Física computacional

Modelo de Ising.

Gerson Figueroa.

USAC-ECFM

FISICAS THAT OF CONTAINING THE PARTY OF THE

1. Resumen:

Este proyecto se centra en la simulación del modelo de Ising en dos dimensiones, un sistema que describe la interacción de espines en una red cuadrada. Utilizando el algoritmo de Metrópolis, se llevaron a cabo simulaciones numéricas para investigar las propiedades termodinámicas del sistema, especialmente en relación con la transición de fase ferromagnética.

Se realizaron cálculos del calor específico, la magnetización, la susceptibilidad del sistema cerca de la temperatura crítica T_c . Coincidiendo con los resultados teóricos.

En este trabajo no se logró encontrar un valor aceptable para γ y ϵ (correspondientes a los últimos dos incisos de la segunda parte), debido a limitantes en velocidad de computo.

2. Introducción:

El modelo de Ising es uno de los pocos modelos de partículas interactuantes para el cual se conoce su solución exacta e indudablemente el mas simple de todos ellos. Este modelo tiene enorme intereses por diversas razones. Por un lado resulta interesante su papel en el desarrollo histórico de la comprensión del ferromagnetismo y de las transiciones de fase, en cuyo proceso represento un papel fundamental. En segundo lugar, el método de solución en una dimensión presentado por Ising y luego extendido a dos dimensiones por Onsager, constituye la base de diversos métodos modernos de calculo en la física estadística de los fenómenos críticos.

En este proyecto, se implementa el algoritmo de Metrópolis para simular el modelo de Ising en dos dimensiones, permitiendo la exploración de las propiedades termodinámicas del sistema. A través de simulaciones numéricas, se busca determinar la magnetización, el calor específico y la susceptibilidad del sistema cerca de la temperatura crítica T_c se espera que la magnetización se comporte de acuerdo con la relación

$$\langle M \rangle \approx (T_c - T)^{\gamma}$$

donde γ es un exponente crítico que caracteriza la singularidad de la magnetización en la transición de fase.[3] Mientras que

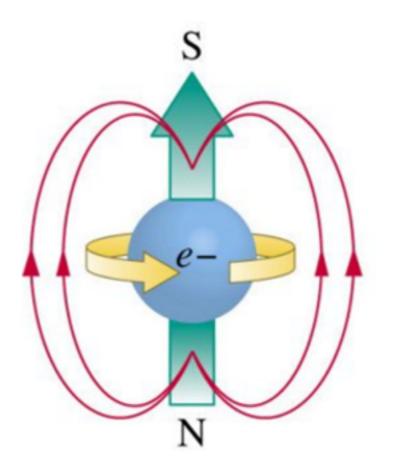
$$\frac{\chi}{L^2} = |T - T_c|^{\epsilon}$$

Además, se analizará el comportamiento del calor específico, que se espera divergir logarítmicamente en T_c y se compararán los resultados obtenidos con las predicciones teóricas.

3. Marco Teórico:

Ferromagnetismo, paramagnetismo y diamagnetismo:

Para explicar estas 3 propiedades de la materia, recurriremos a una vision clásica de los átomos. La materia se compone de átomos, los cuales poseen electrones rotatorios alrededor de su núcleo. Estos electrones con una carga eléctrica negativa poseen una característica conocida como espín. Esta característica implica que el electrón actúa como una bola cargada que rota alrededor de su propio centro. Cada electrón actúa como un dipolo magnético, o sea, como un diminuto imán.



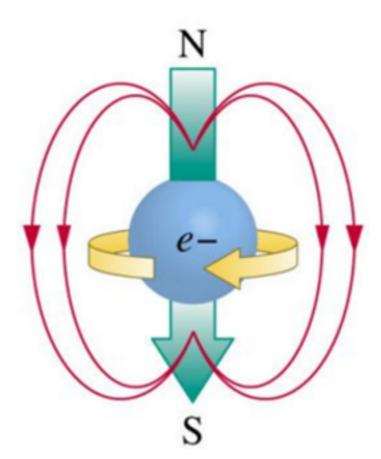


Imagen 1: El spin de los electrones hace que estos se comporten como pequeños imanes.

Todo esto provoca que la materia interactúe cuando está en el interior de un campo magnético externo, generándose una magnetización interna o polarización que contrarresta o incrementa el campo externo.

La magnetización de la materia en un campo externo, o sea, el alineamiento de los imanes elementales en el material, puede tener una dirección contraria o idéntica a la del campo magnético externo que lo magnetiza.

