

# SIMULACIÓ DEL MODEL D'ISING EN 2D

## Fenòmens col·lectius i transicions de fase

Adam Fernández García

Gener 2023

### Resum

En aquest document s'exposen els resultats obtinguts a partir d'una simulació del model d'Ising en 2D. Aquesta anàlisi inclou una breu introducció teòrica, una discussió sobre el mètode de simulació utilitzat, una anàlisi del comportament de l'energia, la magnetització, el paràmetre d'orde i la susceptibilitat del sistema en funció de la temperatura, una discussió sobre l'efecte de la mida del sistema sobre aquestes magnituds i el càlcul dels determinats exponents crítics extrapolant el sistema a un sistema infinit. Per acabar es mostren les conclusions obtingudes.

## 1 Introducció teòrica

El model d'Ising és un model reticular. Aquest tipus de models es denominen així per estar definits en un reticle (o xarxa) d-dimensional, no necessàriament regular, que conté  $N$  nusos (o punts), de manera que cada nus porta associada una variable, que pot ser discreta o contínua. Aquestes variables interaccionen d'acord amb unes determinades regles que determinen el hamiltonià del sistema.

Entre la gran varietat de models reticulars que s'han proposat, el model d'Ising és el més conegut i paradigmàtic. Un aspecte bastant important d'aquest model és que té solució anàlitica per cas 1D i 2D, i per tant podem comparar tots els valors obtinguts en aquest informe amb els valors predits teòricament. En aquest model es defineix una variable clàssica de spin  $S_i$  en cada punt  $i$  de la xarxa (la qual suposarem regular), que pot prendre dos valors,  $S_i = \pm 1$  (amunt o avall). El hamiltonià del model és,

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle_{nn}} S_i S_j - h \sum_i S_i \quad (1)$$

on la primera suma s'estén sobre tots els parells de primers veïns de la xarxa, i per tant representa la suma de  $\frac{1}{2}zN$  termes, on  $z$  és el nombre de primers veïns de la xarxa. Aquest terme defineix la interacció entre les variables de spin, on  $J$  una mesura de l'energia d'interacció. El segon terme té en compte la possible interacció dels spins amb un camp extern  $h$ , i en el cas d'aquesta simulació s'ha considerat nul. En aquesta simulació hem treballat amb variables reduïdes per tal d'obtenir resultats el més generals possibles. L'hamiltonià amb el que hem treballat, ara en variables reduïdes, s'escriu de la següent forma:

$$\mathcal{H}^* = - \sum_{\langle ij \rangle_{nn}} S_i S_j \quad (2)$$

on  $\mathcal{H}^* = \frac{\mathcal{H}}{J}$ .

La simulació s'ha fet mitjançant l'algoritme de metrópolis. Aquest algoritme és un mètode de Montecarlo en Cadena de Markov per obtenir una seqüència de mostres aleatòries mitjançant una distribució de probabilitat a partir de la qual el mostreig directe és difícil. S'ha implementat de la següent manera:

1. Per començar, es genera una distribució inicial aleatòria, on cada spin  $S_i$  té un valor  $+1$  (o  $-1$ ) amb una probabilitat del 50%.
2. A continuació es proposa el canvi de signe d'un spin aleatori de la xarxa,  $S_i = -S_i$  i es calcula la variació en l'energia del sistema.
3. Si l'energia disminueix, s'accepta el canvi, ja que com tot sistema físic, aquest sistema busca minimitzar la seva energia per tal d'arribar a l'equilibri.
4. Si l'energia augmenta, el canvi només s'acceptarà amb una certa probabilitat: es genera un nombre aleatori  $\delta \sim U(0,1)$ , de tal forma que si  $\delta < P$ , on  $P = e^{\frac{-\Delta \mathcal{H}}{K_B T}} = e^{\frac{-\mathcal{H}^*}{T^*}}$  s'accepta.  $T^* = \frac{K_B T}{J}$  és la temperatura reduïda.
5. Per acabar es repeteix aquest procediment  $N$  cops.

Degut a que les cadenes de Markov presenten fortes correlacions entre elles aquest procediment s'ha repetit diverses vegades per a cada temperatura, deixant així que el sistema evolucioni i arribi a l'equilibri. Es pot identificar un ordre "temporal" amb el nombre de cops que es repeteix aquest procediment, caracteritzat per un índex IMC. Els primers nombres d'aquest índex no es tindran en compte a l'hora de fer els càlculs per tal d'evitar les fortes correlacions que presenten amb l'estat inicial (veure apartat 2).

Després també s'ha repetit tot aquest procés per a diferents *seeds* (llavors per a generar els números aleatoris  $U(0,1)$ ), per tal d'evitar certes correlacions que encara presenta la cadena amb l'estat inicial a baixa temperatura (veure apartat 2).

## 2 Evolució temporal de l'energia i la magnetització

Com ja s'ha introduït breument en l'apartat 1, amb el mètode emprat l'energia del sistema es va actualitzant a cada pas de l'algoritme, IMC, i això, tot i no ser-ho realment, es pot entendre com una evolució temporal del sistema cap a la seva configuració de mínima energia, és a dir, cap a l'equilibri.

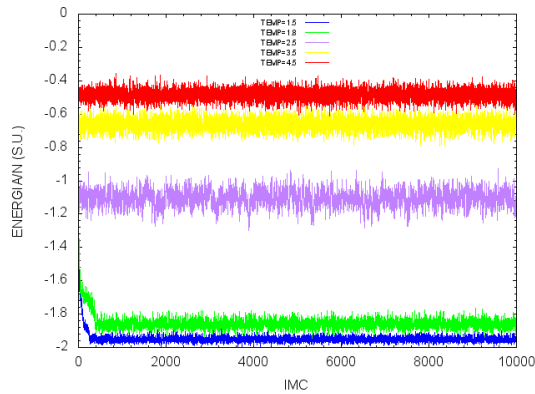


Figura 1: Representació de l'evolució "temporal" de l'energia en funció del pas de Montecarlo per a diferents temperatures.

