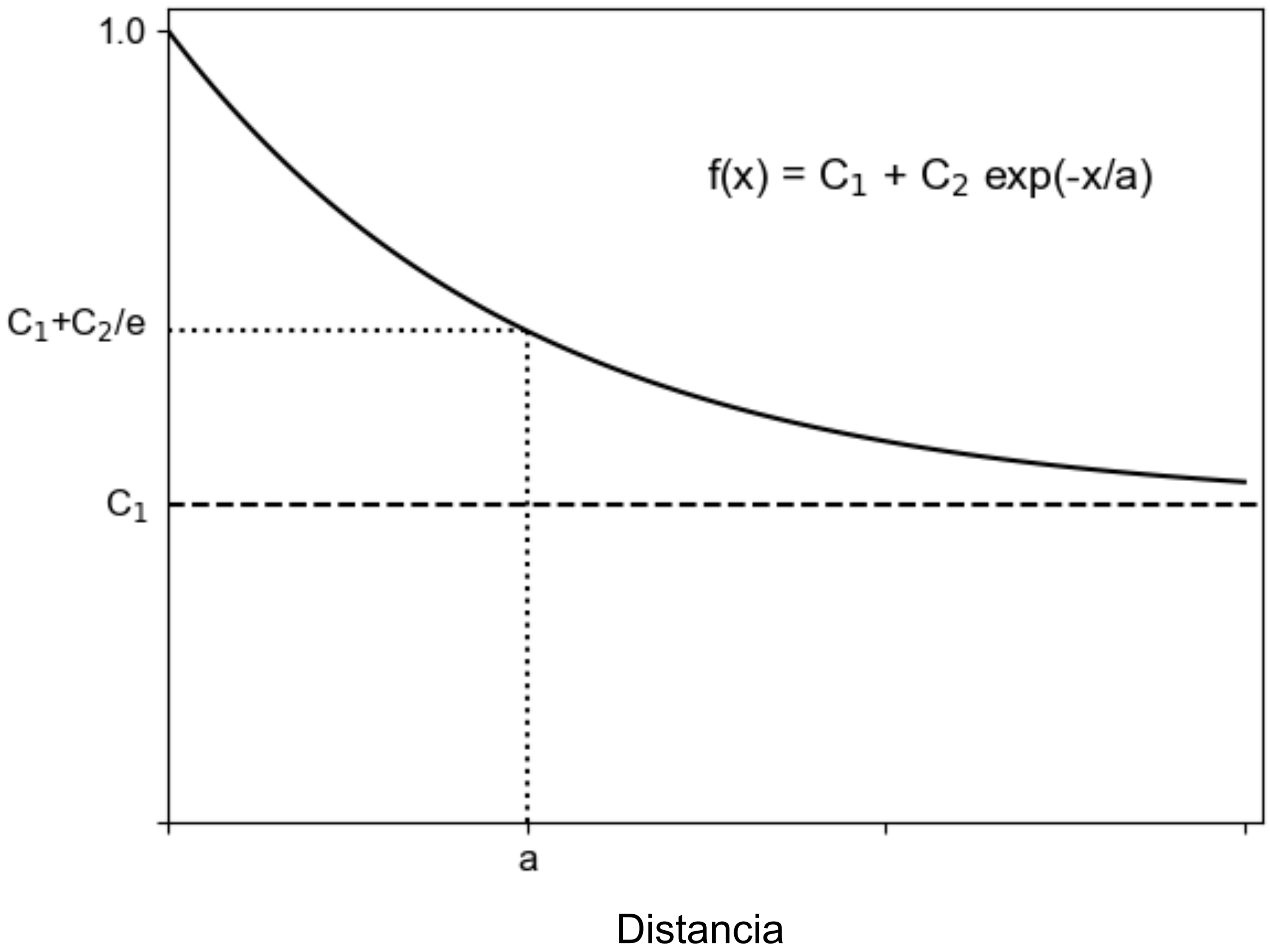
Cuando $r_i \longrightarrow \infty$

$$f(i) = \langle s_o s_i \rangle \xrightarrow[i \to \infty]{} \langle s_o \rangle \langle s_i \rangle = \langle s \rangle^2$$