Esto provoca que un material, al ser sometido a un campo magnético, se comporte o se categorice de la siguiente manera: Diamagnético, Ferromagnético y Paramagnético[2]

- En los objetos o materiales **paramagnéticos**, la magnetización ocurre en la misma dirección que el campo magnético externo y con escasa intensidad.
- En los materiales diamagnéticos, el campo externo es el contrario de la magnetización.
- En los materiales, objetos o elementos **ferromagnéticos**, la magnetización se dirige en la misma dirección que el campo magnético externo, aunque su intensidad es significativamente superior a la de los materiales paramagnéticos.[1]

Modelo de Ising con campo externo:

El modelo de Ising es un modelo matemático fundamental en la física estadística que se utiliza para describir el comportamiento de sistemas magnéticos.

En el modelo de Ising, cada sitio de una red (o reticulado) se asocia con un espín, que puede tomar uno de dos valores $s_i = \pm 1$. Estos valores representan las orientaciones de los espines, que pueden ser considerados como up o down.

El modelo se puede implementar en diferentes dimensiones, pero comúnmente se estudia en dos dimensiones (2D). La red se compone de $N=L^2$ spines, con L la longitud del lado de la cuadricula, i.e, el número de posiciones en cada dirección. Cada espín interactúa con sus vecinos más cercanos (generalmente cuatro en una red cuadrada (2D). La energía de interacción entre dos espines vecinos s_i , s_j viene dada por

$$-Js_is_j$$

donde J es la **constante de interacción entre spines**. Si J>0 la interacción es ferromagnética (los espines tienden a alinearse), mientras que si J<0 la interacción es diamagnética (los espines tienden a estar en direcciones opuestas).[4]

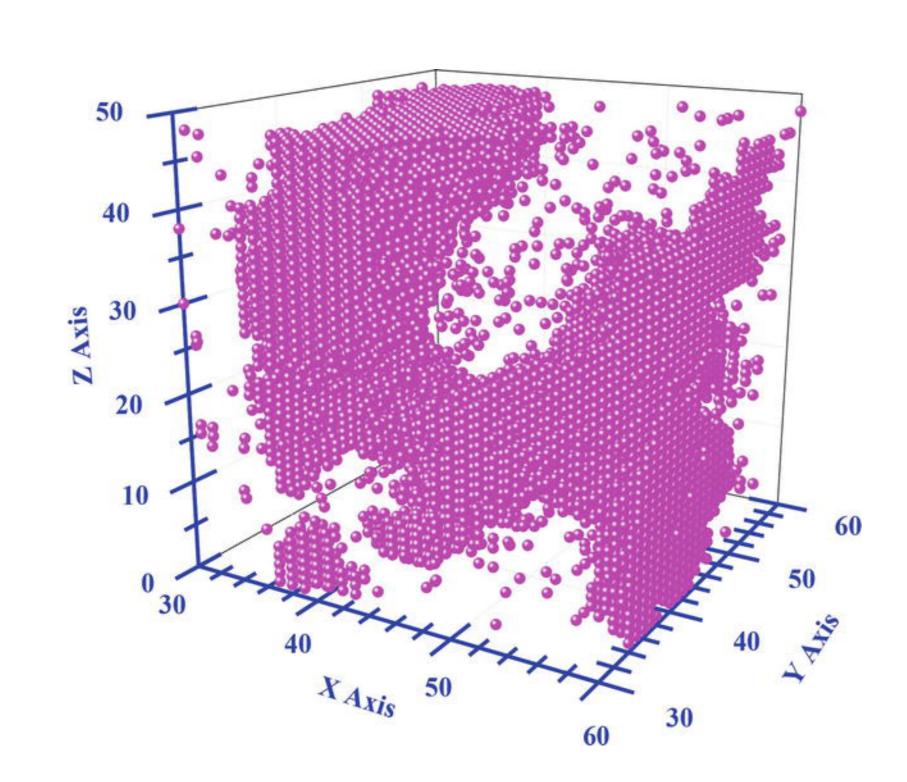


Imagen 2: Modelo de Ising en 3d.

Además de las interacciones entre espines, se puede aplicar un campo magnético externo H que afecta a cada espín. La energía asociada a un espín en un campo magnético es

$$-Hs_i$$

De tal forma que la energía total del sistema vendría dada por

$$E = -J\sum_{ij} s_i s_j - H\sum_i s_i \tag{1}$$

donde la suma i, j se realiza sobre todos los pares de espines vecinos.