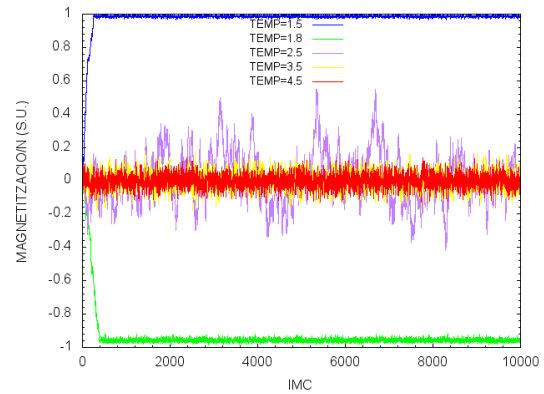


Figura 2: Representació de l'evolució "temporal" de la magnetització en funció del pas de Montecarlo per a diferents temperatures.

En els gràfics 1 i 2 tant l'energia com la temperatura estan en unitats reduïdes i corresponen a un sistema amb  $L=48$ . L'escala de color de les temperatures, per si no s'aprecia bé, és la següent:  $T=1.5$  (blau),  $T=1.8$  (verd),  $T=2.5$  (lila),  $T=3.5$  (groc) i  $T=4.5$  (vermell).

En ambdós gràfics es pot veure com el sistema magnètic estudiat es comporta de formes diferents depenent de la temperatura en que es troba. Aquest fet posa de manifest una transició de fase a una temperatura crítica  $T_c$  (segons la teoria,  $T_c \simeq 2.269$ ). Aquesta transició s'estudia amb més detall en els següents apartats. Ara per ara hi ha tres règims importants a destacar en les figures 1 i 2:

- En primer lloc, per a temperatures  $T < T_c$ , el sistema en l'equilibri tendeix a la seva configuració de mínima energia. En aquest cas, tal com es pot deduir a partir del hamiltonià d'Ising (eq. 2), aquesta configuració correspon a un estat ferromagnètic, en el qual tots els spins estan alineats (tots amunt  $S_i = 1$ , o avall  $S_i = -1$ ). En aquest estat l'energia per partícula  $\langle e \rangle \rightarrow -2$  (fig 1) i la magnetització per partícula  $\langle m \rangle \rightarrow \pm 1$  (tots els spins amunt  $\langle m \rangle = 1$ , o avall  $\langle m \rangle = -1$ , fig 2).
- Quan  $T \simeq T_c$  té lloc la transició de fase d'un estat ferromagnètic a un de paramagnètic. Aquest fet es pot veure en els gràfics: en el cas de l'energia aquesta s'estabilitza al voltant de  $\langle e \rangle = -1$ , i pel cas de la magnetització, aquesta pateix fortes fluctuacions al voltant de  $\langle m \rangle \simeq 0$ , les quals posen de manifest les fluctuacions que pateix el sistema durant el canvi de fase.
- Finalment, quan  $T > T_c$ , l'energia va augmentant amb  $T$ , fins al punt en que quan  $T \rightarrow \infty$ , el sistema en l'equilibri adopta una configuració on els spins prenen valors  $S_i = 1$  (o  $S_i = -1$ ) aleatòriament, és a dir, adopta un estat paramagnètic. En aquest límit,  $\langle e \rangle \rightarrow 0$ , tal com es pot deduir a partir de l'hamiltonià (eq 2). La magnetització és  $\langle m \rangle = 0$ , com es d'esperar en una fase paramagnètica, i en aquest cas les fluctuacions de  $\langle m \rangle$  són molt més petites comparades amb les del cas  $T \simeq T_c$ .

Des del punt de vista de la simulació, la funcionalitat de l'energia amb la temperatura està relacionada amb el pas 4 explicat en l'apartat 1. Per temperatures baixes  $P$  és molt petit, i per tant la probabilitat d'acceptar un canvi desfavorable energèticament (que augmenti l'energia del sistema), també ho és. Aquesta probabilitat augmenta quan augmenta  $P$ , és a dir, quan augmenta  $T$ , fins al punt en que quan  $T \rightarrow \infty$   $P = 1$ . Per tant, en el límit d'alta temperatura ( $T \rightarrow \infty$ ) s'accepten tots els canvis proposats en l'algoritme i s'assoleix una configuració on els spins prenen valors  $S_i = 1$  (o  $S_i = -1$ ) aleatòriament, és a dir, una configuració paramagnètica. En canvi, per a temperatures baixes, quan  $T \rightarrow 0$   $P = 0$  i només s'accepten els canvis que són favorables energèticament, assolint així una configuració ferromagnètica.

Per últim, cal destacar les correlacions que presenten tant l'energia com la magnetització amb l'estat inicial. Aquestes correlacions s'aprecien molt bé en el cas de baixes temperatures en les figures 1 i 2, on es veu que el sistema triga un cert "temps" a relaxar-se fins al seu estat d'equilibri. Per no tenir en compte aquestes correlacions, a l'hora de calcular les variables termodinàmiques s'han descartat els 8000 primers passos de Montecarlo IMC. A baixes temperatures la magnetització també presenta correlacions amb l'estat inicial, ja que tendirà a  $\langle m \rangle = 1$  o  $\langle m \rangle = -1$  depenent d'aquest, i per tant depenent de la seed utilitzada en la generació aleatòria de la configuració inicial (veure fig 3). Per eliminar aquestes correlacions s'ha repetit el càlcul per diverses seeds diferents i s'ha fet la mitjana dels resultats.

