

Problema Voluntario 1: Modelo de Ising

Carlos García Palomo

27 de junio de 2023

1. Introducción

El modelo de Ising es un modelo físico que describe el comportamiento de los espines (momentos magnéticos) en un material magnético. En su forma más simple, el modelo de Ising se define en una red cuadrada bidimensional de tamaño $N \times N$ donde cada sitio de la red puede tener un espín hacia arriba (+1) o hacia abajo (-1).

La energía de una configuración en el modelo de Ising se calcula sumando las interacciones entre los espines vecinos. Si dos espines están alineados, la energía es más baja, mientras que si están antialineados, la energía es más alta. En este problema se emplea el algoritmo de Metropolis para calcular la magnetización promedio, la energía media, el calor específico y la función de correlación con sus respectivos errores. Además se estimó el valor del punto crítico y se obtuvo el exponente crítico β de la magnetización donde se compararon los valores numéricos obtenidos con el resultado exacto de Onsager.

2. Resultado exacto de Onsager para T_c

El resultado exacto de Lars Onsager para la temperatura crítica (T_c) en el modelo de Ising 2D con bordes periódicos se conoce como la solución de Onsager y se obtiene mediante un cálculo matemático riguroso.

La solución de Onsager establece que la temperatura crítica del modelo de Ising 2D con bordes periódicos es:

$$T_c = \frac{2J}{\ln(1 + \sqrt{2})} \simeq 2,269J$$

donde J es la constante de acoplamiento entre los espines.

La derivación de esta solución se basa en el cálculo de la función de partición del sistema utilizando técnicas de la teoría de campos y la transformada de Fourier. El enfoque principal de Onsager fue utilizar la simetría del sistema para simplificar los cálculos y obtener una expresión analítica exacta.

3. Comportamiento para temperaturas y tamaños

En esta sección se muestran las gráficas obtenidas para los valores de $N=16,32,64$ y 128 y temperaturas entre 1.5 y 3.5. Para $N=128$ se empleó la versión de Joel del código que aparece en el repositorio de GitHub, donde también se encuentran todas las tablas de datos con sus correspondientes incertidumbres (véanse referencias). Cabe notar que en VS Code se empleó la función rand en vez de gsl para la generación de números aleatorios, lo que puede haber afectado a los resultados. Los errores obtenidos en las gráficas obtenidos con una probabilidad del 95% multiplicando la incertidumbre por el factor de cobertura 1.96. Si por ejemplo tenemos que el valor medio es \bar{x} su error $\Delta x = 1,96 \cdot \frac{s}{\sqrt{N_{datos}}}$ donde s es la desviación típica y N_{datos} el número de datos de la población que en este caso son $N_{datos} = 10^4$ ya que se toman medidas cada 100 pMC y se realizaron 10^6 pMC.

