

PEC de Física Computacional I

Curso 2023/24

Instrucciones

Esta PEC consta de 3 ejercicios. En cada ejercicio se deberá elaborar un código en C y un script de MATLAB. También deberá elaborarse un único informe en formato PDF en el que se muestren, analicen y discutan los resultados pedidos. Este informe de resultados, junto a los 3 códigos en C y los 3 scripts de MATLAB, deberán ser subidos al curso virtual como un *único archivo comprimido* dentro del plazo establecido. Es muy importante cuidar mucho la notación matemática (se recomienda seguir la notación utilizada en este texto). También es muy importante cuidar el estilo de escritura y respetar las reglas gramaticales y ortográficas. Descuidar estos aspectos esenciales de presentación repercutirá negativamente en la calificación, pudiendo llegar a suspender ésta si el estilo es totalmente inapropiado para una PEC de física.

1. Introducción teórica

1.1. Modelo de Ising

Los materiales ferromagnéticos, como el hierro o el níquel, están constituidos por átomos cuyos electrones libres tienen un momento magnético permanente, incluso en ausencia de campo magnético externo. El modelo más paradigmático para estudiar estos medios es el modelo de Ising, el cual, además, también es un modelo paradigmático en el estudio y comprensión de las transiciones de fase, conociéndose su solución exacta en una y dos dimensiones.

El modelo de Ising parte de una red regular que imita una red cristalina. En cada posición i de la red se coloca un momento magnético o espín s_i que puede tomar los valores $\{+1, -1\}$, *espín arriba o espín abajo*. Se trata de un modelo de partículas interactuantes en el que cada espín interacciona con sus primeros vecinos, es decir, se consideran interacciones de corto alcance. De esta forma, la contribución del espín s_i a la energía total del sistema tiene la forma general

$$H_i = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j, \quad (1)$$

donde la suma recorre todas las parejas $\langle ij \rangle$ que el espín s_i forma con sus vecinos s_j . El parámetro $J > 0$ representa la constante de interacción. Llamaremos N_e al número total de espines que hay en nuestra red.

En una red unidimensional (1D), representada mediante un vector de longitud L ($N_e = L$), la contribución H_i tomaría la siguiente expresión

$$H_i = -J s_i (s_{i-1} + s_{i+1}), \quad (2)$$

En dos dimensiones (2D), cada posición de la red, representada mediante una matriz $L \times L$ ($N_e = L^2$) está indicada mediante dos índices, de modo que el espín en la posición (i, j) , con $i, j = 1, \dots, L$, tendrá la forma $s_{i,j}$. La contribución de $s_{i,j}$ a la energía total del sistema se escribe como

$$H_{i,j} = -J s_{i,j} (s_{i-1,j} + s_{i+1,j} + s_{i,j-1} + s_{i,j+1}). \quad (3)$$

En el caso de 1D el espín interactúa con sus vecinos *izquierda* y *derecha*, mientras que en 2D debemos de añadir al conjunto anterior los vecinos *arriba* y *abajo*.

Con lo anterior en mente podemos escribir la energía total del sistema H sumando la contribución de todos los espines. La forma general será

$$H = \frac{1}{2} \sum_i^{N_e} H_i \quad (4)$$

y particularizada a los casos 1D y 2D:

$$\begin{aligned} (1D): \quad H &= \frac{1}{2} \sum_i^L H_i \\ (2D): \quad H &= \frac{1}{2} \sum_i^L \sum_j^L H_{i,j} \end{aligned} \quad (5)$$

donde hemos introducido el factor $1/2$ porque hemos considerado dos veces cada pareja, es decir, hemos sumado dos veces la misma interacción.