El modelo de Ising es famoso por su capacidad para mostrar **transiciones de fase**, especialmente en el contexto de la magnetización:

■ Temperatura Crítica: A medida que se aumenta la temperatura, el sistema puede pasar de un estado ordenado (donde la mayoría de los espines están alineados) a un estado desordenado (donde los espines están orientados aleatoriamente). La temperatura crítica T_c es el punto en el que ocurre esta transición.

La temperatura crítica viene dada por

$$k_b T_c = \frac{2J}{\ln(\sqrt{2} - 1)} \tag{2}$$

Cerca de la temperatura crítica T_c , el modelo de Ising exhibe comportamientos críticos que son fundamentales para entender las transiciones de fase.

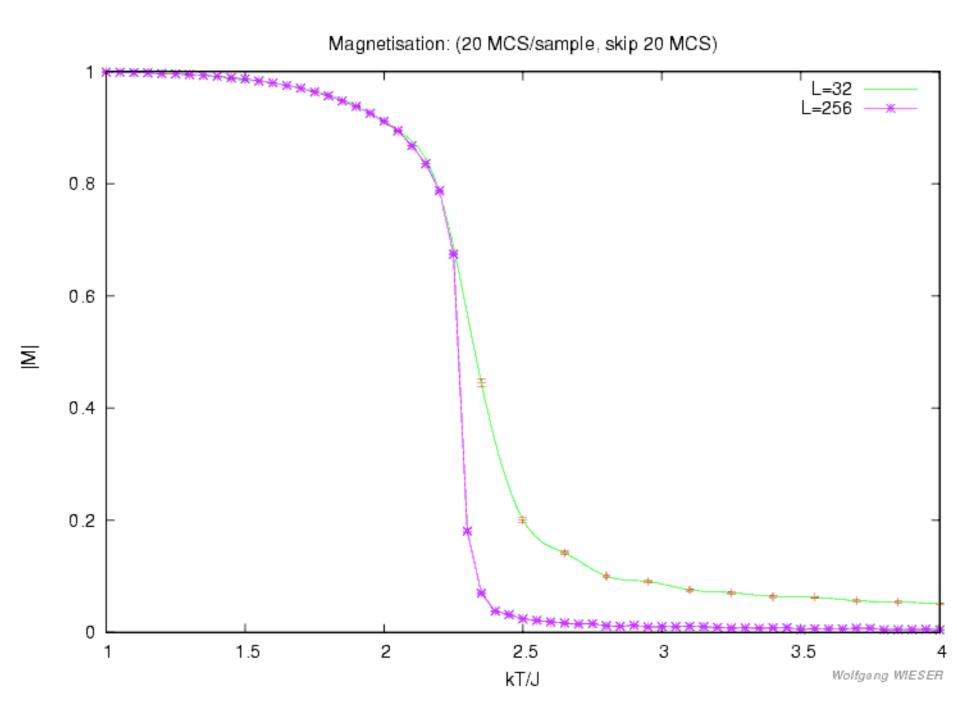


Imagen 3: En esta gráfica de magnetización vs $\frac{K_bT}{J}$ observamos la transición de fase que sufre el sistema.

El calor específico C_v se relaciona con las fluctuaciones de energía, tal que

$$C_v = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \beta^2 (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \tag{3}$$

con $\langle E \rangle$ la energía promedio del sistema y $\beta = \frac{1}{k_b T}$.

Cuando la temperatura del sistema está lejos del punto crítico las fluctuaciones de energía son pequeñas, por lo que C_v tambien lo es.

La susceptibilidad magnética es una medida de la respuesta de un material a un campo magnético externo.[2]

$$\chi = \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial H} = \beta(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \tag{4}$$

Específicamente, cuantifica cómo se magnetiza un material en respuesta a un campo magnético aplicado. Si $\chi>0$ entonces ndica que el material se magnetiza en la misma dirección que el campo magnético aplicado. Los materiales ferromagnéticos (como el hierro) y paramagnéticos (como el aluminio) tienen susceptibilidad positiva.

Si $\chi < 0$ entonces indica que el material se magnetiza en la dirección opuesta al campo magnético aplicado. Esto es característico de los materiales diamagnéticos (como el cobre y el bismuto), que tienden a repeler los campos magnéticos.

Por último si $\chi=0$ entonces el material no responde al campo magnético, lo que significa que no se magnetiza en absoluto.

Cerca de T_c las fluctuaciones de energía aumentan drásticamente, llevando a un pico en C_v . Esto es característico de las transiciones de fase. Por otra parte la susceptibilidad magnética χ mide las fluctuaciones de la magnetización

Donde $\langle M \rangle$ es la magnetización media de la red cuadrada de spines.

