

Modelo de Ising 2D - Estudio computacional

Lucas Longo* and Franco Tavella**

Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Pabellón I, Ciudad Universitaria, 1428 Buenos Aires, Argentina.

En el siguiente trabajo estudiamos mediante el algoritmo de Monte Carlo el modelo de Ising en una red cuadrada bidimensional. Analizamos una red sin interacciones entre vecinos y comparamos los resultados con las predicciones teóricas de la mecánica estadística. Luego estudiamos tres tipos de interacciones: ferromagnéticas, antiferromagnéticas y una combinación de ambas. Mediante estos tres tipos analizamos las transiciones de fase que sufre el sistema como también la población de distintos estados en el ensamble estadístico. En la combinación de ambas interacciones tratamos el fenómeno de frustración observando una degeneración en los valores de magnetización obtenidos. Por último, analizamos los efectos que conlleva el trabajo con sistemas finitos y la variación de parámetros sobre los resultados.

I. INTRODUCCIÓN

En 1924, Ernst Ising demostró, en su tesis de doctorado sobre materiales ferromagnéticos, que una cadena lineal de espines que interactúan con sus primeros vecinos no exhibe transición de fase, es decir, no presenta magnetización espontánea si no existe campo magnético aplicado. Esto produjo que se alejara de la investigación en este campo ya que lo consideró un fracaso de su modelo al suponer que lo mismo sucedería para mayores dimensiones y que por lo tanto no podría explicar la magnetización repentina de estos materiales para ciertas temperaturas. Años más tarde, en 1940, su modelo fue retomado por otros investigadores, entre ellos, Rudolf Peierls y Lars Onsager quienes mostraron que el modelo de Ising explica exitosamente la existencia de transiciones de fase cuando se lo utiliza en dos dimensiones o más. En 1949 Ising comprendió la importancia de sus trabajos iniciales y su modelo sigue siendo utilizado hasta hoy en día en distintos campos como redes neuronales, plegamiento de proteínas, membranas biológicas y comportamiento social.

II. EL MODELO

En este trabajo estudiamos el comportamiento estadístico de una red cuadrada de sitios los cuales pueden tomar dos estados 1 y -1 los cuales representan a espines *up* y *down* respectivamente. Trabajamos con arreglos finitos de tamaño n y buscamos medir propiedades termodinámicas del sistema como su energía, su magnetización, y funciones respuesta como el calor específico c_V y la susceptibilidad χ . En la Figura 1 se puede observar una representación esquemática del modelo de Ising bidimensional.

En el modelo de Ising los espines se encuentran estáticos ocupando un lugar determinado de la red. Su único

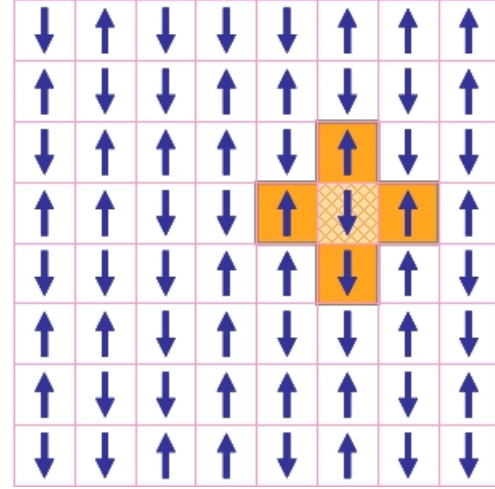


Figura 1. Modelo de Ising bidimensional. La interacción de un espín ocurre con sus primeros vecinos

grado de libertad está relacionado con dos posibles orientaciones que puede tomar *up* o *down*. Cada espín interactúa con sus vecinos inmediatos, y a cada interacción se le asigna un cierto valor de energía. El hamiltoniano del sistema viene dado por:

$$H = -J \sum_{ij} s_i s_j + B \sum_i s_i \quad (1)$$

Esta ecuación posee dos sumandos. El primer término corresponde a la energía que aporta cada par de espines al interactuar, J es la constante de acoplamiento y en esta expresión es la misma para todas las interacciones (hipótesis de isotropía). El segundo término representa la interacción de los espines por encontrarse en presencia de un campo magnético externo B . El valor de J es importante porque permite distinguir tres tipos de interacciones:

* lucaslongo52@gmail.com

** tavellafran@gmail.com

$$J \begin{cases} = 0 & \text{Sin interacciones} \\ > 0 & \text{Ferromagnéticas} \\ < 0 & \text{Anti-ferromagnéticas} \end{cases} \quad (2)$$

