

UNIVERSIDAD DE GRANADA

FÍSICA COMPUTACIONAL

DOBLE GRADO EN FÍSICA Y MATEMÁTICAS

---

# Modelo de Ising.

---



Pilar Pérez Piedra

# Índice

<b>1. Fundamento teórico</b>	<b>2</b>
<b>2. Resultados y discusión</b>	<b>4</b>
2.1. Magnetización promedio . . . . .	4
2.2. Energía media . . . . .	6
2.3. Calor específico . . . . .	6
2.4. Función de Correlación . . . . .	11
<b>3. Conclusiones</b>	<b>15</b>

# Resumen

Se lleva a cabo un análisis de distintas magnitudes físicas de interés estudiando su dependencia con la temperatura y poniendo de manifiesto los efectos de trabajar con un sistema finito. Además, se calculará de forma numérica el valor del punto crítico así como diversos exponentes críticos de interés con el fin de calificar nuestro método numérico al comparar estos con los datos teóricos de referencia.

## 1. Fundamento teórico

La motivación del modelo de Ising fue modelar el comportamiento de una serie de materiales que sufrían un cambio brusco en sus propiedades magnéticas al variar la temperatura. Las características del modelo basado en una red cuadrada bi-dimensional de tamaño  $N \times N$  se pueden consultar en [1].

Este modelo fue resuelto por primera vez usando la técnica de matriz de transferencia por L. Onsager con campo magnético nulo. A continuación, presentamos únicamente los resultados esenciales para nuestro estudio mas se pueden consultar de forma completa en [3].

En primer lugar, se precisó la expresión para la **magnetización promedio** :

$$m = [1 - (\sinh(2\beta J))^{-4}]^{1/8} \text{ para } T \leq T_c \quad (1)$$

siendo nula para  $T \geq T_c$ . Este cambio en el comportamiento del material es fruto de una transición de fase de segundo orden en el que el material comienza a ser ferromagnético. Por tanto, la temperatura crítica será aquel valor de  $T$  para el que se anule la magnetización, o lo que es equivalente, para el que  $\sinh(2\beta J) = 1$ , se produzca el cambio de fase. Tomando unidades tales que  $J = 1$  y  $\beta = 1/T_c$ , es decir,  $k_B = 1$ , se deduce

$$T_c = 2(\ln(1 + \sqrt{2}))^{-1} \approx 2,269$$

Este cambio de fase supone una transición repentina en la **energía media**  $e_N$  asociada al sistema. Para temperaturas por debajo del punto crítico,  $e_N$  toma un cierto valor constante mientras que para temperaturas superiores a  $T_c$  se produce un salto a un nuevo valor de energía, el asociado al sistema tras el cambio de fase.

En segundo lugar, para valores cercanos a la temperatura crítica del sistema, se estimó una aproximación para el **calor específico** dada por:

$$c \approx -0,4945 \ln \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right| + cte \quad (2)$$

Este presenta por tanto una divergencia hacia  $+\infty$  cuando  $T \rightarrow T_c$ .

Otra característica distintiva de las transiciones de fase de segundo orden es el desarrollo de correlaciones de largo rango dentro del sistema. Para estudiar este fenómeno

consideramos la **función de correlación**  $f(i)$  que expresa la correlación entre un spin en la posición  $(n, m)$  y otro en la posición  $(n + i, m)$  con  $i = 0, \dots, N/2$ . Su comportamiento se ve descrito por la siguiente relación:

$$f(i) \propto e^{-i/\xi}$$

donde  $\xi$  hace referencia a la longitud de correlación, magnitud que describe el tamaño típico en el que se agrupan en cúmulos los espines de un sistema magnético en equilibrio. En el límite termodinámico,  $\xi$  diverge a medida que la temperatura se aproxima a la crítica.

## Exponentes críticos y teoría de tamaño finito

Los **exponentes críticos** describen el comportamiento, en ley de potencias  $k$ , de funciones termodinámicas  $G(T)$  en las proximidades de las transiciones de fase, es decir, alrededor de la temperatura crítica  $T_c$ .

$$G(T) \sim \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^k$$

Por ejemplo, el comportamiento en la región crítica, zona alrededor de  $T_c$ , de la longitud de correlación descrita previamente está dada por:

$$\xi \sim \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^{-\nu} \quad (3)$$

donde  $\nu$  es el exponente crítico asociado. Además, en los sistemas magnéticos se pueden definir los siguientes exponentes críticos:

- $\gamma$ : Gobierna la singularidad de la susceptibilidad magnética,  $\chi \sim \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^{-\gamma}$ .
- $\alpha$ : Gobierna la singularidad magnética del calor específico,  $c \sim \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^{-\alpha}$ .
- $\beta$ : Gobierna el comportamiento de la magnetización para  $T < T_c$ ,  $m \sim \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^\beta$ , ya que para temperaturas superiores la magnetización es cero.

Atendiendo a la técnica de la matriz de transferencia utilizada por L. Onsager con campo magnético nulo se tienen los siguientes resultados teóricos[3]:

Función	Magnetización	Calor	Susceptibilidad
Exponente crítico teórico	$\beta = 1/8$	$\alpha = 0$	$\chi = -7/4$

Por otro lado, recordamos que las transiciones de fase mencionadas se producen en el límite termodinámico, es decir, cuando  $N \rightarrow \infty$ . Por ello, a pesar de trabajar en los

estudios del modelo con sistemas grandes, estos no son infinitos luego surgen los llamados efectos de tamaño finito.