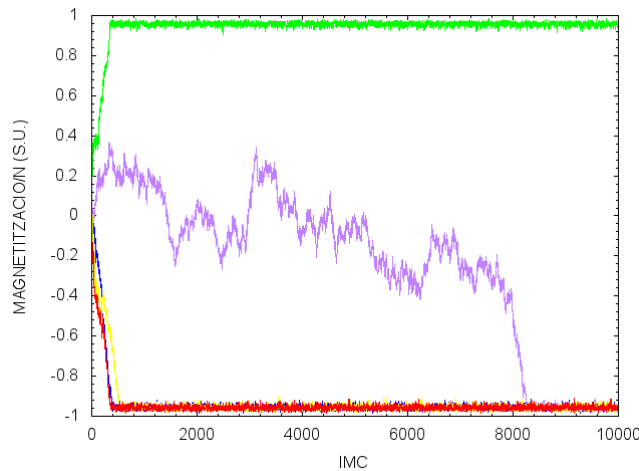


Figura 3: Representació de l'evolució "temporal" de la magnetització a una temperatura reduïda  $T=1.8$  i per a diferents seeds. Corresponen a un sistema amb  $L=48$ .

### 3 Comportament de les variables termodinàmiques per L=48

En aquest apartat es discuteix el comportament de l'energia, la magnetització (paràmetre d'ordre), la capacitat calorífica i la susceptibilitat del sistema en funció de la temperatura per a un sistema de mida L=48.

#### 3.1 Energia

L'energia mitjana per spin i les seves fluctuacions (error) s'han obtingut mitjançant les següents expressions:

$$\langle e \rangle = \frac{\langle E \rangle}{N} \quad \epsilon_e = \frac{1}{N} \frac{\sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}}{\sqrt{SUM}} \quad (3)$$

on  $SUM$  és el número de configuracions independents promitjades.

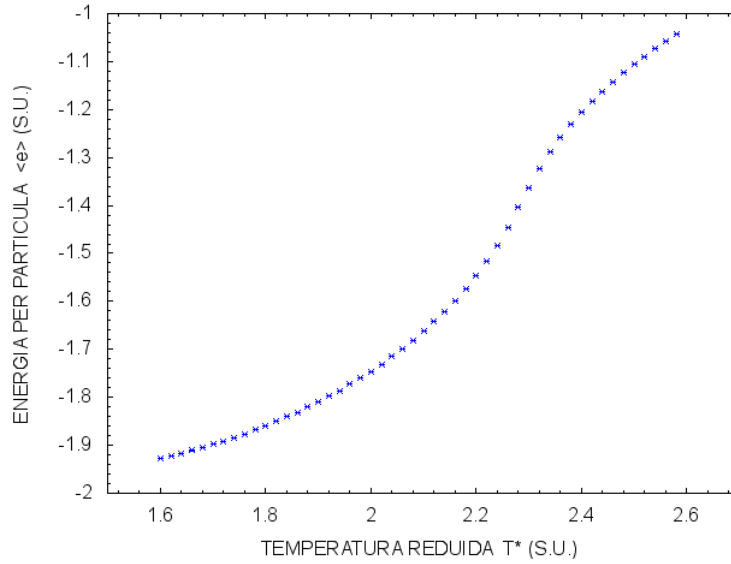


Figura 4: Representació de l'energia per partícula en funció de la temperatura per a un sistema amb L=48. Ambdues magnituds estan en unitats reduïdes. Inclou barres d'error en l'energia.

En el gràfic 4 no s'han inclòs barres d'error en la temperatura degut a que el seu error és només degut a la precisió numèrica de fortran (*REAL\*8*), havent-hi diversos ordres de magnitud entre les temperatures amb les que estem treballant i el seu error. Per tant, aquest error s'ha negligit.

Els resultats obtinguts són els esperats teòricament:  $\langle e \rangle \rightarrow -2$  i  $\langle e \rangle \rightarrow 0$  per a baixes i altes temperatures respectivament. El punt d'inflexió en la corba de l'energia correspon a la temperatura crítica  $T_c$  on és dona lloc la transició de fase. A simple vista ja podem veure que  $T_c \simeq 2.3$ .

#### 3.2 Magnetització

La magnetització mitjana per spin i les seves fluctuacions (error) s'han obtingut mitjançant les següents expressions:

$$\langle |m| \rangle = \frac{\langle |M| \rangle}{N} \quad \sqrt{\langle m^2 \rangle} = \sqrt{\frac{\langle M^2 \rangle}{N^2}} \quad \epsilon_m = \frac{1}{N} \frac{\sqrt{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}}{\sqrt{SUM}} \quad (4)$$

on  $SUM$  és el número de configuracions independents promitjades.