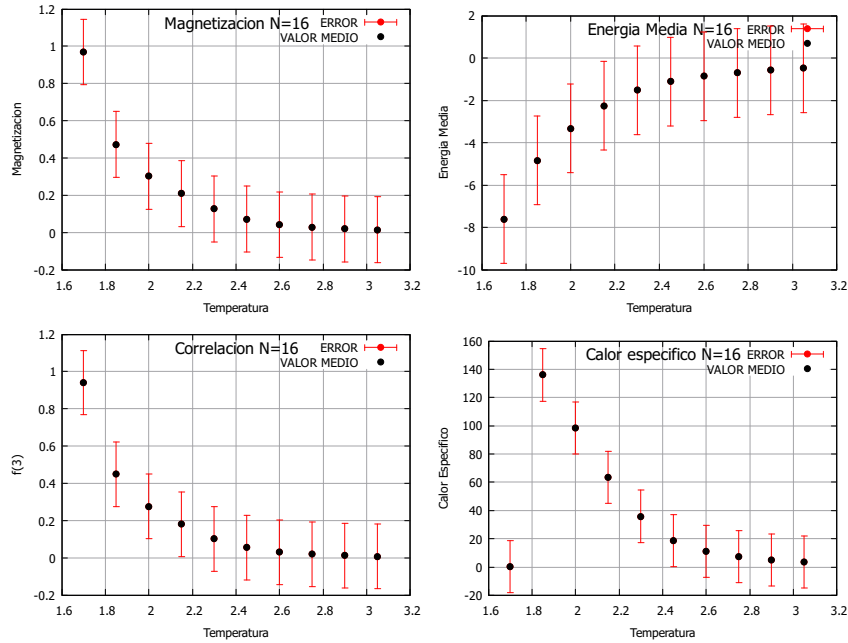


Figura 1: Gráficas de la evolución de los valores medios de la Magnetización, la Energía Media, el Calor Específico y la Correlación para aquellas partículas separadas 3 huecos de la retícula para un valor de $N=16$

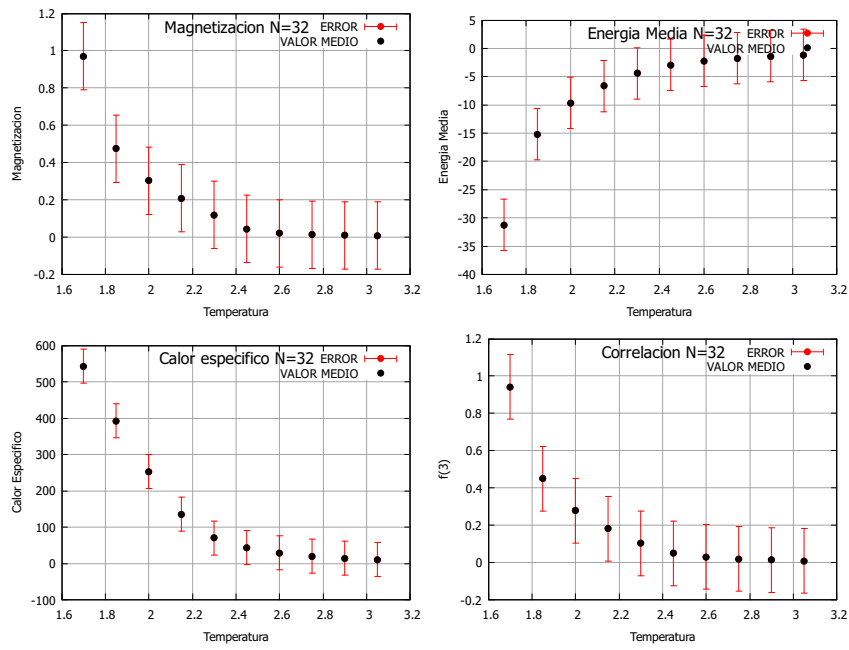


Figura 2: Gráficas de la evolución de los valores medios de la Magnetización, la Energía Media, el Calor Específico y la Correlación para aquellas partículas separadas 3 huecos de la red para un valor de $N=32$