A la variación en las propiedades del sistema cuando el tamaño de este se incrementa se le conoce como **teoría de tamaño finito**. Así, puesto que existen sistemas fuertemente correlacionados donde las fluctuaciones críticas se desarrollan con el incremento del tamaño incluyendo puntos donde ocurren las transiciones de fase, se utiliza la teoría de tamaño finito para extrapolar los datos desde nuestra simulación computacional finita[4].

No obstante, cabría pensar que la posibilidad de realizar simulaciones tan sólo para sistemas finitos se trata de un inconveniente. Sin embargo, gracias a la teoría de tamaño finito, la parte singular en límite termodinámico puede ser descrita por un ansatz de escalamiento tal y como se puede consultar en la sección 4.8.1 Teoría de escalamiento finito en [5].

En consecuencia, cuando trabajamos con tamaños  $N$  finitos, el comportamiento de las magnitudes mencionadas previamente se verá afectado a partir de la región crítica donde las divergencias esperadas pasan a ser máximos, o mínimos respectivamente, finitos de las funciones. Asimismo, las magnitudes estudiadas irán tendiendo al comportamiento teórico al aumentar el valor de  $N$ .

## 2. Resultados y discusión

Dado un cierto tamaño  $N$ , se elige una configuración inicial ordenada del sistema,

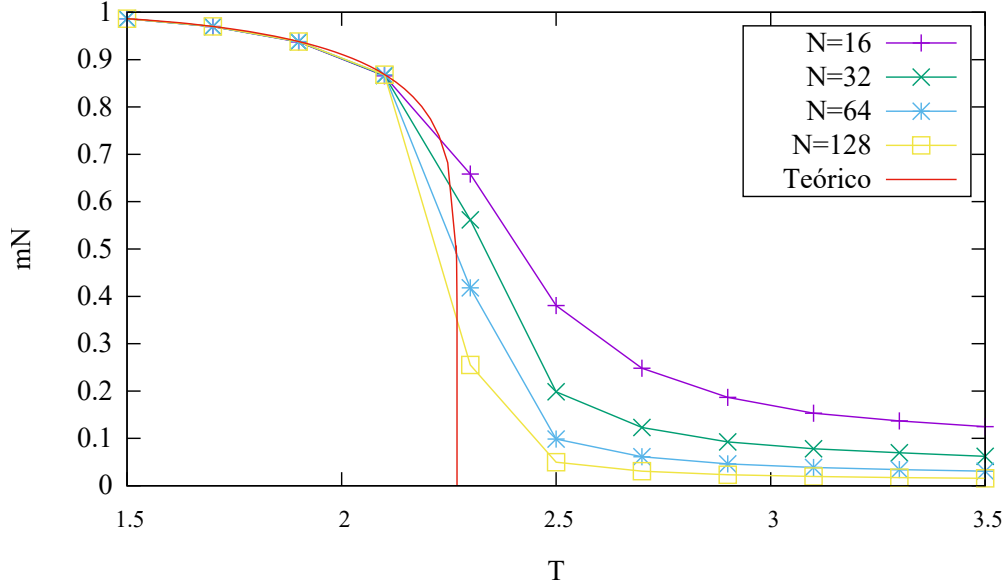
$$R[i][j] = 1 \quad \forall i, j \in [1, N],$$

una semilla, 1352514, para la generación de números aleatorios en el algoritmo presentado en [1], y se deja evolucionar el sistema  $10^6$  pasos Monte Carlo para llevar a cabo el siguiente análisis.

### 2.1. Magnetización promedio

Procedemos a estudiar los efectos de la temperatura y del tamaño  $N$  en la magnetización promedio  $m_N$  del sistema. Para ello, fijamos distintos tamaños,  $N = 16, 32, 64, 128$  y vamos calculando dicha magnitud en un rango de temperaturas  $T \in [1, 5, 3, 5]$ .

Figura 1: Magnetización promedio frente a la temperatura del sistema para diferentes tamaños de la red.



En la Figura 1 observamos cómo la magnetización promedio decrece lentamente en un rango de temperaturas  $T \in [1,5, 2,1]$  de forma similar para todo valor de  $N$ . A partir de aquí, se empiezan a distinguir las curvas de modo que a mayor tamaño  $N$  se tiene una pendiente negativa más pronunciada en la magnetización promedio. No obstante, al pasar  $T = 2,5$  las curvas vuelven a suavizarse mas siguen diferenciadas según  $N$  por su comportamiento característico en el rango  $T \in [2,1, 2,5]$ .

Por otro lado, podemos comparar las curvas obtenidas con el resultado exacto de Onsager, representado en la Figura 1 como "Teórico":

- Para  $T \in [1,5, 2,1]$  percibimos un ajuste perfecto de la simulación para las diferentes  $N$  al modelo teórico, es decir, la magnetización promedio no se ve afectada por el tamaño finito  $N$  para temperaturas por debajo de 2.1.
- Para  $T > 2,1$  el tamaño finito del sistema no permite observar en nuestras simulaciones el comportamiento descrito por la teoría, ya que en ella los resultados se obtienen tras imponer el límite termodinámico, es decir, tras hacer tender el número  $N$  de partículas del sistema a  $\infty$ . Por ello, observamos en nuestras curvas cómo la magnetización se suaviza respecto a la esperada de forma teórica, fenómeno conocido como "rounding effects", lo que hace que la identificación de la temperatura crítica no sea clara. Asimismo, cabe apuntar cómo la magnetización promedio se va acercando al comportamiento teórico conforme aumentamos  $N$  como cabía esperar.

