#### FS0432 Física Computacional

### Proyecto de curso

## Modelo de Ising cuántico unidimensional en una grilla de N espines: Dinámica de muchos cuerpos

Por

Andrés Díaz Pereira, Felipe Mata Mata, Julyana Mora García, Patricio Becerra Barrios y Sebastián Salazar Chaves

12 de julio de 2024





### Contenido

- 1 Introducción
- 2 Estructura del programa
- 3 Resultados
- Paralelización

- 5 Programación orientada a objetos
- 6 Repositorio
- 7 Documentación
- 8 Conclusión

## Modelo de Ising cuántico de un estado puro aislado

#### SIN Condiciones Periódicas

#### CON Condiciones Periódicas





Ecuación de Schrödinger

$$\frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = -\mathrm{i}\hat{H} |\psi(t)\rangle$$

(1)

## Modelo de Ising cuántico de un estado puro aislado

#### SIN Condiciones Periódicas

#### CON Condiciones Periódicas





Ecuación de Schrödinger

$$\frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = -\mathrm{i}\hat{H}|\psi(t)\rangle \tag{1}$$

## Funciones implementadas

Hamiltoniano

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N-1} J \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z + \sum_{i=1}^{N} g \hat{\sigma}_i^x$$
 (2)

## Funciones implementadas

RK4

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$
(3)

Exponencia

$$\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}(t-t_0)} |\psi(t=t_0)\rangle \tag{4}$$

## Funciones implementadas

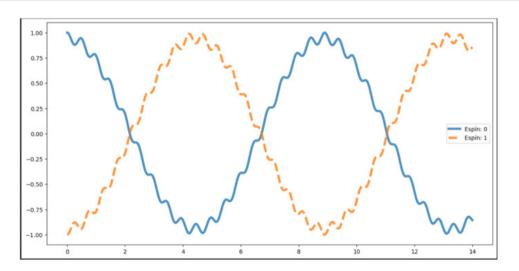
RK4

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$
(3)

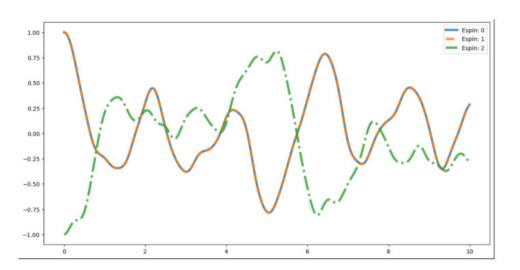
Exponencial

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}(t-t_0)} |\psi(t=t_0)\rangle \tag{4}$$

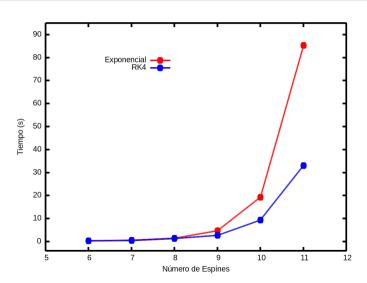
# Dos espines



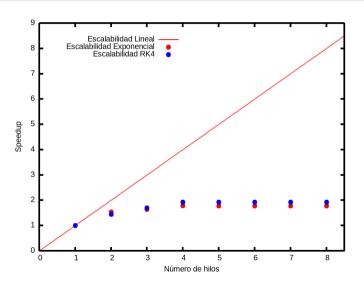
# Múltiples espines



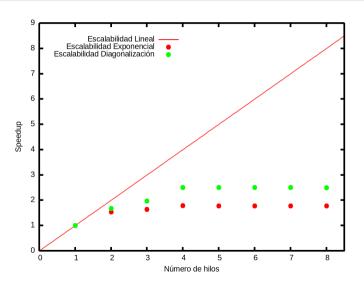
# Tiempo de ejecución



# Runge-Kutta 4 vs Exponencial



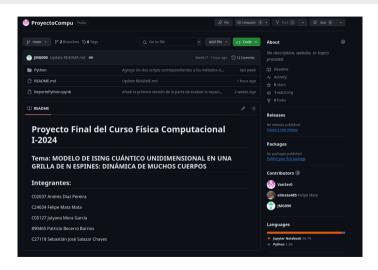
# Exponencial - Diagonalización



### OOP

- OOP
  - main.py
  - Clases
    - o \_\_\_init\_\_\_.py
    - hamiltoniano.py
    - o metodos.py

## Repositorio en Github



https://github.com/VanSerO/ProyectoCompu

10

### Documentación de Funciones



#### Proyecto Modelo de Ising

Proyecto Modelo de Ising

General Desarrollo

Resultados

Referencias

Modelo de Ising cuántico unidimensional en una grilla de N espines: Dinámica de muchos cuerpos

Coordinador: Marlon Brenes Navarro

#### Estudiantes:

- · C02637 Andrés Díaz Pereira
- C24634 Felipe Mata
- C05127 Julyana Mora García
- 890465 Patricio Becerra Barrios
- · C27118 Sebastián José Salazar Chaves

#### Modelo de Isina

El modelo de Ising para el estudio de la transición ferromagnética es de gran interés debido a su sencillez y que se puede resolver analíticamente. Su hamiltoniano está dado por:

Table of contents

Modelo de Ising

Project Overview

project

Milestones

https://jmg090.github.io/Proyecto/

### Conclusiones

- La implementación del método de *RK4* presentó una mejor escalabilidad y un mejor rendimiento con respecto a la solución numérica *Exponencial* para resolver la ecuación de Schrödinger.
- Con el módulo de numpy fue posible paralelizar las operaciones matriciales con Open MPI y MKL de Intel.
- Con un código compilado se puede obtener una mayor eficiencia y escalabilidad.
- Se podría acelerar el método optimizando el vector en función del tiempo y el cálculo de los valores de expectación.

Gracias por su atención