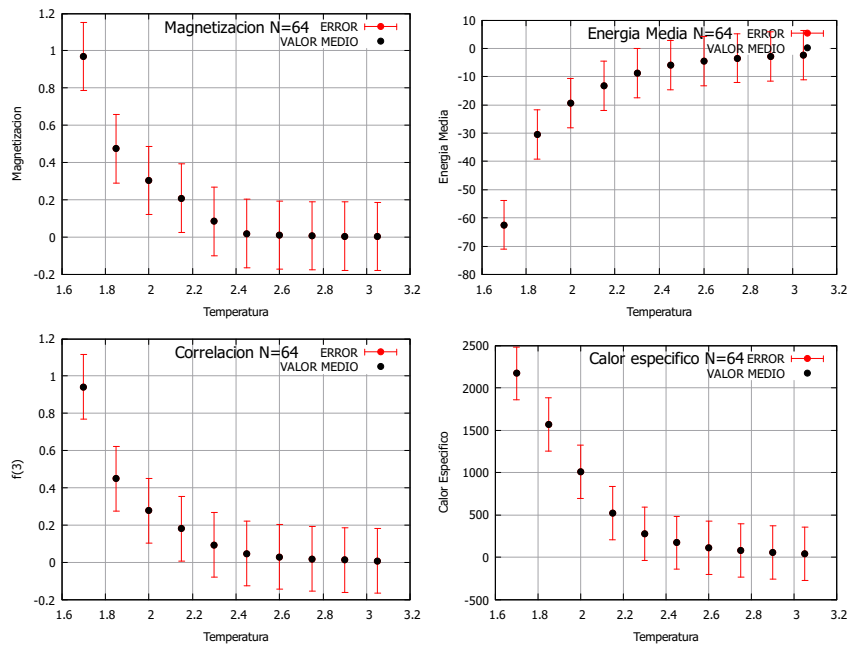


Figura 3: Gráficas de la evolución de los valores medios de la Magnetización, la Energía Media, el Calor Específico y la Correlación para aquellas partículas separadas 3 huecos de la retícula para un valor de $N=64$

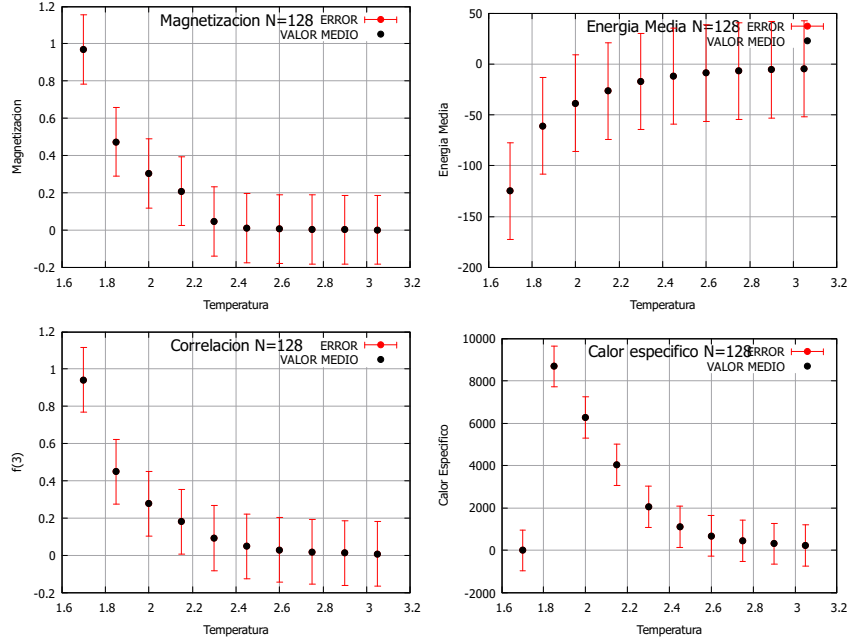


Figura 4: Gráficas de la evolución de los valores medios de la Magnetización, la Energía Media, el Calor Específico y la Correlación para aquellas partículas separadas 3 huecos de la retícula para un valor de $N=128$

Se puede apreciar en las figuras 1 a 4 que conforme aumenta el valor de N , el valor absoluto para la primera temperatura de la energía y el calor específico, esto es obvio, ya que al haber mas huecos en el retículo (mayor N) habrá por tanto más energía promedio. Además, debido a la falta de fluctuaciones térmicas, cuando la temperatura se encuentra en torno a 1.5 el calor específico toma un valor nulo.

4. Exponentes críticos y teoría de tamaño finito

Cuando un sistema se acerca al punto crítico, la magnetización tiende a cero de forma no lineal. El exponente crítico de la magnetización (β) describe cómo esta magnetización varía en relación con la distancia relativa a la temperatura crítica. En particular, la relación entre la magnetización y el incremento relativo de la temperatura se puede expresar de la siguiente manera:

$$M \propto (\Delta T)^\beta \quad (1)$$

donde M es la magnetización y $(\Delta T) = (T - T_c)/T_c$ es el incremento relativo

de la temperatura con respecto a la temperatura crítica.