Como se ha mencionado anteriormente, este sistema contribuyó de manera muy significativa a entender el fenómeno de las transiciones de fase. Para entender la razón de esto, supongamos que el sistema se encuentra en equilibrio térmico a temperatura T . Si sólo tuviéramos en cuenta la energía, el sistema evolucionaría de forma espontánea tratando de minimizarla, lo que conduciría irremediamente a una fase perfectamente ordenada con todos los espines alineados en la misma dirección (o bien hacia arriba o bien hacia abajo). Esto se deduce de la expresión general (1), ya que la configuración que minimiza H_i es aquella en la que el espín s_i está alineado con sus primeros vecinos.

Sin embargo, existe el efecto de la temperatura, que se manifiesta en forma de agitación térmica y que provoca que los espines puedan cambiar su orientación al azar. Este efecto es más significativo cuanto más alta es la temperatura, por ello, altas temperaturas dan lugar a fases desordenadas. Existen, por tanto, dos efectos que compiten. Por un lado la tendencia natural del sistema a minimizar su energía haciendo que los espines vecinos se alineen, y por otro el desorden (*entropía*) provocado por la temperatura. Dependiendo de cuánto sea el efecto de la temperatura, veremos fases ordenadas o desordenadas.

Para cuantificar el grado de *orden* del sistema usaremos la *magnetización media* (o *magnetización por espín*) m , cuya forma general es

$$m = \frac{1}{N_e} \sum_i^{N_e} s_i \quad (6)$$

y particularizada a los casos 1D y 2D:

$$\begin{aligned} (1D) : \quad m &= \frac{1}{L} \sum_i^L s_i \\ (2D) : \quad m &= \frac{1}{L^2} \sum_i^L \sum_j^L s_{i,j} \end{aligned} \quad (7)$$

La variable m representa el *parámetro de orden* de nuestro sistema: si todos los espines tienen la misma orientación, ya sea todos arriba o todos abajo, obtenemos $|m| = 1$. Por otro lado, en una situación totalmente desordenada el valor de $|m|$ fluctuará en un entorno de 0.

El modelo de Ising no muestra ninguna transición de fase en 1D, pero en 2D se observa una transición de fase en una temperatura concreta, denominada *temperatura crítica*, que toma el valor $T_c = 2.27 J/k_B$, donde k_B es la constante de Boltzmann, pasando de una fase perfectamente ordenada cuando $T \ll T_c$ a una fase perfectamente desordenada cuando $T \gg T_c$.

El propósito de esta PEC es simular computacionalmente el modelo de Ising para estudiar el efecto de la temperatura. Para ello utilizaremos el algoritmo *Metropolis* que describimos a continuación.

1.2. Algoritmo *Metropolis*

Dado nuestro sistema de N_e espines, el algoritmo *Metropolis* establece que el cambio en el espín s_i (un “volteo”) sucede con probabilidad

$$P(s_i \rightarrow -s_i) = \exp\left(-\frac{\Delta H}{k_B T}\right), \quad (8)$$

donde ΔH es el incremento en la energía total del sistema que se produce en la transición, es decir, la diferencia entre la energía total del sistema con el espín volteado y la energía total inicial. El cálculo de dicho incremento es sencillo, ya que el cambio de espín sólo afecta localmente a la energía del sistema. Supongamos que volteamos el espín s_i , de modo que su nuevo valor es $s'_i = -s_i$. El incremento en la energía debido a dicho cambio será, teniendo en cuenta la expresión general (1):

$$\begin{aligned} \Delta H = H'_i - H_i &= \left(-J s'_i \sum_{\langle ij \rangle} s_j\right) - \left(-J s_i \sum_{\langle ij \rangle} s_j\right) \\ &= \left(+J s_i \sum_{\langle ij \rangle} s_j\right) + \left(J s_i \sum_{\langle ij \rangle} s_j\right) \\ &= 2J s_i \sum_{\langle ij \rangle} s_j. \end{aligned} \quad (9)$$

Teniendo lo anterior en cuenta, el algoritmo *Metropolis* se describe del siguiente modo. En cada paso n de la simulación, con $n = 1, 2, 3, \dots, N_p$, siendo N_p el número total de pasos de la simulación, seguimos el siguiente esquema:

1. Se escoge al azar un espín s_i de nuestro sistema, que será nuestro candidato a ser volteado.
2. Se calcula ΔH mediante la expresión (9). Con esto tenemos el incremento en la energía que supondría el volteo del espín s_i .
3. En caso de que $\Delta H < 0$, se acepta inmediatamente el cambio $s_i \rightarrow -s_i$ y acaba el paso de simulación.
4. En otro caso generamos un número aleatorio r distribuido de manera uniforme en el intervalo $[0, 1)$.