Por tanto: $$c_1 = \langle s \rangle^2$$

Tema 8: El método de Montecarlo

8.3 Transición de fase de segundo orden en el modelo de Ising



8.3 Transición de fase de segundo orden en el modelo de Ising

Conclusión importante: La Teoría del campo medio falla porque no tiene en cuenta la correlación, no tiene en cuenta estas cosas estadísticas que influyen en la realidad. La Teoría del campo medio solo hace promedios y esta es la potencia de éste método.

$$f(i) \sim c_1 + c_2 \exp(-r_i/\xi)$$

$$c_1 = \lim_{r_i \to \infty} f(i)$$

Cuando $r_i \longrightarrow \infty$

$$f(i) = \langle s_0 s_i \rangle \xrightarrow[i \to \infty]{} \langle s_0 \rangle \langle s_i \rangle = \langle s \rangle^2$$

Por tanto: $c_1 = \langle s \rangle^2$

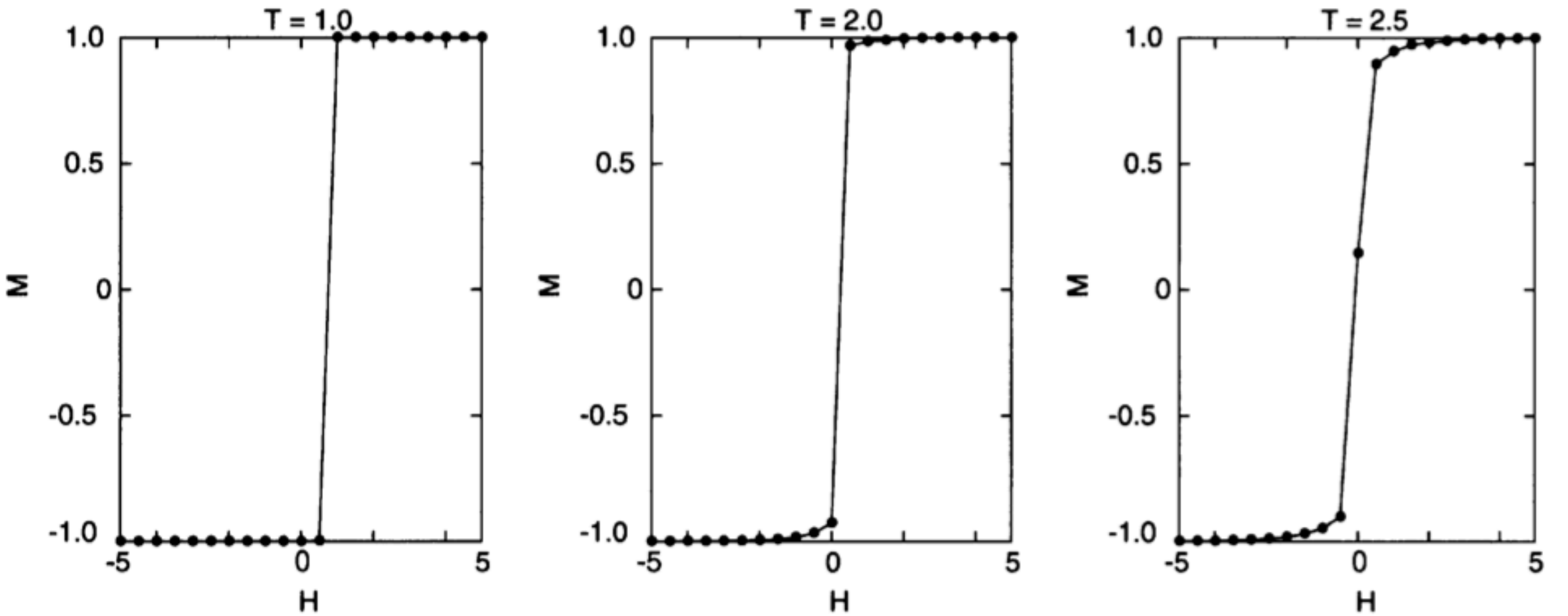
La longitud de correlación también diverge con exponente crítico:

$$\xi \sim \frac{1}{|T - T_c|^{\nu}}$$

8.4 Transición de fase de primer orden en el modelo de Ising

Segundo orden implica a la magnetización en ausencia de campo magnético externo. Primer orden es más complicada porque metemos la influencia de un campo magnético externo, tenemos dos parámetros que vamos a variar (temperatura y campo magnético) más variedad. Utilizamos el mismo algoritmo variando esta ecuación.

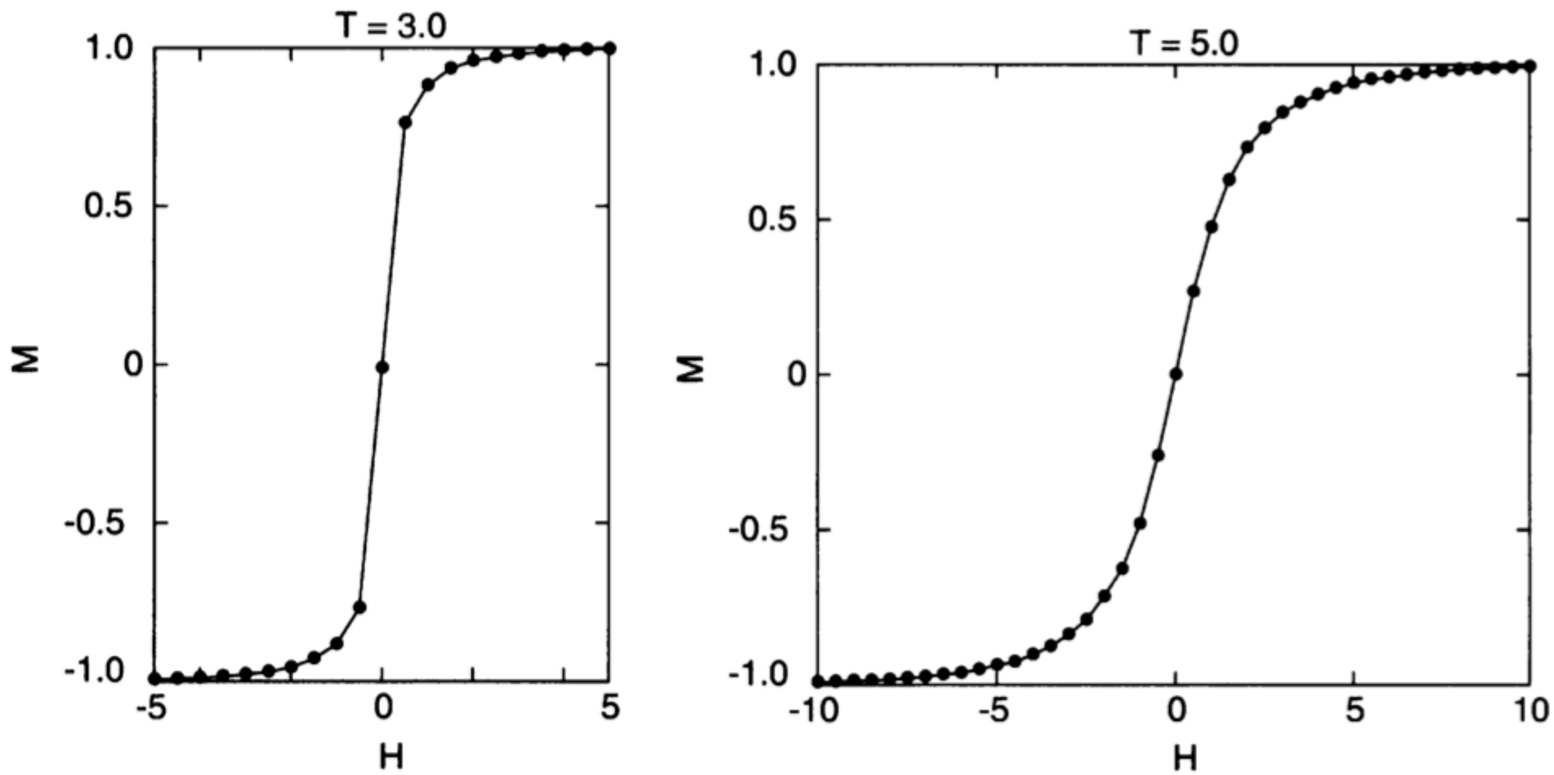
$$E_{volteo} = \sum_{\langle ij \rangle} s_i \cdot s_j - \mu \cdot H \cdot s_i$$