Resulta de interés las propiedades del sistema sin acoplamiento $J = 0$ y frente a un campo externo B que serán estudiadas y relacionadas con aquellas predichas por la mecánica estadística. La función de partición canónica Q para el modelo de Ising bidimensional y sin interacción es:

$$Q = 2^N \cosh^N(\beta B) \quad (3)$$

Aquí N es el número de espines de la red y $\beta = \frac{1}{kT}$ y para propósitos computacionales se toma la constante de Boltzmann $k = 1$

A partir de la función de partición pueden encontrarse la energía U , la magnetización M y las funciones respuesta calor específico c_V y susceptibilidad χ :

$$U = -NB \tanh(\beta B) \quad (4)$$

$$M = N \tanh(\beta B) \quad (5)$$

$$c_V = \frac{B^2}{T^2} [1 - \tanh^2(\beta B)] \quad (6)$$

$$\chi = \frac{N}{kT} [1 - \tanh^2(\beta B)] \quad (7)$$

Se ha utilizado la función de autocorrelación la cual permite estudiar como estan correlacionados los datos de una serie temporal discreta X_t . Para que esta función de correlación tenga sentido es necesario que la serie de datos X_t sea estacionaria. La función de autocorrelación se define en estadística como:

$$C(k) = \frac{E[(X_i - \mu)(X_{i-k} - \mu)]}{\sigma^2} \quad (8)$$

Aquí k es el desplazamiento temporal considerado, E simboliza el valor esperado, μ es el promedio de los datos y σ^2 su varianza.

III. SIMULACIONES NUMÉRICAS

Se estudiaron redes cuadradas de tamaño $n = 16, 32, 64, 128, 256, 512$ y constantes de acoplamiento en el rango $J \in [0, 1]$. Las simulaciones

fueron llevadas a cabo en computadoras de escritorio y los datos procesados con herramientas de *Python*. El código fuente utilizado puede encontrarse en <https://github.com/Tatotavella/ising> y <https://github.com/ldlongo/ising-1>.

A. Algoritmo de Metropolis Monte Carlo

Este algoritmo consiste en elegir un espín de forma aleatoria de la red y proponer un cambio de su orientación. A continuación se computa el cociente entre probabilidades $\pi = e^{-\beta \Delta E}$. Si $\Delta E < 0$ se acepta el cambio mientras que si $\Delta E > 0$ entonces se genera un numero aleatorio p entre 0 y 1 aceptandose el cambio si $p < \pi$. Esto es fundamental puesto que permite que el sistema acceda a estados de menor probabilidad.

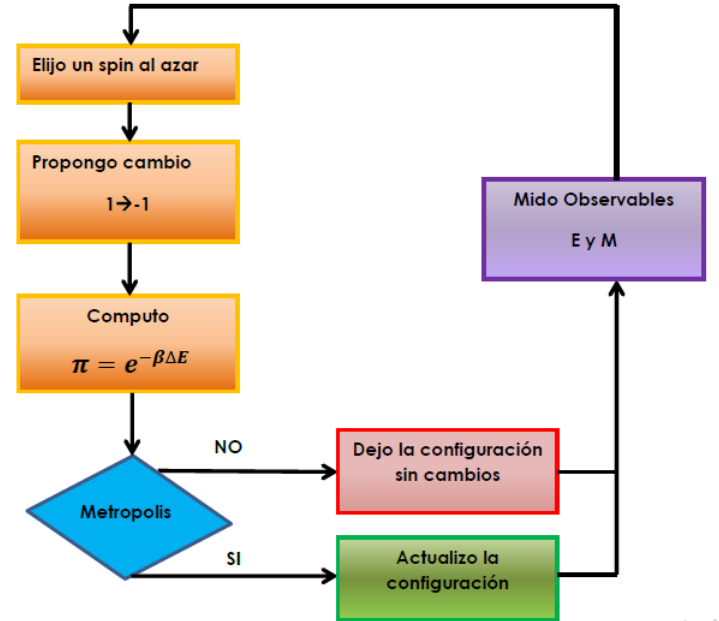


Figura 2. Algoritmo de Metropolis Monte Carlo utilizado en las simulaciones.

De esta manera es posible obtener estados correspondientes al ensamble canónico del sistema.