5. Si $r < \exp(-\Delta H/(k_B T))$ se acepta el cambio $s_i \rightarrow -s_i$ y y acaba el paso de simulación.
6. En cualquier otro caso el espín no cambia y acaba el paso de simulación.

Sobre este algoritmo, notamos que cuando el volteo no es favorable energéticamente ($\Delta H > 0$), la función $\exp(-\Delta H/(k_B T))$ es creciente con la temperatura, por lo que la condición dada en el paso 5 se cumplirá más veces cuánto mayor sea el valor de T , introduciendo así la agitación térmica.

La simulación del modelo de Ising consiste en, partiendo de una configuración inicial de los espines, repetir el paso anterior un número determinado N_p de veces con el objetivo de que el sistema llegue al *equilibrio térmico*. Se alcanza este equilibrio cuando la magnetización media llega a un valor promedio constante alrededor del cual fluctúa.

Para finalizar la exposición del modelo, en este tipo de simulaciones es usual imponer condiciones de contorno periódicas para evitar efectos no deseados en la frontera. Al imponer condiciones de contorno periódicas en el caso 1D tenemos que el vecino *izquierdo* del espín s_1 será el espín s_L , y que el vecino *derecho* del espín s_L será el espín s_1 . Es como si doblásemos la cadena uniendo los dos extremos, de ahí el término “periódicas”. En 1D tendremos:

$$\begin{cases} \Delta H = 2Js_1(s_L + s_2) & \text{si } i = 1. \\ \Delta H = 2Js_i(s_{i-1} + s_{i+1}) & \text{si } 1 < i < L. \\ \Delta H = 2Js_L(s_{L-1} + s_1) & \text{si } i = L. \end{cases} \quad (10)$$

Este tipo de condiciones pueden extenderse a redes de cualquier dimensión sin más que aplicarlas a cada dimensión lateral por separado. A modo de ejemplo, para el espín $s_{1,1}$ en 2D tendremos:

$$\Delta H = 2Js_{1,1}(s_{1,L} + s_{1,2} + s_{L,1} + s_{2,1}). \quad (11)$$

2. Ejercicios

A lo largo de toda la PEC tomaremos como constante de interacción $J = 1$ y consideraremos que $k_B = 1$. Esto implica que la temperatura crítica en estas unidades es $T_c = 2.27$. Por otro lado, el número total de pasos de simulación, N_p , tendrá la forma $N_p = 10^A$, siendo A un parámetro de la simulación.

Cada simulación del modelo partirá de una configuración inicial completamente desordenada. Esto es, el valor inicial de cada espín de la red tomará el valor 1 con probabilidad 1/2, y el valor -1 con la misma probabilidad.

Ejercicio 1 (3 puntos)

Realice un programa en C que simule el modelo de Ising en una red cuadrada de tamaño $L \times L$ con condiciones de contorno periódicas. El programa deberá recibir por línea de comandos los parámetros de la simulación: el tamaño del sistema L , el exponente A asociado al número de pasos total de la simulación, y la temperatura T . El programa deberá dar como resultado un archivo de datos con L filas y L columnas de forma que la entrada asociada a la fila i y la columna j sea el valor $s_{i,j}$. Realizar una simulación para los siguientes parámetros y representar dichos datos con MATLAB en un mapa de color en dos colores, negro y amarillo, correspondientes a cada una de las dos posibles orientaciones del espín:

- a) $L = 100$, $A = 5$ y $T = 1$.
- b) $L = 100$, $A = 8$ y $T = 1$.
- c) $L = 100$, $A = 8$ y $T = 2$.
- d) $L = 100$, $A = 8$ y $T = 2.5$.