Magnetización respecto al campo magnético para varias temperaturas. En T = 1 hay una clara discontinuidad (todos los espines pasan simultaneamente de -1 a +1) y esto nos indica que estamos en una transición de fase de primer orden. En T = 2 ocurre prácticamente lo mismo. Por encima de la temperatura crítica ya no se da el fenómeno de la magnetización espontánea. El punto intermedio indica que para H=0 hay un valor de la magnetización que no es +1 ni -1.

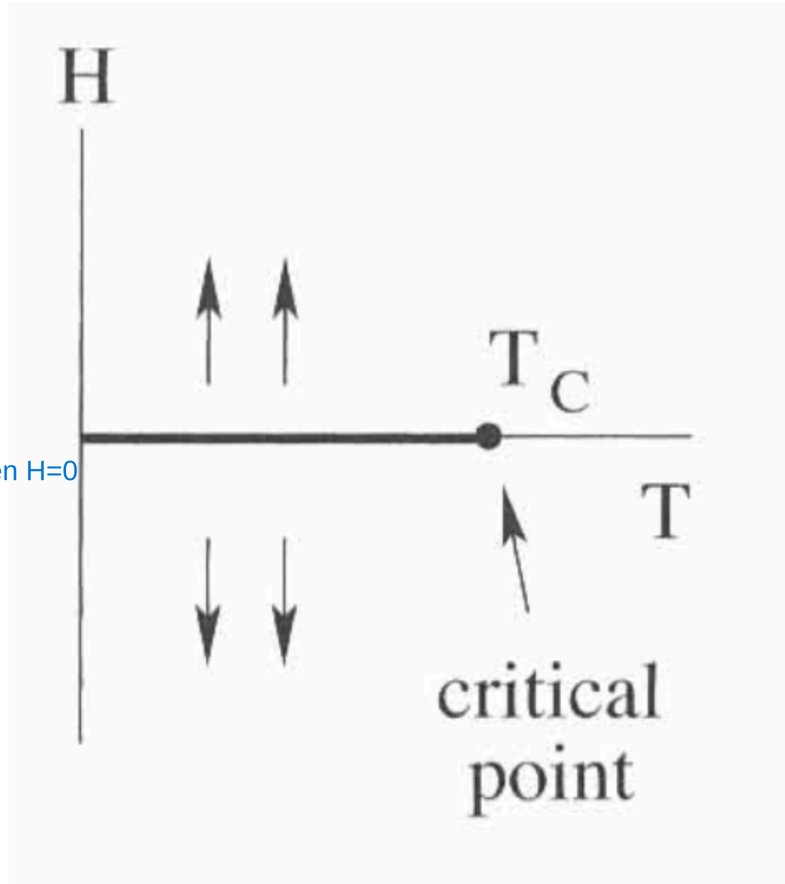
8.4 Transición de fase de primer orden en el modelo de Ising