IV. RESULTADOS

A. Modelo de Ising sin acoplamiento $J = 0$ y con campo externo $B = 1$

El primer método consistió en simular una red de tamaño $n = 32$ en un campo externo $B = 1,0$ y sin interacción entre los espines $J = 0,0$. Las magnitudes termodinámicas se midieron en un rango de temperaturas $T \in [0; 5]$

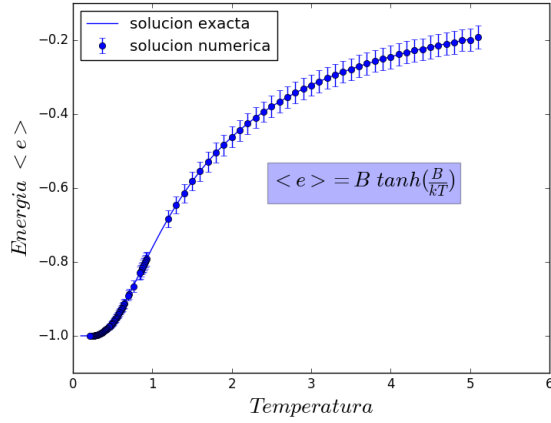


Figura 3. Energía por sitio. Computacional y teórica para el modelo de Ising sin interacción

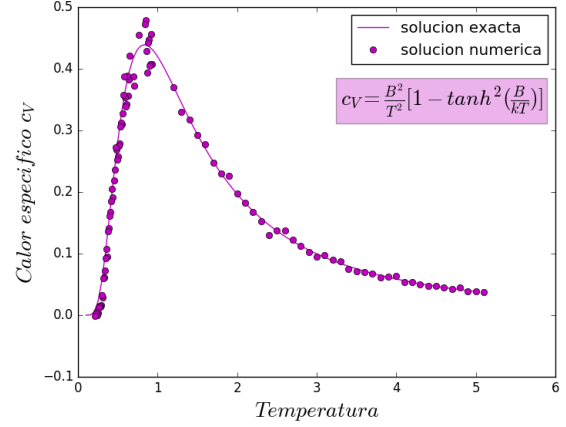


Figura 5. Calor específico obtenido mediante simulación y del modelo teórico para Ising sin interacción

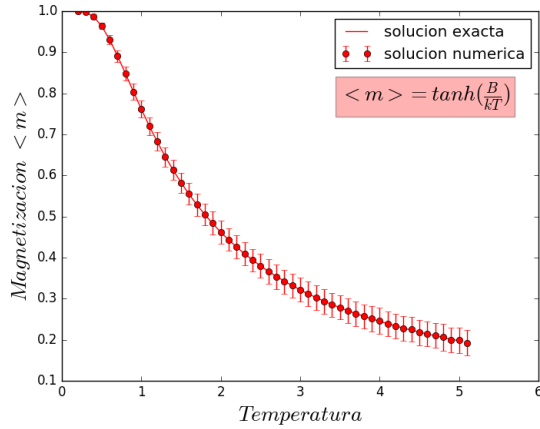


Figura 4. Magnetización por sitio. Computacional y teórica para Ising sin interacción

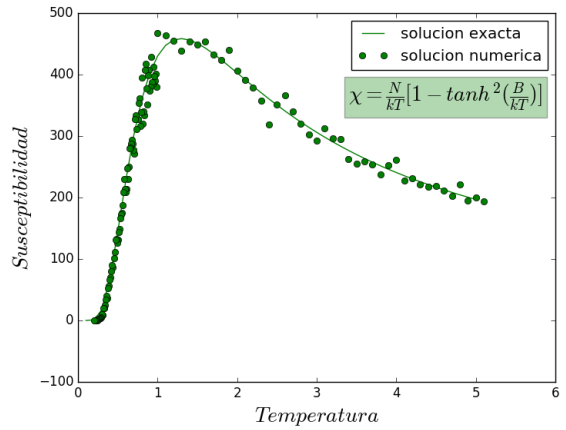


Figura 6. Susceptibilidad obtenida por simulación y del modelo teórico para Ising sin interacción

Podemos observar una buena convergencia del método y un buen acuerdo con la predicción teórica para el modelo sin interacción y campo externo no nulo. El comportamiento es el esperado para una red desacoplada. Para altas temperaturas las fluctuaciones térmicas compiten contra el campo externo y generan una magnetización que se aproxima a 0. Para temperaturas bajas el material tiende a seguir el comportamiento del campo externo.

B. Ferromagnético con campo externo nulo $B = 0$

1. Función Correlación

En el procedimiento del algoritmo obtenemos estados consecutivos correspondientes a cambios simples de espines en la red. Es de esperar que dos estados cercanos secuencialmente se encuentren altamente correlacionados. Para eso realizamos un estudio de la función

de autocorrelación de los estados obtenidos para cada paso del algoritmo. Los resultados se pueden ver en las Figuras 7 y 8 en los cuales ejemplificamos el proceso con una red de tamaño 32 y parámetros $J = 1,0$ y $B = 0,0$.