Discutir razonadamente los resultados obtenidos en relación a la teoría explicada anteriormente.

Ejercicio 2 (3 puntos)

Como fue explicado anteriormente, la manera de medir el grado de orden en el modelo de Ising es mediante la magnetización por espín, m , cuya expresión general viene dada en la ec. (6), y en el caso particular de nuestra red cuadrada por la ec. (7). Dicho parámetro evoluciona en función del número de pasos de simulación n (que jugaría el papel de tiempo). Por ello es necesario considerar un número total de pasos N_p suficientemente grande si queremos llegar al equilibrio térmico.

En este ejercicio queremos comprobar si para un valor de N_p dado, la magnetización ha llegado al equilibrio. Para ver esto, fijaremos el número total de pasos a $N_p = 10^7$ y recogeremos el valor de la magnetización media cada 10^4 pasos. Se deberá modificar el programa anterior de modo que ahora genere un archivo de salida con 2 columnas y 10^3 filas. La primera columna debe contener el número de pasos en el que se ha realizado la medida, y la segunda la magnetización media del sistema en ese momento. Realizar dichas medidas para una red cuadrada de tamaño 50×50 ($L = 50$) y para el siguiente conjunto de temperaturas: $T = \{1, 1.5, 2, 2.3, 2.5, 3\}$. Representar con MATLAB en una misma gráfica el valor de $|m|$ en función del número de pasos en el que se ha realizado la medida (1000 puntos en total) para todas las temperaturas pedidas utilizando diferentes símbolos y colores.

Discutir razonadamente los resultados obtenidos.

Ejercicio 3 (4 puntos)

Onsager obtuvo en 1944 la solución exacta para el modelo de Ising bidimensional. Concretamente, el módulo de la magnetización media en el equilibrio, en función de la temperatura, toma la siguiente expresión:

$$|m|(T) = \begin{cases} 0, & \text{si } T > T_c \\ \left(1 - \sinh\left(\frac{2J}{k_B T}\right)^{-4}\right)^{1/8}, & \text{si } T \leq T_c. \end{cases} \quad (12)$$

En nuestras simulaciones, la magnetización media fluctúa incluso en el equilibrio. Para reducir las fluctuaciones en este tipo de métodos de Monte Carlo, lo que se suele hacer es realizar promedios sobre varias simulaciones del mismo sistema pero considerando diferentes realizaciones del ruido (si se prefiere, utilizando diferentes conjuntos de números aleatorios). Esto se consigue variando la semilla del generador de números aleatorios al comienzo de cada simulación. Si realizamos N simulaciones del sistema variando el ruido, obtendremos N valores diferentes de la magnetización media. Ahora podemos tomar el promedio sobre las N realizaciones, es decir:

$$\langle |m| \rangle(n) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N |m_k(n)|,$$

donde $m_k(n)$ es la magnetización media obtenida en el paso n de la realización k .

En este ejercicio comprobaremos experimentalmente la solución de Onsager dada en la ec. (12). Para ello, simularemos en C el modelo de Ising bidimensional sobre una red cuadrada de tamaño 10×10 ($L = 10$) y obtendremos el valor de $\langle |m| \rangle(N_p)$ con $N_p = 10^5$ y $N = 5000$. Se hará esto para el intervalo de temperaturas $[1.25, 2.25]$ con un paso $\delta T = 0.1$. El programa deberá generar un archivo de datos con dos columnas que representen los valores de T y $\langle |m| \rangle(N_p)$, y un total de 11 puntos. Representar con MATLAB los puntos $\langle |m| \rangle(N_p)$ vs T , junto a la solución de Onsager indicada mediante una línea continua. Discutir razonadamente los datos obtenidos.