

Modelo de Ising

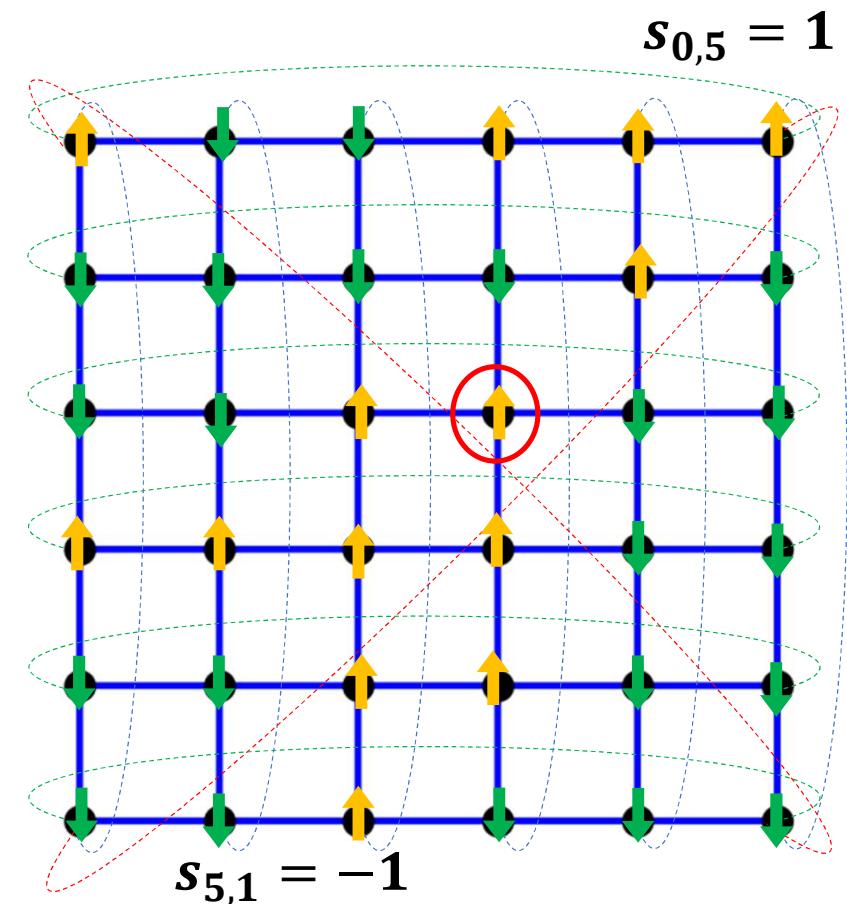
- Objetivo: Simular el estado de equilibrio de un sistema de espines a distintas temperaturas, y medir la magnetización del sistema:

$$m(N, T, t) = \sum_{i,j} s_{i,j}(t)$$

- El sistema está constituido por una red cuadrada de tamaño NxN con interacción a vecinos próximos y condiciones de contorno periódicas.
- El Hamiltoniano del sistema es

$$H(s) = -\frac{1}{2} \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1} s_{ij} [s_{i+1,j} + s_{i-1,j} + s_{i,j+1} + s_{i,j-1}]$$

- Utilizaremos el algoritmo de Metrópolis para muestrear los estados de equilibrio del sistema sobre los que se medirá la magnetización.
- El algoritmo de Metrópolis considera cadenas de Markov con cambios infinitesimales (de un espín). Es decir, si el sistema se encuentra en el estado s en el paso t , el nuevo estado s' en el paso $t + 1$ se obtiene invirtiendo un espín (i,j) elegido al azar: $s'_{ij} = -s_{ij}$
- El nuevo estado s' se aceptará con una probabilidad que depende del cambio de energía debido a invertir el espín: $\Delta E = 2s_{ij}[s_{i+1,j} + s_{i-1,j} + s_{i,j+1} + s_{i,j-1}]$.
 - Si $\Delta E < 0$ el nuevo estado tiene mayor probabilidad de ocurrencia que el anterior: se acepta siempre.
 - Si $\Delta E > 0$ el nuevo estado tiene menor probabilidad de ocurrencia que el anterior: el cambio se acepta con probabilidad $p(s \rightarrow s') = \exp(-\frac{\Delta E}{T})$.



Modelo de Ising – Algoritmo de Metropolis

- Esquema del algoritmo:
 - Crear la matriz de espines s de tamaño NxN. Al mismo tiempo, asignarle una condición inicial aleatoria.
 - Iniciar el bucle temporal:
 - Seleccionar un espín de coordenadas i,j elegidas al azar.
 - Calcular el cambio de energía ΔE asociado a invertir el signo del espín s_{ij} .
 - Decidir si se acepta o no el cambio con probabilidad $p = \min\left(1, \exp\left(-\frac{\Delta E}{T}\right)\right)$. Para esto, generar un número aleatorio u de acuerdo a una distribución de probabilidad uniforme entre 0 y 1. Si $p \geq u$ aceptamos el cambio, si $p < u$ lo rechazamos.
- Nota: La escala temporal a la que evoluciona el sistema a nivel macroscópico depende del número de partículas NxN. Por ello se suele trabajar en unidades de pasos Monte Carlo (Monte Carlo Steps, MCS): cada MCS corresponde a actualizar el sistema un número de veces igual al número de partículas, esto es, NxN veces.
- Objetivos:
 - Medir la magnetización del sistema para varias temperaturas y representar gráficamente su evolución temporal. Identificar las fases paramagnética y ferromagnética.
 - Representar $s_{ij}(t)$ como un mapa 2D y crear un gif mostrando la evolución del sistema para distintas temperaturas.
 - Medir la magnetización en el estado estacionario para al menos $N = 16$ y $T = 0.5, 1.0, 1.5, \dots, 5.0$ y representarla gráficamente, incluyendo barras de error. Para medir la magnetización en el estado estacionario, dejar evolucionar el estado del sistema primero durante un periodo transitorio de t_0 pasos que se deberá ajustar al tamaño del sistema. Medir después el promedio de la magnetización sobre al menos 10^4 MCS.