El estudio de esta magnitud nos permite definir el intervalo de adquisición de datos que consideraremos independientes y que formarán parte del ensamble estadístico que utilizaremos para los análisis termodinámicos. Podemos observar de los resultados que para temperaturas lejanas a la de transición ($T_{trans} \sim 2,6$ en la red estudiada), tanto mayores como menores, generan un decaimiento más rápido de la correlación respecto a aquellas temperaturas cercanas a la de transición. Como fue dicho antes este criterio se utilizó durante todo el trabajo para definir la independencia de los estados considerados como parte del ensamble estadístico a estudiar.

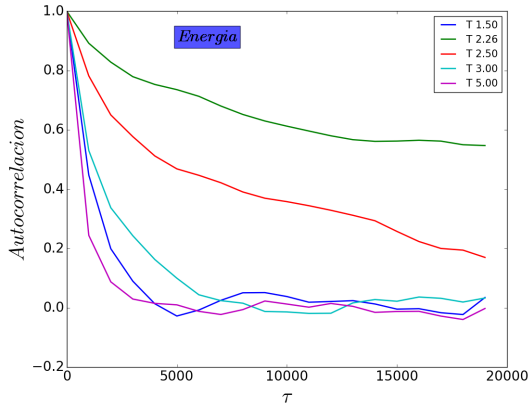


Figura 7. Función de autocorrelación de los estados de energía correspondientes a una red de tamaño 32 y parámetros $J = 1,0$ y $B = 0,0$ en función de intervalos entre pasos τ . Para temperaturas altas y bajas la correlación decae rápidamente con un orden cercano al del valor $n^2 \sim 32 * 32$

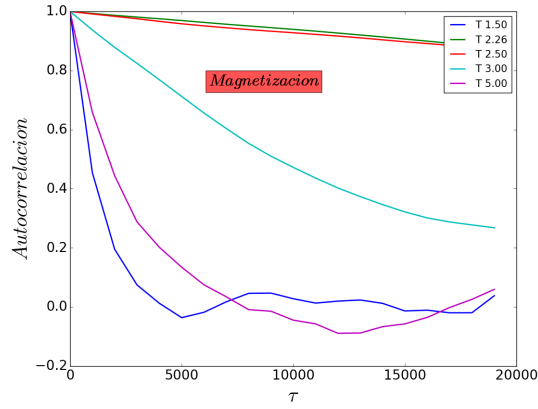


Figura 8. Función de autocorrelación de los estados de magnetización correspondientes a una red de tamaño 32 y parámetros $J = 1,0$ y $B = 0,0$ en función de intervalos entre pasos τ . Para temperaturas cercanas a la de transición $T \sim 2,6$ la correlación decae más lentamente.

2. Acoplamiento

Estudiamos para el caso ferromagnético la respuesta del sistema frente a distintos valores de la variable de acoplamiento J . En la Figura 9 observamos que el comportamiento cualitativo resulta idéntico para los distintos valores de J y únicamente se modifica la posición de la transición que depende de ésta. Para la obtención de estos valores fueron realizadas rampas de temperatura comenzando por los valores más altos. Debido a esto y a la simetría de los estados para temperaturas bajas con $\langle m \rangle = 1$ o $\langle m \rangle = -1$, se produce una convergencia hacia uno u otro estado simétrico que no depende del valor de J utilizado.

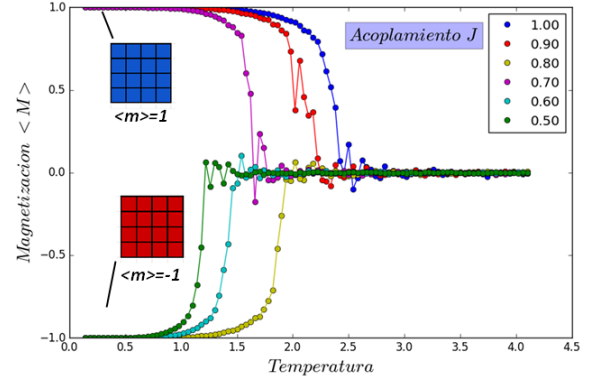


Figura 9. Magnetización en el caso ferromagnético para diferentes valores de interacciones J entre espines

3. Comportamiento bimodal cerca de T_c

Podemos observar, por ejemplo en la Figura 9, que los resultados cerca de la transición del sistema (cuando la magnetización se aproxima a 0) resultan poco precisos. Para explorar las causas de esto realizamos mediciones para una red de tamaño 32, constante de acoplamiento $J = 1,0$ y campo externo nulo $B = 0,0$. Analizamos temperaturas cercanas a la transición entre $T_i = 2,30$ y $T_f = 2,40$. El total de iteraciones fue de 10^9 pasos tomando estados del ensamble cada 10^5 pasos. De esta manera obtuvimos estados descorrelacionados y representativos.