$$E_{volteo} = \sum_{\langle ij \rangle} s_i \cdot s_j - \mu \cdot H \cdot s_i$$

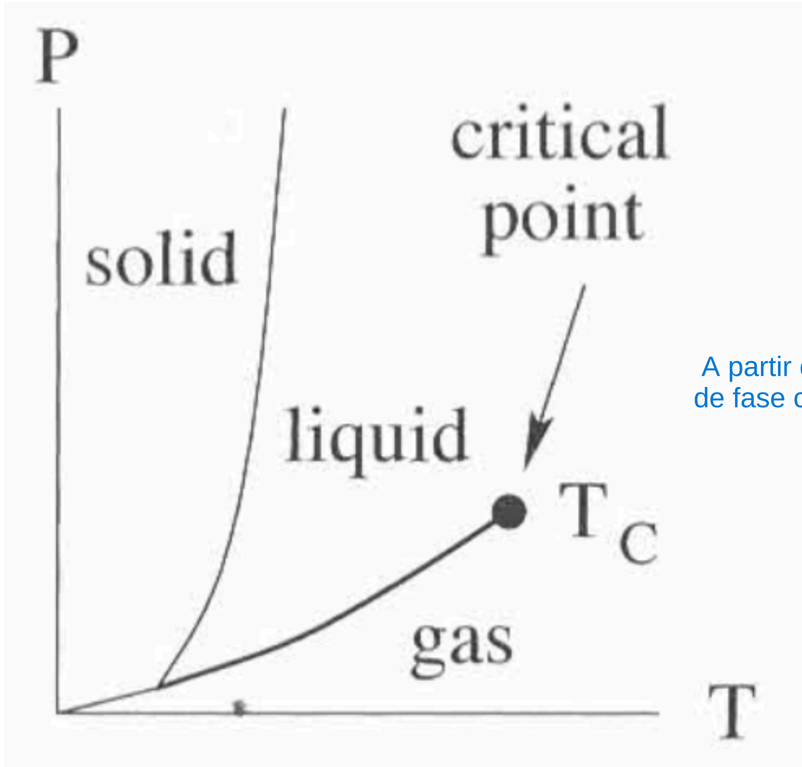


A temperaturas mayores se ve la continuidad con mayor claridad, se ve la sucesión de puntos que pasan de la magnetización negativa a la positiva.

8.4 Transición de fase de primer orden en el modelo de Ising



línea de transformación en H=0



A partir del punto transición de fase continua.

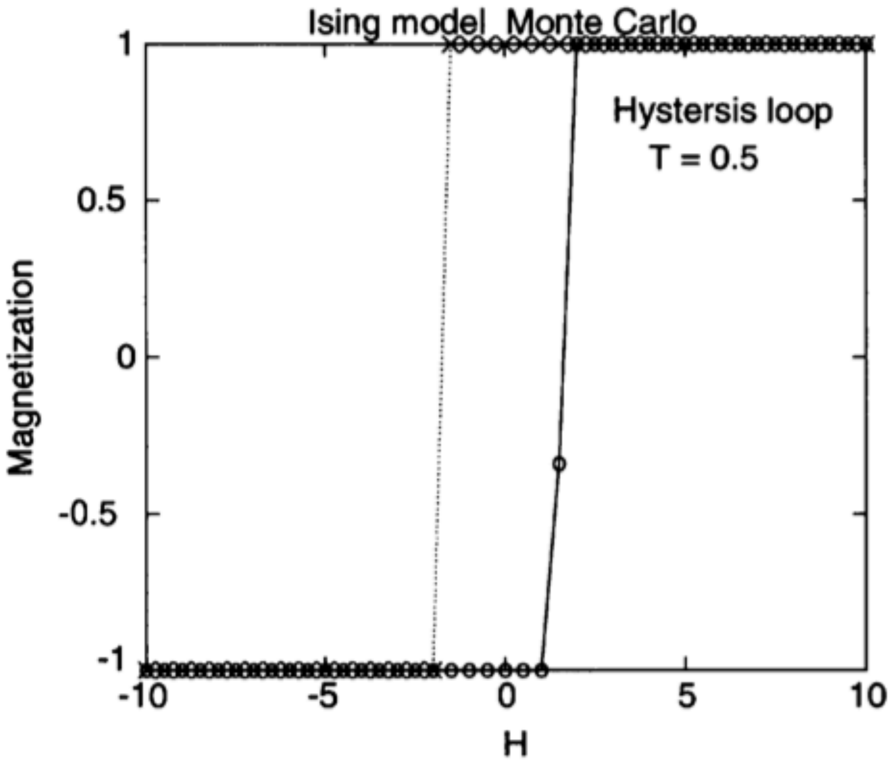
Ejemplo del agua. Variamos la presión en vez del campo magnético.