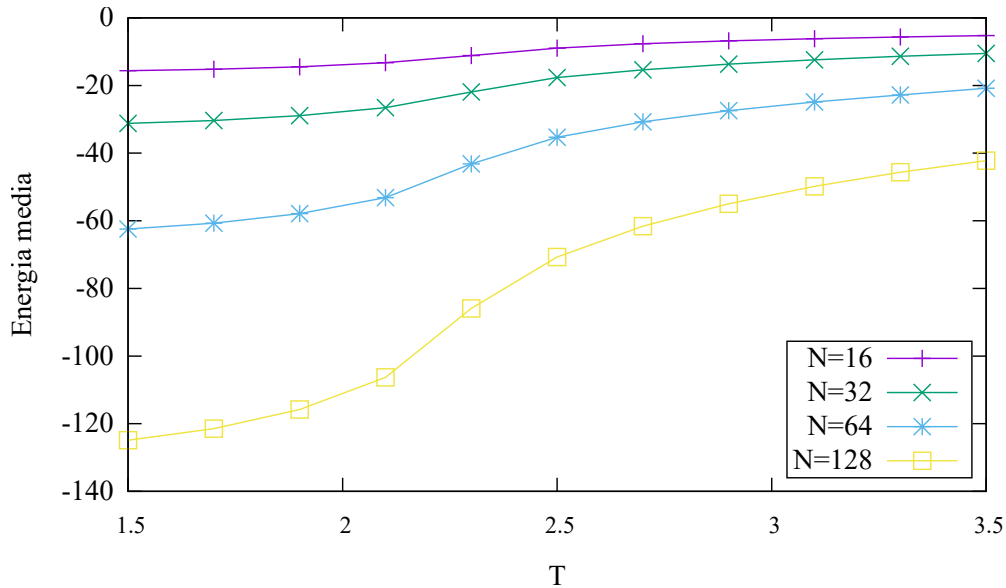
Para concluir esta sección apuntamos que el cálculo del exponente crítico  $\beta$  para la magnetización se posterga hasta poder dilucidar con claridad la temperatura crítica del sistema, en nuestro caso, en la sección dedicada al estudio del calor específico.

## 2.2. Energía media

A continuación, damos paso al estudio de la energía media. Para este se ha utilizado la expresión provista en el guión [1] mas a la hora de comparar con datos de referencia como los expuestos en [3] se observó la necesidad de multiplicar nuestros resultados por un factor  $2/N$ . No obstante, puesto que el estudio se llevó a cabo para cada  $N$  fijo, esta controversia no afecta al comportamiento cualitativo digno de estudio.

En la Figura 2 se observa un incremento de la energía conforme aumenta  $T$ . Este crecimiento es suave en los extremos de la gráfica mas se acentúa alrededor de la temperatura crítica. En particular, las curvas de energía media van tendiendo a una curva con forma de escalón a medida que se incrementa el valor de  $N$  tal y como se predice de forma teórica [3]. Estos dos peldaños de energía representan la energía antes y después de la transición de fase del sistema.

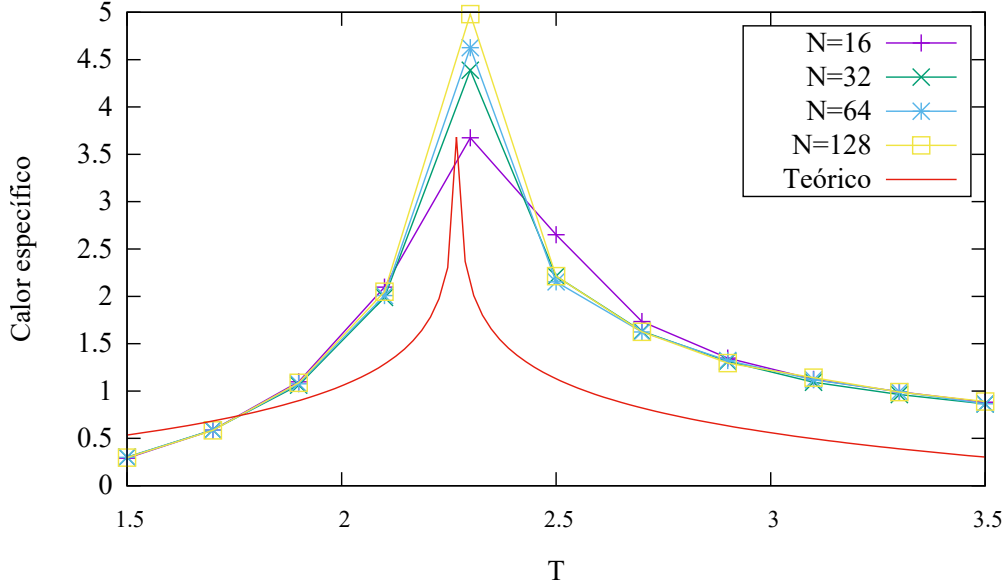
Figura 2: Energía media frente a la temperatura del sistema para diferentes tamaños de la red calculada según [1].