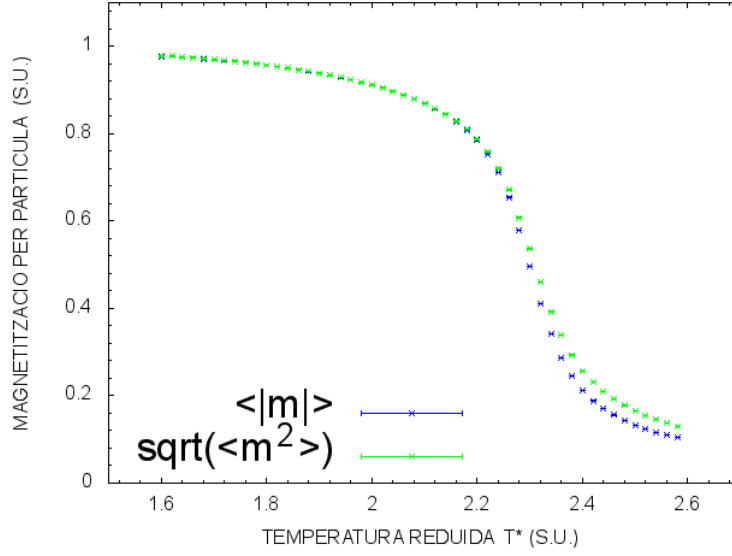


Figura 5: Representació de la magnetització per partícula en funció de la temperatura per a un sistema amb  $L=48$ . Ambdues magnituds estan en unitats reduïdes. Inclou barres d'error en l'energia. L'error en la temperatura és negligible i no s'ha inclòs.

La magnetització és el paràmetre d'orde d'aquesta transició, i tal com era d'esperar presenta un comportament continu. Per tant, aquesta és una transició de fase de segon ordre o contínua. Tal com esperàvem teòricament,  $\langle |m| \rangle \rightarrow 1$  i  $\langle |m| \rangle \rightarrow 0$  per a baixes i altes temperatures respectivament. El punt d'inflexió, igual que en el cas de l'energia, correspon a la temperatura crítica en que es dona la transició ( $T_c \simeq 2.3$ ). S'ha estudiat el comportament de  $\langle |m| \rangle$  (o  $\sqrt{\langle m^2 \rangle}$ , són equivalents tal com es pot veure en la figura 5), i no el de  $\langle m \rangle$ , ja que al haver fet un promitg sobre varies seeds,  $\langle m \rangle \simeq \langle M \rangle \simeq 0$ .

### 3.3 Capacitat calorífica $C_v$

La capacitat calorífica s'ha calculat a partir de les fluctuacions de l'energia de la següent forma:

$$c_v^* = \frac{C_v}{k_B N} = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{NT^2} \quad (5)$$

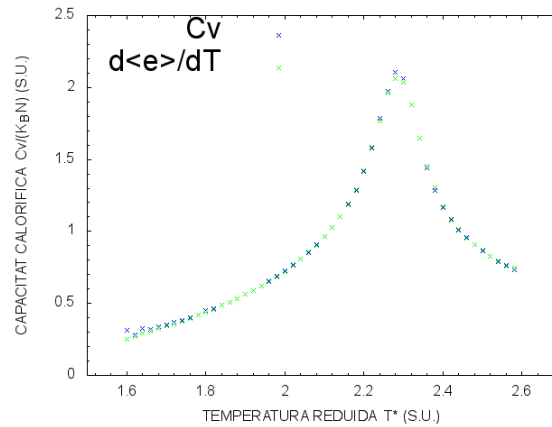


Figura 6: Representació de la capacitat calorífica  $c_v^*$  en funció de la temperatura per a un sistema amb  $L=48$ . Ambdues magnituds estan en unitats reduïdes. Els errors en ambdues magnituds s'han negligit.

Igualment, també es pot calcular a partir de la seva definició, que tal com es pot comprovar en la figura 6 és totalment equivalent.

$$\frac{d \langle e \rangle}{dT} \quad (6)$$

Aquesta derivada s'ha realitzat mitjançant les fórmules de la derivada avançada, atraçada i central.

El pic que s'observa en la figura 6 divergiria en el cas d'un sistema infinit, i manifesta la transició de fase que té lloc a  $T_c \simeq 2.3$ . El comportament trobat és l'esperat teòricament.

### 3.4 Susceptibilitat

La susceptibilitat s'ha calculat a partir de les fluctuacions de la magnetització de la següent forma:

$$\chi^* = \frac{\chi}{k_B N} = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{NT} \quad (7)$$

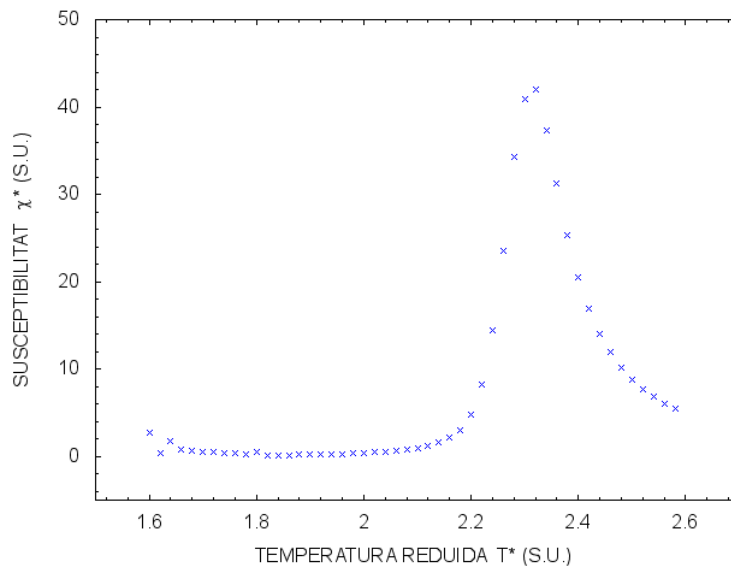


Figura 7: Representació de la susceptibilitat en funció de la temperatura per a un sistema amb  $L=48$ . Ambdues magnituds estan en unitats reduïdes. Els errors en ambdues magnituds s'han negligit.