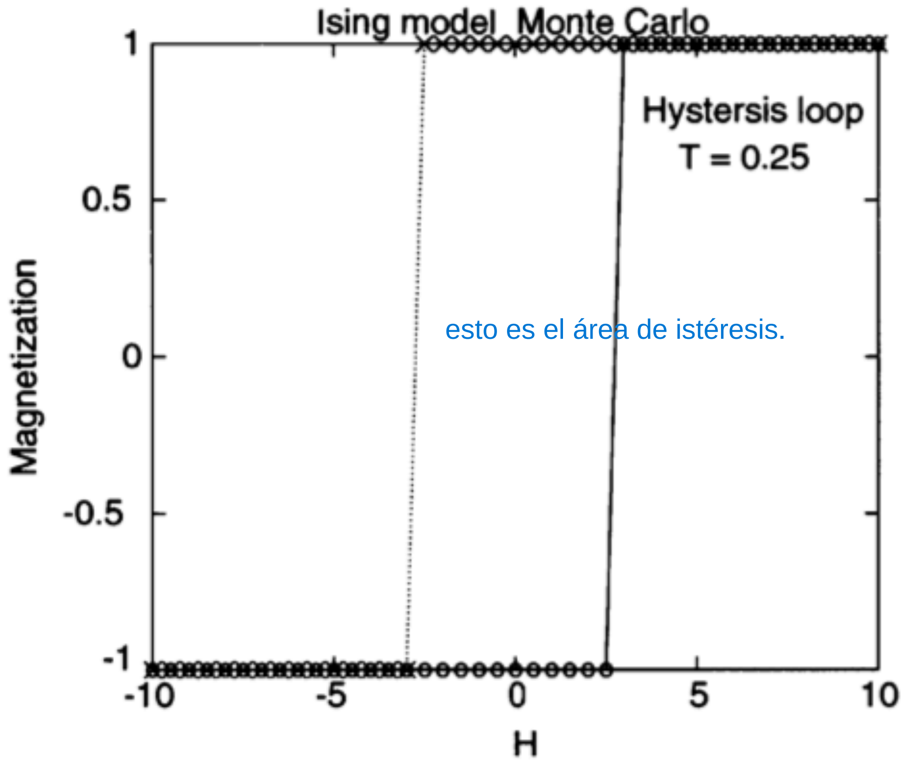
Tema 8: El método de Montecarlo

8.4 Transición de fase de primer orden en el modelo de Ising

En segundo orden las fluctuaciones nos avisan cuando nos acercamos a la transición de fase. Este fenómeno no ocurre en las de primer orden.

Mirar lo que es el fenómeno de istéresis y el área de istéresis. se habla también de estado metaestable.





esto es el área de istéresis.

Las propiedades magnéticas de los materiales ferromagnéticos dependen de su historia (como empezaban antes de magnetizarlos).

Una simulación para cada valor de H. 1000 pasos para cada simulación, obtenemos una T y pasamos a la siguiente.