Esta relación muestra que la magnetización sigue una dependencia potencial con respecto al incremento relativo de la temperatura, y el exponente crítico β determina la fuerza de esta dependencia.

El exponente crítico del calor específico (α) describe cómo el calor específico varía cerca del punto crítico. La relación entre el calor específico y el incremento relativo de la temperatura se puede expresar de la siguiente manera:

$$C \propto (\Delta T)^{-\alpha} \quad (2)$$

donde C es el calor específico y $(\Delta T) = (T - T_c)/T_c$ es el incremento relativo de la temperatura con respecto a la temperatura crítica.

Esta relación muestra que el calor específico tiene una dependencia potencial inversa con respecto al incremento relativo de la temperatura, y el exponente crítico α determina la fuerza de esta dependencia.

La teoría del tamaño finito se refiere al estudio del comportamiento de sistemas físicos de tamaño limitado, en contraste con sistemas de tamaño infinito. En los sistemas de tamaño finito, los efectos de los límites y la geometría del sistema pueden influir en las propiedades críticas. La teoría del tamaño finito permite extrapolar las propiedades de sistemas de tamaño finito a sistemas de tamaño infinito, lo que ayuda a comprender el comportamiento crítico en sistemas más grandes.

5. Estimación del punto crítico

En esta sección se procede a estimar el valor del punto crítico, para ello para cada valor de N se obtiene una estimación del máximo del calor específico, $T_C(N)$, y se estudia su comportamiento con N extrapolando para $N \rightarrow \infty$. En un principio se pretendía realizar un ajuste polinómico de los datos del calor específico. No obstante, conociendo el valor teórico de la temperatura del punto crítico mencionado en la sección anterior se observa cualitativamente que conforme aumenta N se va aproximando el valor del máximo del calor específico $T_C = 2,269J$. Esto tiene sentido pues, debido a los efectos de tamaño finito los valores críticos se pueden ver afectados. Por tanto, sólo tiene sentido considerar como valor experimental válido el obtenido para $N=128$ que es $T_C = 1,85J$. Este resultado presenta un error relativo del 18,5% con respecto al resultado exacto de Onsager lo cual teniendo en cuenta los errores asociados al algoritmo de Metrópoli, así como los efectos de tamaño finito es un resultado coherente.

6. Exponente crítico β de la magnetización

En el modelo de Ising en un retículo bidimensional el valor del exponente crítico de magnetización es $\beta = \frac{1}{8 \ln(1+\sqrt{2})} \simeq 0,142$. Teniendo en cuenta lo que

se obtuvo en la sección 4 y despejando β de los distintos valores medios para cada N se obtiene:

$$\beta_{16} = 0,322 \quad \beta_{32} = 0,245 \quad \beta_{64} = 0,202 \quad \beta_{128} = 0,167$$

Como se puede observar el que más se aproxima es el de N=128 lo cual es coherente debido a los factores que se comentaron en el apartado anterior.

7. Estudio de la función correlación con la temperatura y el tamaño del sistema

En la sección 3 se puede apreciar que la correlación no varía apenas con respecto al tamaño del sistema. En nuestro caso se considera una distancia entre partículas $i=3$ (3 espacios dentro de la retícula).

En el modelo de Ising bidimensional, la correlación y el tamaño del sistema están relacionados a través del exponente crítico de la longitud de correlación, denotado como ν .

La longitud de correlación, ξ , es una medida de la extensión espacial de las fluctuaciones correlacionadas en el sistema. Cuando el tamaño del sistema es mucho mayor que la longitud de correlación, las correlaciones son significativas solo a distancias cortas y se dice que el sistema está en la fase desordenada. Por otro lado, cuando el tamaño del sistema es comparable o mayor que la longitud de correlación, las correlaciones se extienden a través del sistema y se dice que el sistema está en la fase ordenada.

En el modelo de Ising bidimensional, cerca de la transición de fase, la longitud de correlación sigue una relación de escala:

$$\xi \propto L^{\nu}$$

donde ξ es la longitud de correlación, L es el tamaño lineal del sistema y ν es el exponente crítico de la longitud de correlación.