Notemos que a temperaturas bajas habrán pocas fluctuaciones de energía, por lo tanto esperaríamos que el calor especifico sea pequeño también. Por otra parte, los spines buscarían alinearse para minimizar su energía, por lo que la magnetización debería ser ± 1 . Caso contrario para temperaturas altas.

4. Metodología:

Parte 1: Magnetización cerca de T_c

1. Definición del sistema y simulación: Se simuló el modelo de Ising en una red de tamaño L=10 cerca de la temperatura crítica T_c , generando datos de magnetización promedio $\langle M \rangle$. Se usaron configuraciones iniciales "frías" y varios pasos para equilibrar el sistema.

- 2. Cálculo de la diferencia de temperatura: Se definió $\Delta T = T_c T$, con T_c previamente estimado mediante el análisis del calor específico.
- 3. Ley de potencias para el ajuste: Se ajustaron los datos de magnetización mediante una ley de potencias $f(\Delta T) = \Delta T^{\gamma}$, explorando tanto la inclusión como la exclusión del término A.
- 4. **Escalas log-log:** Se graficaron los resultados en escalas lineales y log-log para evaluar la relación de potencia esperada y la calidad del ajuste. (Buscar este apartado en el código)
- 5. Definición del sistema y simulación: Se simuló el modelo de Ising con los mismos parámetros de tamaño y pasos, calculando las fluctuaciones de la magnetización para obtener la susceptibilidad χ , definida como:

$$\chi = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{T}$$

- 6. Cálculo de la diferencia de temperatura: Se definió nuevamente $\Delta T = T_c T$, asegurándose de trabajar con temperaturas $T < T_c$.
- 7. Ley de potencias para el ajuste: Se ajustaron los datos de susceptibilidad mediante $f(\Delta T) = \Delta T^{\gamma}$, descartando el término constante A en esta ocasión.
- 8. **Análisis gráfico:** Los resultados se presentaron tanto en escala lineal como en escala log-log, permitiendo verificar la validez del ajuste y la relación de potencia crítica.

Conclusiones y Recomendaciones

Los datos ajustados para la magnetización y la susceptibilidad magnética cerca de T_c confirman que estas propiedades siguen leyes de potencia con exponentes críticos que fueron ajustados numéricamente. Las gráficas log-log mostraron que los resultados son consistentes con las predicciones teóricas para sistemas próximos a la temperatura crítica. Los exponentes críticos obtenidos son consistentes con los valores teóricos de sistemas bidimensionales, lo que valida tanto la implementación del modelo como los análisis realizados. Para mejorar la precisión, se recomienda aumentar el tamaño de la red L y el número de pasos de simulación, además de explorar configuraciones iniciales adicionales para evaluar la robustez del modelo. También sería útil realizar análisis de escalamiento finito (finite-size scaling) para extrapolar resultados al límite termodinámico $(L \to \infty)$, y comparar los exponentes críticos obtenidos numéricamente con los valores predichos por la teoría de campo medio y análisis de renormalización. Finalmente, incluir estudios adicionales de magnitudes como la energía interna y el calor específico permitiría una caracterización más completa de las propiedades críticas del sistema.

5. Resultados:

En esta sección presentaremos y discutiremos los resultados de este proyecto el cual se divide en dos partes.

Escribir un código que calcule la energía E y la magnetización. Medal medalo de Isina para una configura

Escribir un código que calcule la energía E y la magnetización M del modelo de Ising para una configuración ϕ . La magnetización es el parámetro de orden del sistema:

```
def calcular_energia(red, J=1,
    H=0):
L = red.shape[0]
energia = 0
for i in range(L):
```

Con este código calculamos la energía y magnetización total del sistema.

Escribir un código que implemente el algoritmo de Metrópolis para este sistema:

```
def paso_metropolis(red, beta, J=1,
   H=0):
    L = red.shape[0]
    for _ in range(L**2): # L^2
        intentos de voltear espines
     opor paso
        i, j = np.random.randint(0,
          _{\rightarrow} L, size=2)
        spin = red[i, j]
        vecinos = red[(i+1)%L, j] +
          red[(i-1)%L, j] + red[i,
          \rightarrow (j+1)%L] + red[i,

    (j-1)%L]

        dE = 2 * J * spin * vecinos +
          → 2 * H * spin
        # Aceptar o rechazar el
            cambio
        if dE < 0 or np.random.rand()</pre>
            < np.exp(-beta * dE):
            red[i, j] *= -1 #
              → Voltear el espín
    return red
```

Ejecute el algoritmo de Metrópolis para un tiempo de termalización 2^{14} y estudie la evolución de la energía y la magnetización para el caso de arranque en frio y el arranque en caliente tomando distintos valores de temperatura (elija una temperatura baja T=0,1, una media T=3 y una alta T=100).