Como se puede apreciar en la Figura 10, cerca de la transición la distribución de estados cambia de un comportamiento unimodal (con una media y varianza bien definidas) a otro bimodal para el cual las medidas estadísticas de media y varianza deben ser calculadas con otras suposiciones. Esto explica el comportamiento

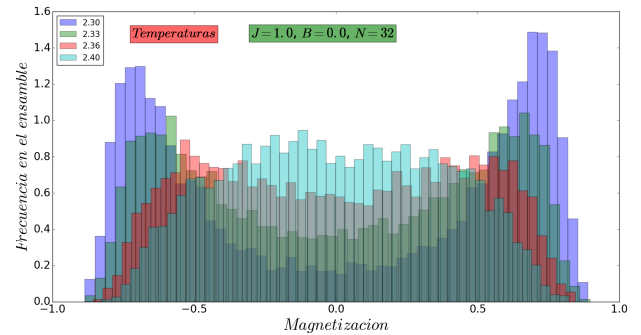


Figura 10. Estados de magnetización que visita el sistema para temperaturas cercanas a la transición. Red de tamaño 32, $J = 1,0$ y $B = 0,0$. Observamos un cambio de una tendencia unimodal a otra bimodal y simétrica.

ruidoso de las mediciones anteriores ya que cada punto representa la magnetización media y para estados

bimodales no es una buena medida para reportar lo que ocurre en el sistema.

Para refinar el análisis realizamos ajustes a los histo-

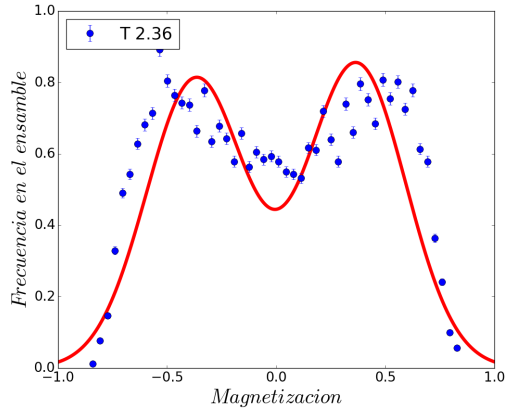


Figura 11. Ajuste a los datos de dos Gaussianas con medias opuestas. Este método caracteriza de manera más adecuada a los estados más visitados de magnetización del sistema.

gramas suponiendo una superposición de distribuciones Gaussianas con iguales varianzas pero medias opuestas en signo. A modo de ejemplo podemos observar un ajuste en la Figura 11.

Con estos ajustes es posible recalcular las magnetizaciones medias y susceptibilidad cerca de la transición. Esto refina el resultado obtenido como se puede observar en las Figuras 12 y 13.

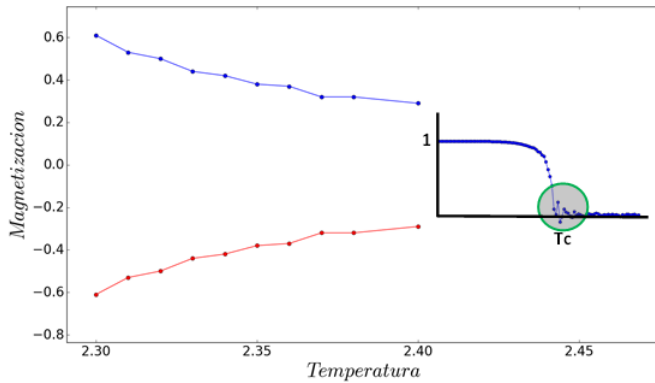


Figura 12. Valores de magnetización media obtenidos de los ajustes por superposición de Gaussianas.

Cabe destacar que el mismo análisis se puede realizar para la energía pero carece de sentido pues el comportamiento resulta ser unimodal en todo el rango de temperaturas como se puede observar en la siguiente sección.