## 2.3. Calor específico

En esta sección se estudia el calor específico para diferentes temperaturas y tamaños. Además, puesto que los efectos de tamaño finito dificultaban la determinación del valor del punto crítico en el estudio de la magnetización promedio, se procede a su cálculo a partir del análisis del calor específico. Por último, se extrapolarán los resultados al valor de  $T_c$  cuando  $N \rightarrow \infty$  y se determinará el exponente crítico  $\beta$  de la magnetización.

Figura 3: Calor específico frente a la temperatura del sistema para diferentes tamaños de la red.



Cabe apuntar que el máximo dibujado para la curva teórica en la Figura 3 es en realidad una divergencia a la cual tienden los resultados de nuestras simulaciones al aumentar el valor de  $N$ . Este máximo experimental para el calor específico se alcanza, según la teoría, para  $T_c$ . Así, con el fin de determinar el valor del punto crítico, se llevan a cabo dos métodos alternativos;

- **Mediante ajuste de la nube de puntos.** En las proximidades de la temperatura crítica,

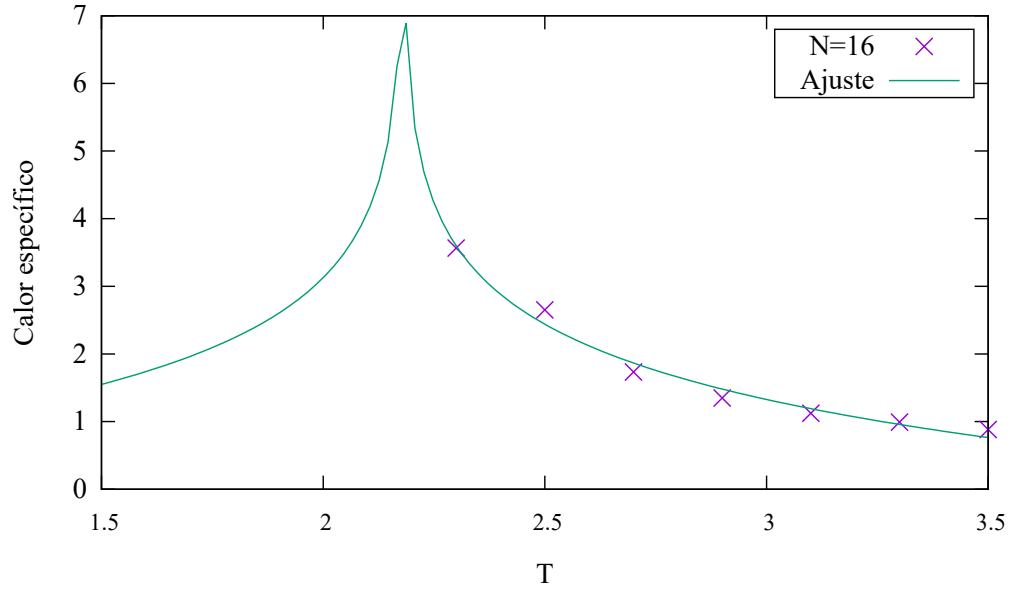
$$C_v(T) \approx a \ln \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right| + b$$

luego se realiza el ajuste de los datos obtenidos en la simulación. No obstante, la suma de errores se hace infinita entorno a la temperatura crítica por lo que *gnuplot* sólo realiza correctamente el ajuste si se usan los datos de una de las colas.

Ilustramos mediante uno de los casos el procedimiento seguido para las diferentes  $N$ :



Figura 4: Calor específico frente a la temperatura del sistema para  $N = 16$ .



Los parámetros del ajuste considerando  $c = T_c$  vienen dados por:

```

final sum of squares of residuals : 0.0939002
rel. change during last iteration : -2.78181e-007

degrees of freedom    (FIT_NDF)                : 4
rms of residuals      (FIT_STDFIT) = sqrt(WSSR/ndf) : 0.153216
variance of residuals (reduced chisquare) = WSSR/ndf : 0.0234751

Final set of parameters      Asymptotic Standard Error
=====
a          = -1.15563         +/- 0.2178      (18.85%)
b          = 0.159924         +/- 0.1489      (93.13%)
c          = 2.19748          +/- 0.05149     (2.343%)

```

donde observamos una suma de residuos pequeña lo que nos lleva a considerar que estamos ante un buen ajuste de la nube de puntos. Así, concluimos que  $T_c = 2,20 \pm 0,05$  para  $N = 16$ .

Repitiendo el proceso expuesto para diferentes tamaños se tienen los siguientes valores críticos:

$N$	16	32	64	128
$T_c$	$2,20 \pm 0,05$	$2,3099 \pm 0,0013$	$2,3058 \pm 0,0006$	$2,398 \pm 0,016$

El primer detalle a resaltar es que el valor de  $T_c$  aumenta, según este método, conforme crece  $N$  mas este resultado entra en discordia con lo predecible de forma teórica. Esta disonancia se achaca a la escasa ristra de datos que forman el ajuste. No obstante, los resultados se ubican próximos a la aproximación teórica  $T_c \approx 2,269$ .