El pic que s'observa en la figura 7 divergiria en el cas d'un sistema infinit, i manifesta la transició de fase que té lloc a  $T_c \simeq 2.3$ . El comportament trobat és l'esperat teòricament.

## 4 Discussió de l'efecte de la mida del sistema $L$ sobre les variables termodinàmiques

Fer simulacions amb sistemes infinits és impossible, ja que el poder de computació dels ordinadors és limitat. Per tant és interessant estudiar l'efecte que té variar la mida del sistema  $L$  sobre les diferents variables termodinàmiques.

### 4.1 Energia i magnetització

Com es pot veure en les figures 8 i 9, tant el comportament de l'energia com el de la magnetització, ens els límits d'alta i baixa temperatura (temperatures allunyades del punt crític), és el mateix que el descrit ens els apartats 3.1 i 3.2 respectivament. El que sí s'aprecia és que a mesura que creix el

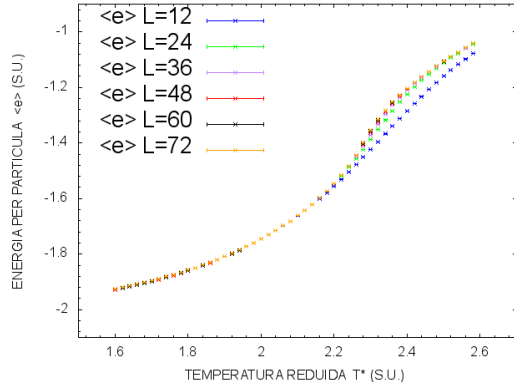


Figura 8: Representació de l'energia per partícula en funció de la temperatura per a sistemes de diferents  $L$ . Ambdues magnituds estan en unitats reduïdes. Inclou barres d'error en l'energia. L'error en la temperatura és negligible i no s'ha inclòs.

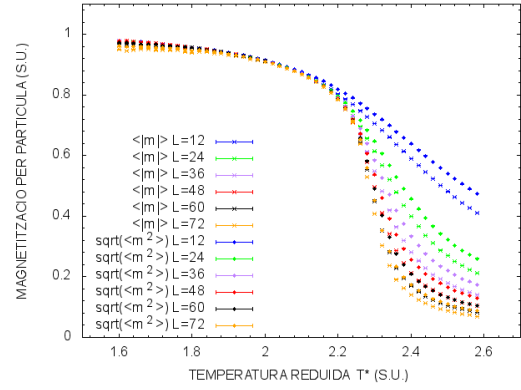


Figura 9: Representació de la magnetització per partícula en funció de la temperatura per a sistemes de diferents  $L$ . Ambdues magnituds estan en unitats reduïdes. Inclou barres d'error en l'energia. L'error en la temperatura és negligible i no s'ha inclòs.

tamany del sistema  $L$ , el punt d'inflexió en ambdues corbes es desplaça cap a menors temperatures, i per tant també ho fa la temperatura crítica. També, com més gran és el sistema més brusc és el canvi de fase (tal com és pot apreciar en el pendent de la magnetització).

## 4.2 Capacitat calorífica i susceptibilitat

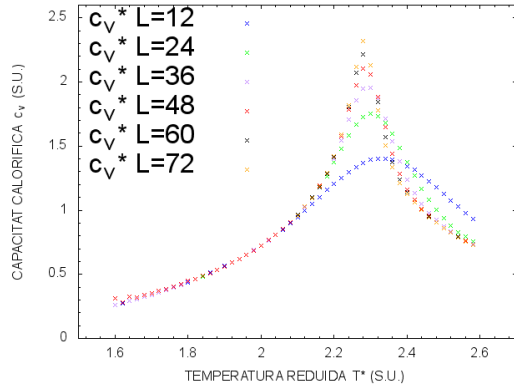


Figura 10: Representació de la capacitat calorífica  $c_v^*$  en funció de la temperatura per a sistemes amb diferent  $L$ . Ambdues magnituds estan en unitats reduïdes. Els errors en ambdues magnituds s'han negligit.

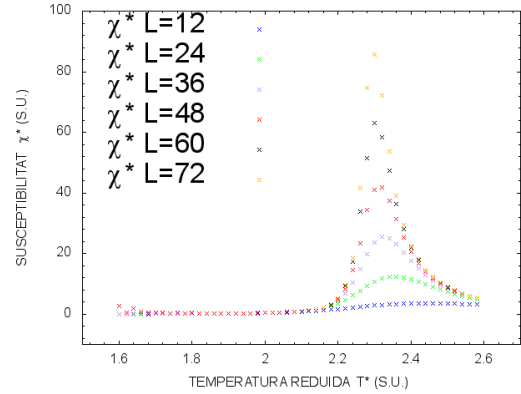


Figura 11: Representació de la susceptibilitat en funció de la temperatura per a un sistema amb  $L=48$ . Ambdues magnituds estan en unitats reduïdes. Els errors en ambdues magnituds s'han negligit.

En les figures 8 i 9 s'han descartat els punts a baixes temperatures en els casos de  $L = 60$  i  $L = 72$  degut que, a causa d'una falta d'estadística a baixes temperatures, divergeixen. Igual que en l'apartat anterior, el comportament, tant de la capacitat calorífica com el de la susceptibilitat per diferents  $L$  és similar al comportament vist en els apartats 3.3 i 3.4 respectivament. També, tal com s'ha comentat en l'apartat anterior, com més gran és el sistema més brusc és el canvi de fase, i la  $T_c$  és desplaça a menors temperatures. Aquest fet és pot apreciar molt bé en les figures 10 i 11, on és veu clarament que com més gran és  $L$ , més alt és el pic ("més divergeixen") d'aquestes magnituds, i en canvi, en la figura 11 per a  $L = 12$  el pic és tant petit que casi no s'aprecia.