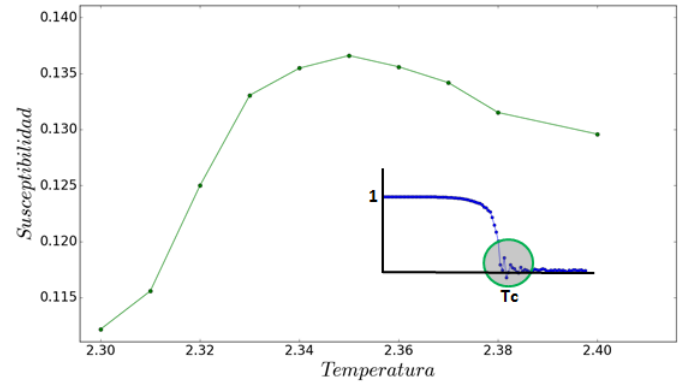


Figura 13. Susceptibilidad calculada a partir de las varianzas obtenidas de los ajustes con una superposición de Gaussianas.

4. Efecto de tamaño finito

Exploramos los efectos del tamaño de la red para parámetros J y B fijos. Redes de tamaño 10, 16, 64, 128 y 256 fueron analizadas para comparar lo obtenido. En la Figura 14 podemos observar que al disminuir el tamaño de la red la transición se vuelve más ruidosa para la magnetización pero no tan evidentemente para la energía que presenta un comportamiento continuo”.

Al observar la Figura 15 vemos que las funciones respues-

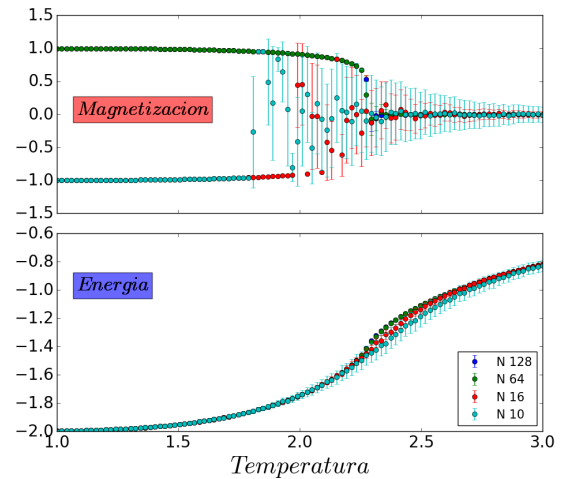


Figura 14. Efectos de tamaño finito con redes entre 10 y 128. Observamos una mayor dispersión de los valores para redes pequeñas.

ta se vuelven menos pronunciadas al disminuir el tamaño y que la transición en temperatura ocurre para valores más pequeños. Esto nos muestra los efectos del análisis sobre un sistema finito que se disminuyen utilizando redes de tamaño cada vez mayor.

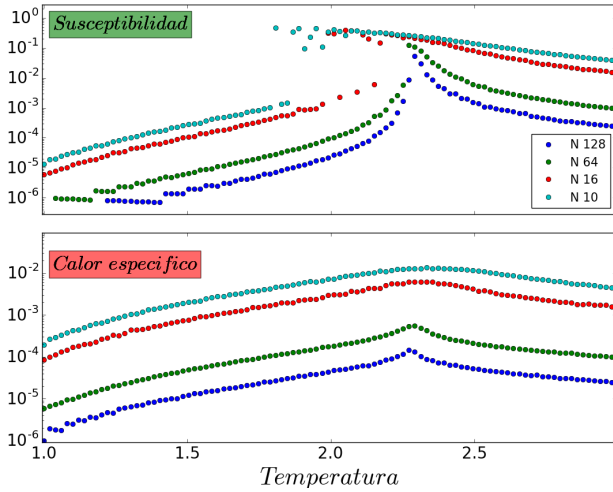


Figura 15. Efectos del tamaño de la red sobre las funciones respuesta. Vemos que las transiciones se corren a valores más bajos de temperatura cuando el tamaño decrece. Además los picos se acentúan cuanto mayor es el tamaño de la red

C. Antiferromagnético con campo externo finito $B = 1$

Se simularon tamaños de red de 512, 256, 128, 64, 32 y 16 para interacciones de tipo antiferromagnética con campo externo finito $B = 1$. En la Figura 16 podemos observar que la magnetización presenta un valor límite. Para temperaturas mayores decae lentamente mientras que para las menores decrece hasta el valor nulo. En estas temperaturas los espines de la red se orientan de forma alternada y se logra minimizar la energía del sistema.