- **Mediante la búsqueda del máximo simulando para distintas temperaturas.** Para cada valor de  $N$  llevamos a cabo distintos experimentos afinando el valor de  $T$  hasta encontrar el máximo buscado. Se presentan los resultados más cercanos al valor crítico obtenido en las simulaciones:

$N = 16$		$N = 32$	
$T$	$C_V$	$T$	$C_V$
2,2958	3,735213	2,2950	4,387711
2,2960	3,735864	2,2958	4,461978
2,2970	3,738641	2,2960	4,454260
2,2980	3,682280	2,2965	4,443384
2,3000	3,674826	2,3000	4,387380
$T_c = 2,2970$		$T_c = 2,2958$	

$N = 64$		$N = 128$	
$T$	$C_V$	$T$	$C_V$
2,2935	5,084530	2,2700	5,824258
2,2940	5,091123	2,2750	6,060067
2,2945	4,936366	2,2800	6,044409
2,2950	4,869955	2,2850	5,807665
2,3000	4,626376	2,2900	5,371301
$T_c = 2,2940$		$T_c = 2,2750$	

La temperatura a la cual se da el calor específico máximo es el valor del punto crítico. Este método corrobora la idea intuitiva expuesta en la representación de la magnetización promedio, figura 1; puesto que las curvas de magnetización van tendiendo a la teórica hacia la izquierda, la temperatura crítica, es decir, el corte con el eje x, se dará para una  $T$  menor conforme vaya aumentando el tamaño  $N$ . Además, conseguimos un valor  $T_c = 2,2750$  para  $N = 128$  el cual se aproxima en gran medida al valor estimado para  $N \rightarrow \infty$ ,  $T_c \approx 2,269$ . En particular, se tiene un error relativo del 0,26 %.

### Exponente crítico $\beta$ de la magnetización

Una vez conocida la temperatura crítica, tomando los resultados provistos del segundo método expuesto, se procede a estimar el exponente crítico  $\beta$  de la magnetización.

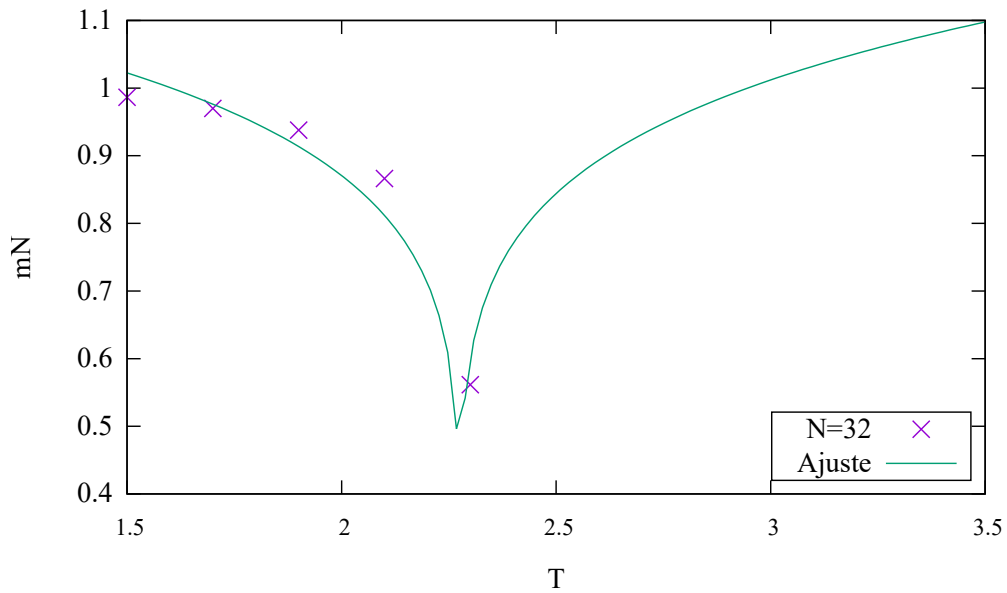
Para ello, se lleva a cabo un ajuste de los datos expuestos en la sección dedicada a la magnetización promedio de la forma:

$$m_N(T) = a \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^b$$

donde  $a$  es una constante y  $b = \beta$  exponente crítico.

Ilustramos mediante el caso  $N = 32$  el procedimiento seguido para los diferentes valores de  $N$ . Simplemente, realizamos el ajuste anteriormente descrito.

Figura 5: Ajuste de la magnetización promedio  $m_N$  frente a  $T$  para  $N = 32$ .



donde los parámetros a estimar vienen dados por:

```

final sum of squares of residuals : 0.000376847
rel. change during last iteration : -2.44123e-009

degrees of freedom      (FIT_NDF)                : 3
rms of residuals        (FIT_STDFIT) = sqrt(WSSR/ndf) : 0.0112078
variance of residuals (reduced chisquare) = WSSR/ndf  : 0.000125616

Final set of parameters      Asymptotic Standard Error
=====
a          = 1.12171          +/- 0.01119      (0.9974%)
b          = 0.108315         +/- 0.004111     (3.795%)

```

Por tanto, se obtiene un valor  $\beta = 0,108 \pm 0,004$  para  $N = 32$ . Repetimos el proceso para los diferentes  $N$  estudiados y obtenemos los siguientes resultados:

$N$	16	32	64	128
$\beta$	$0,073 \pm 0,04$	$0,108 \pm 0,004$	$0,122 \pm 0,022$	$0,126 \pm 0,007$

En consecuencia deducimos que el exponente crítico de la magnetización se va acercando al valor teórico  $\beta = 1/8 = 0,125$  conforme aumentamos  $N$ , es decir, al acercarnos al límite termodinámico como se predice teóricamente. Además, cabe señalar que se ha conseguido alcanzar un error relativo de tan sólo el 0,8 % respecto a lo tabulado para  $N = 128$ .