## 5 Càlcul de la temperatura crítica $T_c$

En els sistemes de mida finita no existeix un comportament crític com a tal, sinó que el que s'observa és un comportament pseudocrític a una determinada temperatura  $T_{CL}$ . Aquests sistemes reproduïen bé el comportament fins que la longitud de correlació és proporcional a la mida del sistema,  $\xi \propto L = kL$ . Per tant, com que  $T_{CL} \simeq T_C$ , sabem que el comportament de la longitud de correlació a prop del punt crític vindrà determinat per,

$$\xi = A|T_{CL} - T_C|^{-\nu} = CL \quad \rightarrow \quad T_{CL} = T_C + DL^{-\frac{1}{\nu}} \quad (8)$$

on  $C$  i  $D$  són constants. Per tant, com que de la teoria sabem que  $\nu = 1$ , fent un ajust lineal de  $T_{CL}$  en funció de  $\frac{1}{L}$  podem obtenir  $T_C$ .

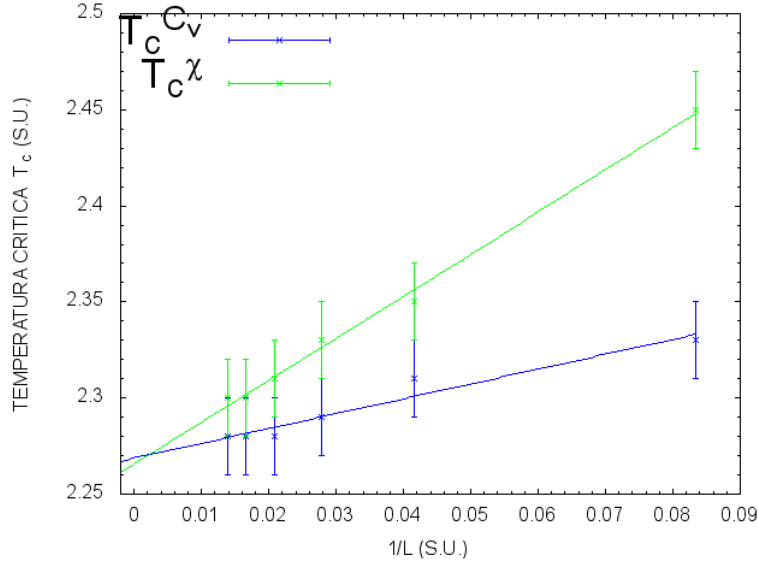


Figura 12: Representació de  $T_{CL}$  en funció de  $\frac{1}{L}$ . S'han inclòs barres d'error per  $T_{CL}$ .  $T_{CL}$  està en unitats reduïdes. S'ha inclòs una regressió lineal.

Les diferents  $T_{CL}$  s'han obtingut agafant el punt màxim per a cada  $L$  en les figures 10 i 11. L'error en aquestes temperatures és  $\delta T_{CL} = \pm 0.02$ , que és la distància entre dues temperatures consecutives. S'ha realitzat un ajust lineal amb gnpot i s'han obtingut els següents resultats:

$$T_{CL}^{C_v} = 2.269 \pm 0.004$$

$$T_{CL}^X = 2.266 \pm 0.003$$

$$T_C = \frac{T_{CL}^{C_v} + T_{CL}^X}{2} = 2.267 \pm 0.005$$

On s'ha fet la corresponent propagació d'errors per tal de trobar  $\delta T_C$ . El valor teòric de és  $T_C = \frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})} \simeq 2.269$ , i per tant el valor obtingut amb la simulació és més que acceptable, ja que concorda amb el valor teòric dins dels marges d'error.

## 6 Càlcul dels exponents crítics

En aquest no s'utilitzarà cap valor teòric, la  $T_C$  utilitzada és la trobada en l'apartat anterior, ja que concorda amb el valor teòric.



## 6.1 Exponent $\nu$

Anàlogament a com s'ha fet en l'apartat 5, utilitzant l'expressió 8, arribem a:

$$\ln(|T_{CL} - T_C|) = A - \frac{1}{\nu} \ln(L) \quad (9)$$

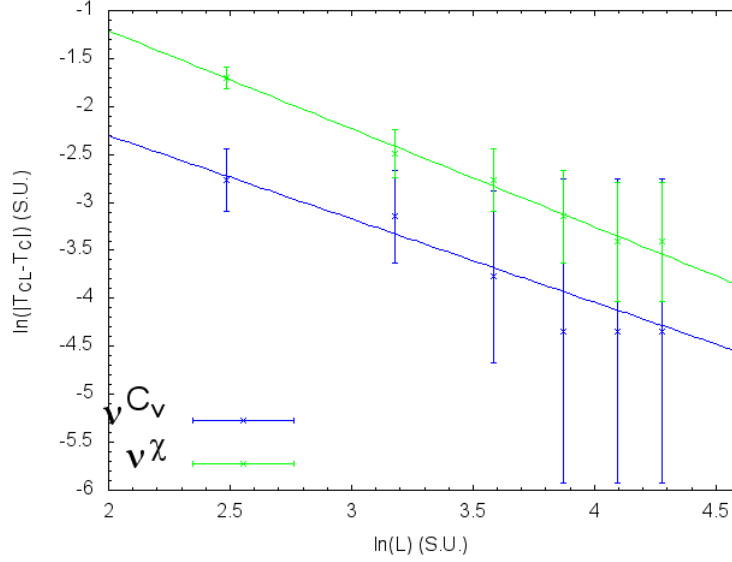


Figura 13: Regressió lineal a partir de la capacitat calorífica i de la susceptibilitat per tal d'obtenir l'exponent  $\nu$ . S'inclouen barres d'error el l'eix de les y.