En la Figura 17 podemos observar las susceptibilidades para distintos tamaños de red. Vemos que al igual que en el caso ferromagnético al disminuir el tamaño de la red la susceptibilidad aumenta (Figura 15). Esto indica que las fluctuaciones para redes pequeñas son de mayor magnitud. Podemos observar un cambio abrupto de pendiente que indica un cambio de comportamiento del sistema. Esta temperatura característica es conocida como temperatura de Neel.

D. Ferromagnético a primeros vecinos y antiferromagnético a segundos vecinos. Frustración.

Se realizaron simulaciones para una red pequeña de tamaño $n = 4$ y una de tamaño $n = 32$, en las cuales se simularon interacciones ferromagnéticas $J = 1$ a primeros vecinos e interacciones antiferromagnéticas $J = -1$ con segundos vecinos de las diagonales. La temperatura se varió entre 5 y 0.

Las Figuras 18 y 19 muestran que para temperaturas bajas la magnetización promedio se mantiene nula. Para

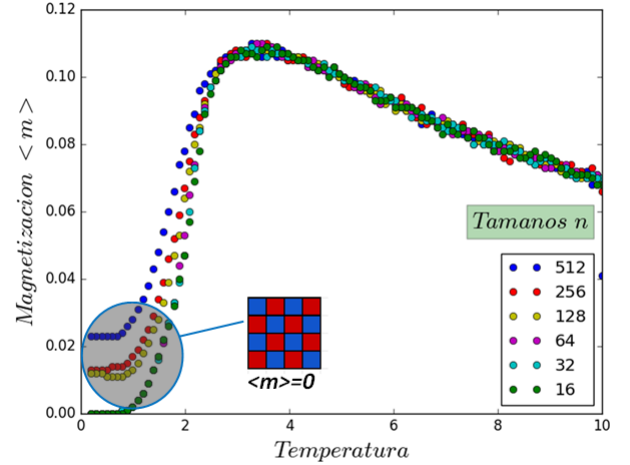


Figura 16. Magnetización en el caso antiferromagnético para distintos tamaños de red. Se observa que la magnetización se acerca a cero a bajas temperaturas.

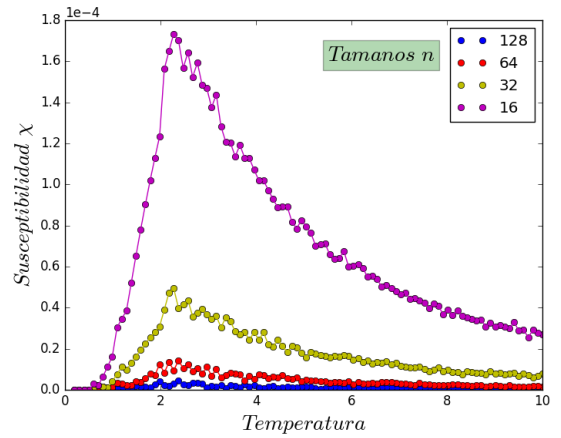


Figura 17. Susceptibilidad en antiferromagnético para distintos tamaños de red.

valores mayores de temperatura se observan múltiples estados de magnetización convergentes como se puede ver por la superposición de distintas realizaciones independientes. Para estas 5 realizaciones no fue posible observar una única magnetización bien definida sugiriendo una posible degeneración del ensamble en valores de magnetización. A este fenómeno se lo conoce como frustración y puede ser corroborado obteniendo los estados del ensamble que visita el sistema y realizar un análisis similar al del comportamiento bimodal del sistema ferromagnético (Figura 10).

A bajas temperaturas el efecto tiende a desaparecer y observamos que las curvas tienden a un valor de magnetización nulo y los espines se orientan en forma de filas y columnas.

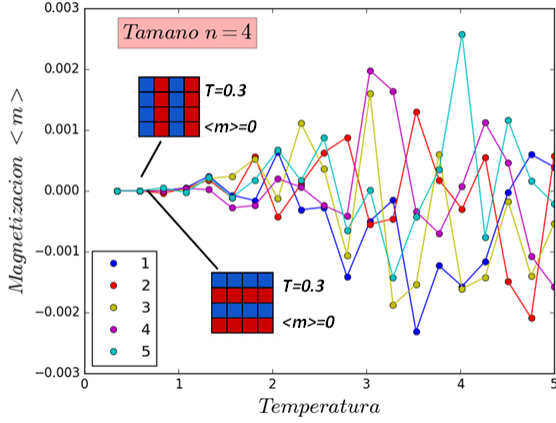


Figura 18. Magnetización para distintas iteraciones en redes de tamaño $n = 4$. Se observa magnetización nula a baja temperatura y frustración con degeneración a alta temperatura.