## 2.4. Función de Correlación

Finalmente, se analiza en profundidad las propiedades de la función de correlación  $f(i)$ .

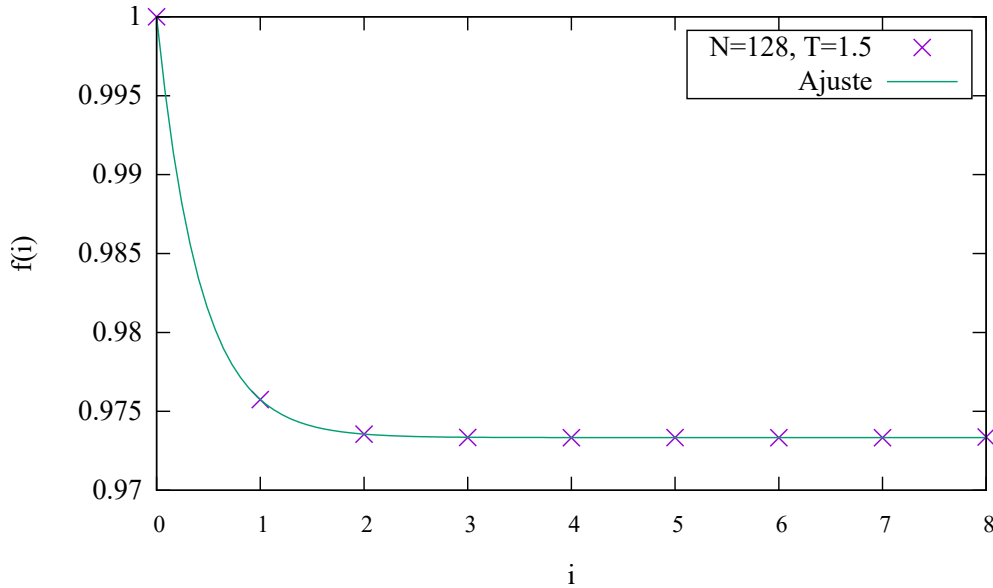
En primer lugar, para cada  $N$  y  $T$  fijas se calcula  $f(i)$  con  $i = 0, \dots, N/2$ . Puesto que de forma teórica se espera un decrecimiento exponencial según [6]:

$$f(i) \propto e^{-i/\xi}$$

se lleva a cabo un ajuste de la función de correlación con el fin de calcular la longitud de correlación  $\xi$ .

Adjuntamos uno de los casos como ejemplo ilustrativo del procedimiento seguido:

Figura 6: Función de correlación  $f(i)$  frente a  $i$  para  $N = 128$  y  $T = 1,5$ .



La función ajuste asociada es de la forma  $f(i) = be^{-i/a} + c$  donde las constantes  $a, b, c$  toman los siguientes valores:

```

final sum of squares of residuals : 1.81773e-009
rel. change during last iteration : -3.13171e-008

degrees of freedom    (FIT_NDF)                : 6
rms of residuals      (FIT_STDFIT) = sqrt(WSSR/ndf) : 1.74056e-005
variance of residuals (reduced chisquare) = WSSR/ndf : 3.02955e-010

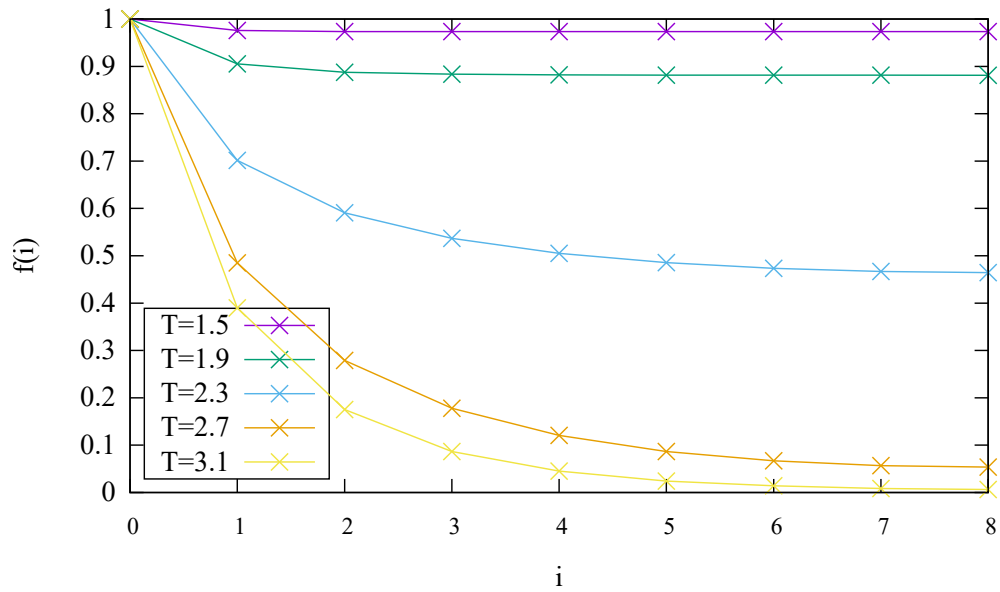
Final set of parameters      Asymptotic Standard Error
=====
a          = 0.415522        +/- 0.001343    (0.3231%)
b          = 0.0266601       +/- 1.866e-005    (0.06998%)
c          = 0.97334         +/- 6.773e-006    (0.0006959%)