L'error en l'eix de les y en la figura 13 correspon a fer la corresponent propagació d'errors dels errors en  $T_{CL}$  i  $T_C$  (vistos en l'apartat 5). L'ajust lineal  $f(x) = Ax + B$  s'ha realitzat mitjançant gnuplot i s'han obtingut els següents resultats:

$$A_{C_v} = -0.87 \pm 0.12 \quad \rightarrow \quad \nu_{C_v} = \frac{-1}{A_{C_v}} = 1.15 \pm 0.16$$

$$A_{\chi} = -1.02 \pm 0.04 \quad \rightarrow \quad \nu_{\chi} = \frac{-1}{A_{\chi}} = 0.98 \pm 0.04$$

$$\nu = \frac{\nu_{C_v} + \nu_{\chi}}{2} = 1.06 \pm 0.08$$

On s'ha fet la corresponent propagació d'errors per tal de trobar  $\delta\nu$ . El valor teòric de és  $\nu = 1$ , i per tant el valor obtingut amb la simulació és més que acceptable, ja que concorda amb el valor teòric dins dels marges d'error.

## 6.2 Exponent $\gamma$

Procedint de forma similar als dos anterior apartats:

$$\chi = A|T_{CL} - T_C|^{-\gamma} = A(CL^{-\frac{1}{\nu}})^{-\gamma} \quad \rightarrow \quad \ln(\chi(T_{CL})) = D + \frac{\gamma}{\nu} \ln(L) \quad (10)$$

L'ajust lineal  $f(x) = Ax + B$  (figura 14) s'ha realitzat amb gnuplot i els seus resultats són:

$$A = 1.765 \pm 0.006 \quad \rightarrow \quad \gamma = A\nu = 1.87 \pm 0.14$$

On s'ha fet la corresponent propagació d'errors per tal de trobar  $\delta\gamma$  (on s'han tingut en compte els errors  $\delta A$  i  $\delta\nu$ ). El valor teòric de és  $\gamma = \frac{7}{4} = 1.75$ , i per tant el valor obtingut amb la simulació és més que acceptable, ja que concorda amb el valor teòric dins dels marges d'error.

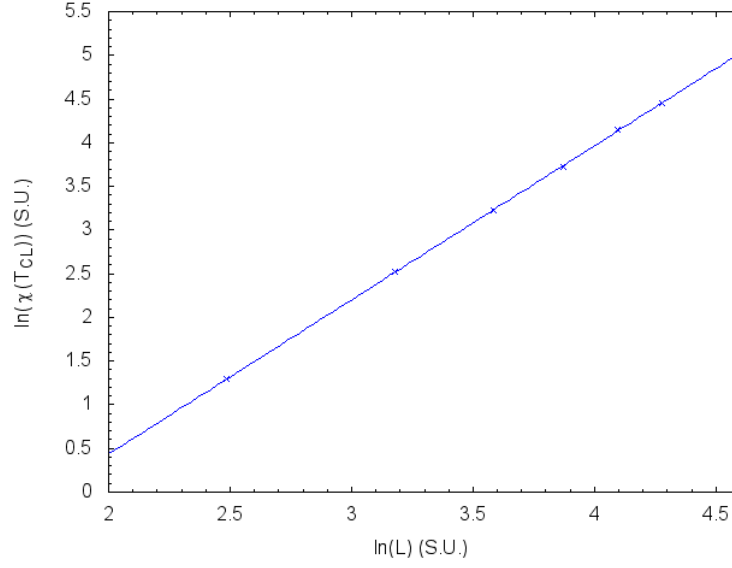


Figura 14: Regressió lineal a partir de la susceptibilitat per tal d'obtenir l'exponent  $\gamma$ .

### 6.3 Exponent $\alpha$

Anàlogament a l'apartat anterior:

$$C_v = A|T_{CL} - T_C|^{-\alpha} = A(CL^{\frac{-1}{\nu}})^{-\alpha} \quad \rightarrow \quad \ln(C_v(T_{CL})) = D + \frac{\alpha}{\nu} \ln(L) \quad (11)$$

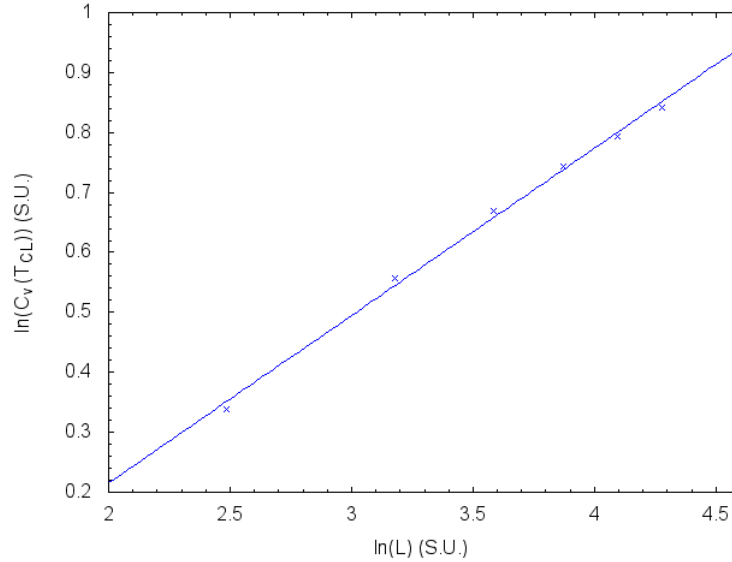


Figura 15: Regressió lineal a partir de la capacitat calorífica per tal d'obtenir l'exponent  $\alpha$ .