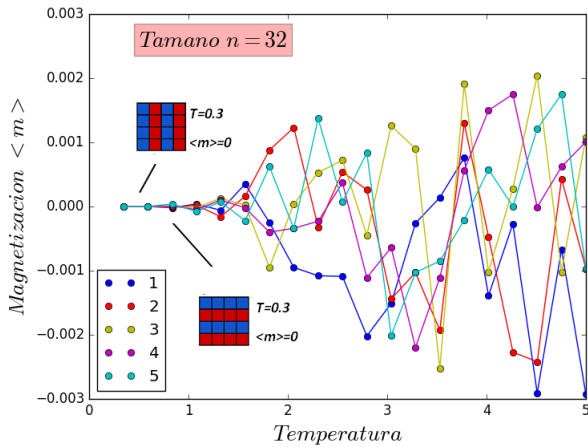


Figura 19. Cada color representa la magnetización para distintas iteraciones en redes de tamaño $n = 32$. Se observa magnetización nula a baja temperatura y frustración con degeneración a alta temperatura.

En las Figuras 20 y 21 se puede observar que la energía está bien definida para todas las temperaturas en las diferentes iteraciones. Estos gráficos podrían apoyar la presencia del fenómeno de frustración donde se produce una degeneración en el sistema de estudio. Así en nuestro caso esta degeneración puede verse como la aparición de varios valores (más de dos) de magnetización para un mismo valor de energía, y esto podría explicar las oscilaciones que observamos en la magnetización.

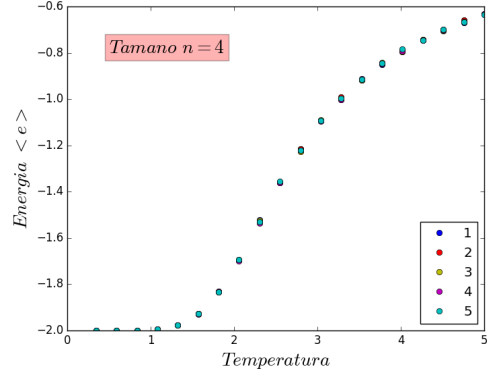


Figura 20. Energía para distintas iteraciones en redes de tamaño $n = 4$. Se observa que distintas iteraciones de la red atraviesan por iguales valores de energía pese a la degeneración a baja temperatura.

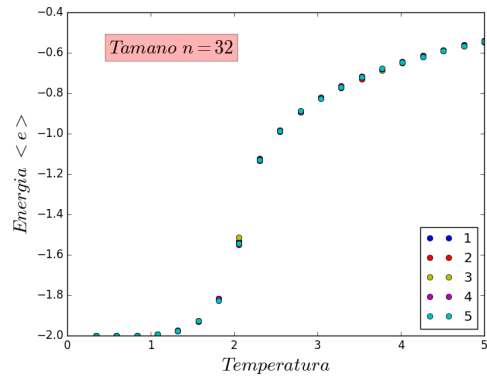


Figura 21. Energía para distintas iteraciones en redes de tamaño $n = 32$. Se observa que distintas iteraciones de la red atraviesan por iguales valores de energía pese a la degeneración a altas temperaturas.

V. CONCLUSIONES

En este trabajo vimos que el modelo de Ising resulta adecuado para entender la magnetización de materiales ferromagnéticos y anti-ferromagnéticos. Las simulaciones mostraron acuerdo con las predicciones del modelo teórico para el caso de interacción nula. En materiales ferromagnéticos se observó una transición de fase a temperatura crítica resultando en un material magnetizado a baja temperatura, mientras que en materiales anti-ferromagnéticos la magnetización tiende a cero para bajas temperaturas. Vimos que es necesario realizar un estudio más detallado alrededor de la temperatura crítica, el cual se realizó a través de histogramas de la magnetización y se observó la presencia de una distribución bimodal. Esto permitió una mejor determinación de la magnetización en la zona de transición que permitió evitar las oscilaciones que aparecían al inicio de las simulaciones. Se simularon redes pequeñas y media-

nas con ambos tipos de interacciones ferromagnéticas y anti-ferromagnéticas y en ambas se observó el proceso de frustración el cual se manifestó como una oscilación en la magnetización a medida que nos desplazamos hacia temperaturas más bajas a la vez que la función energía se

observó bien definida en cada temperatura. Esto muestra que en estos sistemas existe una degeneración mayor que la que existe en materiales con un solo tipo de interacción.