El exponente crítico ν caracteriza cómo el tamaño del sistema influye en la longitud de correlación cerca de la transición de fase. Un valor comúnmente aceptado para el exponente crítico ν en el modelo de Ising bidimensional es aproximadamente 1.

Es importante tener en cuenta que esta relación se basa en aproximaciones y modelos teóricos, y puede haber variaciones en la práctica y en sistemas reales debido a efectos finitos y otros factores.

Teniendo en cuenta esto, se ha realizado un ajuste polinómico de la correlación para N=128, adjunto en el repositorio de GitHub, donde con la relación anteriormente mencionada se tiene que:

$$L = 0,103 m \quad \nu = 5,5443$$

8. Conclusiones

Tras la realización de esta simulación se puede concluir que pese a los errores asociados al Algoritmo de Metrópoli, así como a los errores asociados a la 'calidad' de los números aleatorios generados se ha podido describir correctamente el comportamiento de las fases ferromagnéticas y paramagnéticas y se ha obtenido con un error no demasiado grande la temperatura del punto crítico, así como el exponente crítico de magnetización, analizándose además la correlación en función de la temperatura y el tamaño del sistema.

9. Apéndice: Cómo trabajar con el superordenador

En este apéndice se explica por qué usar el superordenador para este ejercicio y cómo se usa.

¿Por qué usar el superordenador para este ejercicio?

Se eligió trabajar con el superordenador en este programa ya que para $N=128$ el tiempo de ejecución con mi ordenador personal era de más de 72 horas y los resultados además salían peor ya que no tengo instalado gsl, cosa que en el superordenador sí. Se empleó la versión del código modificado para Joel usando gsl en vez de rand para generar números aleatorios (dicha versión también se encuentra en el repositorio del ejercicio que está referenciado).

Acceso al superordenador

Para acceder al servidor llamado "joel" se utiliza el comando ssh. Para hacerlo, simplemente escribimos en un terminal:

```
ssh usuario@joel.ugr.es
```

Será necesario ingresar nuestra contraseña para poder ingresar. Es posible que la primera vez aparezca un mensaje de autenticación. En ese caso, debemos escribir "yes" para aceptar que "joel" se añada a la lista de dominios conocidos. Una vez dentro, trabajaremos como si estuviéramos en una terminal de uno de los ordenadores del aula. No se tiene acceso al entorno gráfico del servidor, por lo tanto, todas las acciones se realizarán en modo de texto. Cuando hayamos terminado, debemos salir utilizando el comando "exit".

Cómo se transfieren los archivos

Para transferir archivos (y directorios) desde nuestro ordenador local al servidor, utilizaremos el comando "scp" de la siguiente manera:

```
scp fichero usuario@joel.ugr.es:~/directorio
```


Para transferir del servidor a nuestro ordenador, la sintaxis sería:

scp usuario@joel.ugr.es:~/directorio/fichero

De esta manera, el archivo se ubicaría en el directorio donde se ejecute el comando.

Ejecutar archivos

Podemos ejecutar programas localmente en joel, pero eso tiene el inconveniente de que los programas morirán cuando cerremos nuestra sesión. Para evitar esto debemos usar la orden "nohup" de esta manera: **nohup programa.exe &** Así, los programas se quedan ejecutando después de cerrar la sesión. Para ver los programas que se están ejecutando en el servidor podemos usar la orden "top".

El número que aparece a la izquierda (PID) es el número identificativo del proceso. Si queremos matar uno de los procesos que estamos corriendo lo haremos con la orden "kill -5" kill -5 PID.

Tener en cuenta que sólo se pueden ejecutar 5 programas a la vez por usuario ya que así ha sido limitado por los profesores.

Referencias

- [1] https://github.com/carlogarciapalomo/Voluntario1_ModeloDeIsing
- [2] Critical Phenomena in Natural Sciences. Didier Sornette.
- [3] <https://cplusplus.com/>