L'ajust lineal  $f(x) = Ax + B$  s'ha realitzat amb gnuplot i els seus resultats són:

$$A = 0.279 \pm 0.008 \quad \rightarrow \quad \alpha = A\nu = 0.30 \pm 0.02$$

On s'ha fet la corresponent propagació d'errors per tal de trobar  $\delta\alpha$  (on s'han tingut en compte els errors  $\delta A$  i  $\delta\nu$ ). En aquest cas el resultat trobat no concorda amb el resultat teòric esperat  $\alpha_{teo} = 0$ , ja que  $|\alpha - \alpha_{teo}| = 0.30 > 2\delta\alpha = 0.04$ .

## 6.4 Exponent $\beta$

Anàlogament a l'apartat anterior:

$$\langle |m| \rangle = A|T_{CL} - T_C|^\beta = A(CL^{-\frac{1}{\nu}})^\beta \quad \rightarrow \quad \ln(\langle |m| \rangle (T_{CL})) = D - \frac{\beta}{\nu} \ln(L) \quad (12)$$

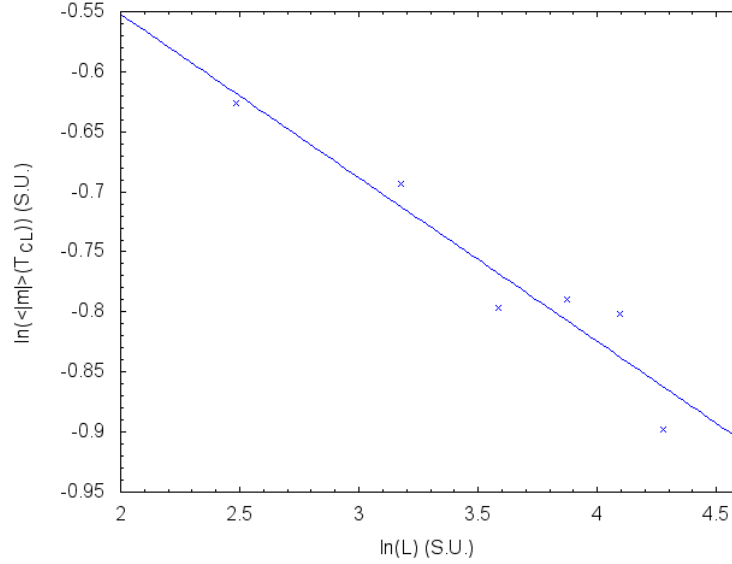


Figura 16: Regressió lineal a partir de la magnetització per tal d'obtenir l'exponent  $\beta$ .

L'ajust lineal  $f(x) = Ax + B$  s'ha realitzat amb gnuplot i els seus resultats són:

$$A = -0.14 \pm 0.02 \quad \rightarrow \quad \beta = A\nu = 0.15 \pm 0.02$$

On s'ha fet la corresponent propagació d'errors per tal de trobar  $\delta\beta$  (on s'han tingut en compte els errors  $\delta A$  i  $\delta\nu$ ). El valor teòric de és  $\beta_{teo} = 0.125$ , i per tant el valor obtingut amb la simulació és acceptable.  $|\beta - \beta_{teo}| = 0.02 < 2\delta\beta = 0.04$  i per tant podem dir que concorda amb el valor teòric.

## 7 Conclusions

Els resultats que s'han obtingut al llarg d'aquest informe per a la transició de fase d'un estat ferromagnètic a un de paramagnètic en un sistema en dues dimensions es resumeixen en la següent taula:

| Exponents crítics | Valor teòric  | Valor obtingut  |
|-------------------|---------------|-----------------|
| $\nu$             | 1             | $1.06 \pm 0.08$ |
| $\gamma$          | $\frac{7}{4}$ | $1.87 \pm 0.14$ |
| $\alpha$          | 0             | $0.30 \pm 0.02$ |
| $\beta$           | $\frac{1}{8}$ | $0.15 \pm 0.02$ |

Taula 1: Taula amb els exponents crítics obtinguts i els valors teòrics esperats.

Tal com es pot veure, pràcticament tots els resultats obtinguts concorden amb els valors teòrics esperats, amb l'única excepció de l'exponent  $\alpha$ . La temperatura crítica obtinguda  $T_c = 2.267 \pm 0.005$  també concorda amb el valor teòric esperat  $T_c \simeq 2.269$ . Per tant, podem concloure que l'algoritme de metrópolis emprat en la realització de la simulació del model d'Ising en 2D és un

bon mètode per a estudiar aquesta transició de fase i obtenir el comportament de les diferents variables termodinàmiques al voltant del punt crític.

Els errors obtinguts són principalment deguts a una manca d'estadística (tot i que com ja hem dit els resultats obtinguts són satisfactoris). Per tant, si es volguessin reduir aquests errors, així com obtenir resultats més precisos, s'haurien d'augmentar el nombre de passos de Montecarlo, el nombre de seeds promitjades i reduir l'interval entre temperatures (sobretot a prop del punt crític). Cal tenir en compte, però, que com més augmentem aquests paràmetres, més augmentarà el temps de computació. En el nostre cas, el temps de computació per a obtenir els resultats corresponents a  $L = 72$  ha estat un total de 37 hores.

## 8 Referències

1. Transparències del campus virtual.
2. Apunts de l'assignatura, fets per Antoni Planes.