```

Así, se dilucida que la longitud de correlación para  $N = 128$  y  $T = 1,5$  es  $\xi = a = 0,4155 \pm 0,0013$ .

Repitiendo este proceso para distintos valores de temperatura se tiene que la función de correlación es una función decreciente con  $T$  tal y como se puede apreciar en la Figura 7.

Figura 7: Función de correlación  $f(i)$  frente a  $i$  para  $N = 128$  y diversas temperaturas .



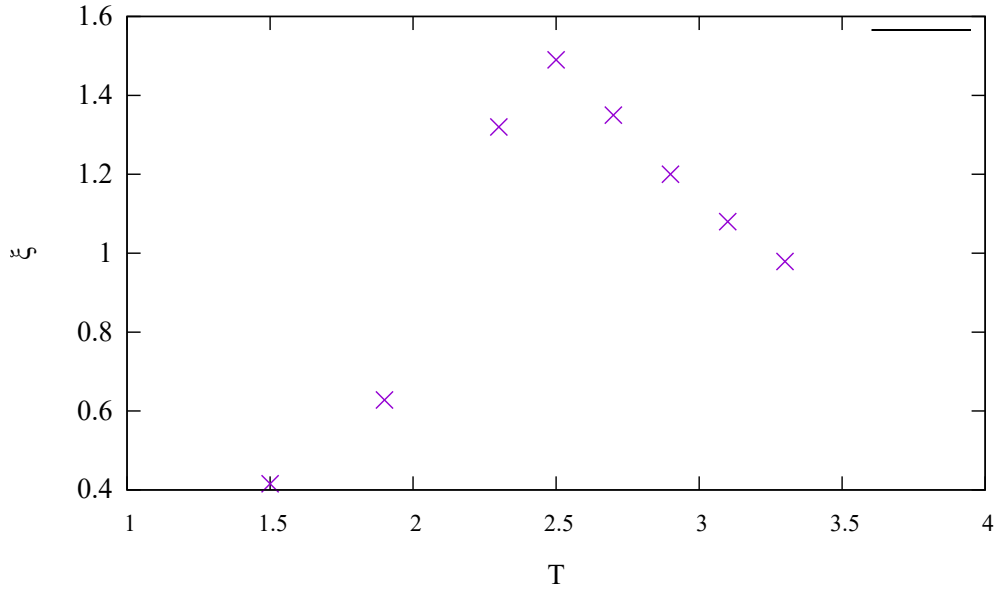
Además, llevando a cabo un ajuste similar al presentado anteriormente para  $T = 1,5$  se calcula la longitud de correlación para el resto de temperaturas:

Cuadro 1: Longitud de correlación para diversas temperaturas y  $N = 128$ .

$T/N$	128
1,5	$0,4155 \pm 0,0013$
1,9	$0,628 \pm 0,011$
2,3	$1,32 \pm 0,07$
2,5	$1,49 \pm 0,07$
2,7	$1,35 \pm 0,05$
2,9	$1,20 \pm 0,04$
3,1	$1,08 \pm 0,03$
3,3	$0,979 \pm 0,017$

Representamos la longitud de correlación frente a  $T$  para llevar a cabo un análisis cualitativo del comportamiento presentado.

Figura 8: Longitud de correlación  $\xi$  frente a  $T$  para  $N = 128$ .

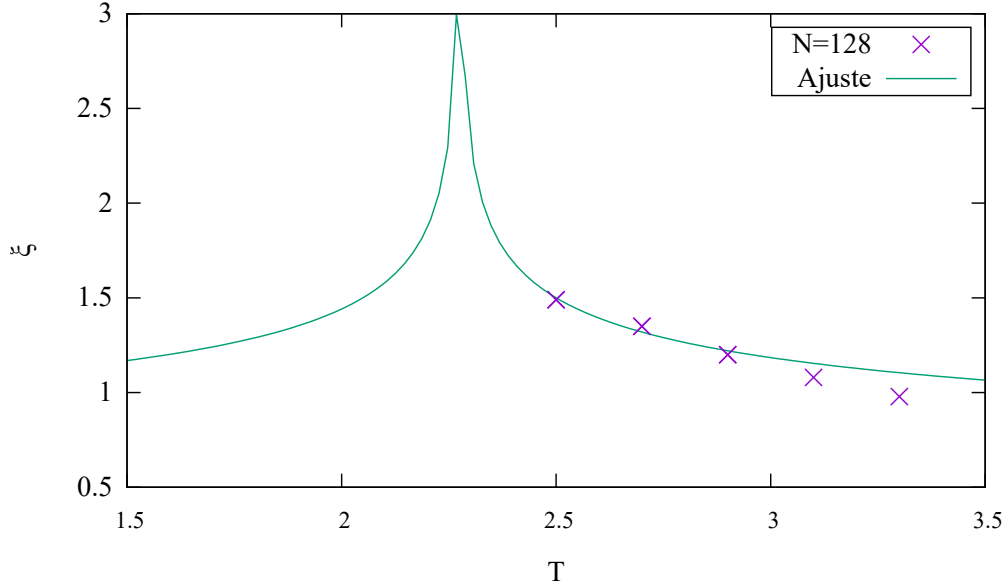


Observamos que al tratarse de un sistema finito, la longitud de correlación no diverge cuando  $T \rightarrow T_c$  como cabría esperar en el límite termodinámico. No obstante, si que se aprecia un máximo de la longitud de correlación alrededor de la temperatura crítica. Finalmente, llevamos a cabo el ajuste de los datos representados gracias a la curva

$$\xi(T) = a \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^b$$

con el fin de estimar el exponente crítico asociado  $\nu = -b$ .

Figura 9: Ajuste de la longitud de correlación  $\xi$  frente a  $T$  para  $N = 128$ .



Teniendo en cuenta que para  $N = 128$  se estimó  $T_c = 2,275$ , los parámetros asociados al ajuste vienen dados por:

```

final sum of squares of residuals : 0.00146275
rel. change during last iteration : -7.50235e-010

degrees of freedom    (FIT_NDF)                : 1
rms of residuals      (FIT_STDFIT) = sqrt(WSSR/ndf) : 0.0382459
variance of residuals (reduced chisquare) = WSSR/ndf : 0.00146275

Final set of parameters      Asymptotic Standard Error
=====
a          = 0.940374        +/- 0.06778      (7.208%)
b          = -0.201867       +/- 0.03827      (18.96%)

```

Así, el exponente crítico para la longitud de correlación resulta  $\nu = -b = 0,20 \pm 0,04$ . Comparando nuestro resultado con el valor teórico  $\nu = 0,25$  se tiene un error relativo del 20 %. Este valor tan considerable de error se achaca a la pequeña escala de trabajo así como a los escasos puntos que pudieron ser partícipes del ajuste.

Al repetir el procedimiento para distintos valores de  $N$  no se obtuvieron cambios significativos en la función de correlación  $f(i)$  para  $N = 16, 32, 64$ . Estos resultados se pueden consultar en:

<https://drive.google.com/drive/folders/1ED50b0JmVJIxD-zE6YB0i9FoyY5gh0hh?usp=sharing>. Esto justifica que se haya profundizado exclusivamente en el estudio del caso más cercano al límite termodinámico,  $N = 128$ .

### 3. Conclusiones

El método numérico propuesto se ajusta en gran medida al modelo propuesto para describir el comportamiento de materiales que sufren un cambio brusco en sus propiedades magnéticas al variar la temperatura. Esta conclusión se desliga del análisis de resultados previos donde se corroboraron los siguientes aspectos:

- La magnetización promedio, la energía media, el calor específico y la función de correlación presentan la dependencia pronosticada de forma teórica al variar la temperatura del sistema. En todas ellas, se observó un cambio de tendencia al aproximarnos a un cierto valor de temperatura,  $T_c$ , lo que denota una transición de fase del sistema. Además, se determinó el valor de este punto crítico con un error relativo muy pequeño frente al tabulado.
- Se pusieron de manifiesto los efectos de tamaño finito en las magnitudes de interés. En particular, se observó cómo las funciones tienden a la curva teórica estipulada al aumentar  $N$ , es decir, al acercarnos al límite termodinámico.
- Los exponentes críticos afirman que en la región crítica existen funciones termodinámicas que modelan su comportamiento gracias a una ley de potencias. En particular, se calcularon los asociados a la magnetización y longitud de coherencia obteniendo resultados aceptables tras compararlos con los tabulados.

No obstante, cabe mencionar la necesidad de llevar a cabo más simulaciones con distintos valores de  $T$  y  $N$  para afinar nuestro estudio y reducir los errores asociados. De este modo, los ajustes estarán constituidos por una nube de puntos mayor y por tanto, proporcionarán resultados más fiables y ajustados al modelo teórico.

### Referencias

- [1] [https://ergodic.ugr.es/cphys/index.php?id=lec\\_ising](https://ergodic.ugr.es/cphys/index.php?id=lec_ising)
- [2] <http://www.fisica.unlp.edu.ar/academica/Members/rossigno/TD%20-%20Juan%20Muglia.pdf>
- [3] [https://addi.ehu.es/bitstream/handle/10810/30543/TFG\\_Garcia\\_Berdote\\_Asier.pdf?sequence=1&isAllowed=y](https://addi.ehu.es/bitstream/handle/10810/30543/TFG_Garcia_Berdote_Asier.pdf?sequence=1&isAllowed=y)
- [4] <https://ipicyt.repositorioinstitucional.mx/jspui/bitstream/1010/873/3/TMIPICYTB6E72006.pdf>
- [5] <https://bibdigital.epn.edu.ec/bitstream/15000/2366/1/CD-3104.pdf>