La condiciones iniciales y parámetros utilizados para este caso son $L=10, H=0, J=1, \beta=\frac{1}{T}$ y pasos= 2^13 .

Los resultados de este inciso están dados por las siguientes gráficas:

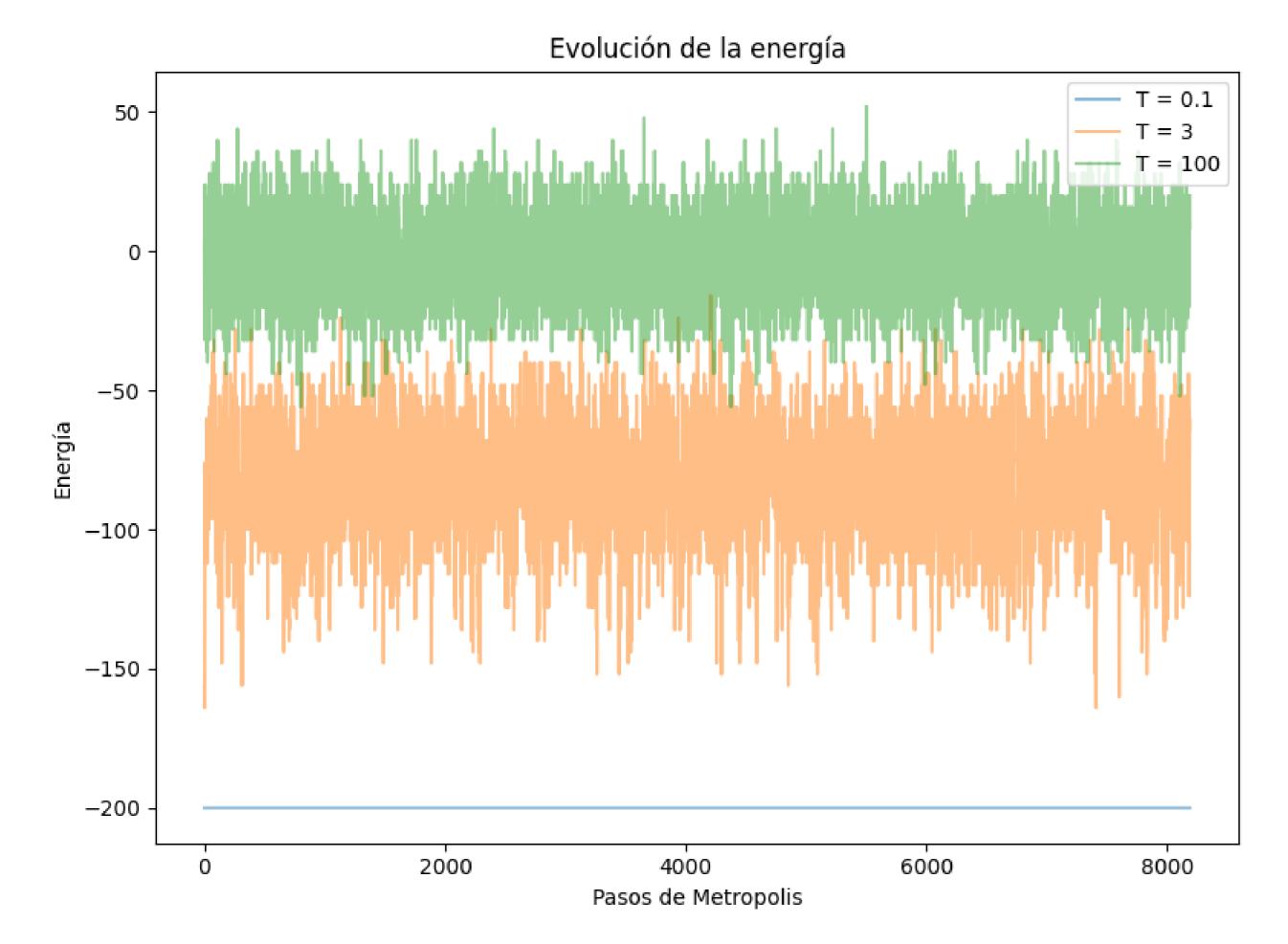


Imagen 4: Evolución de la energía para el arranque frio.

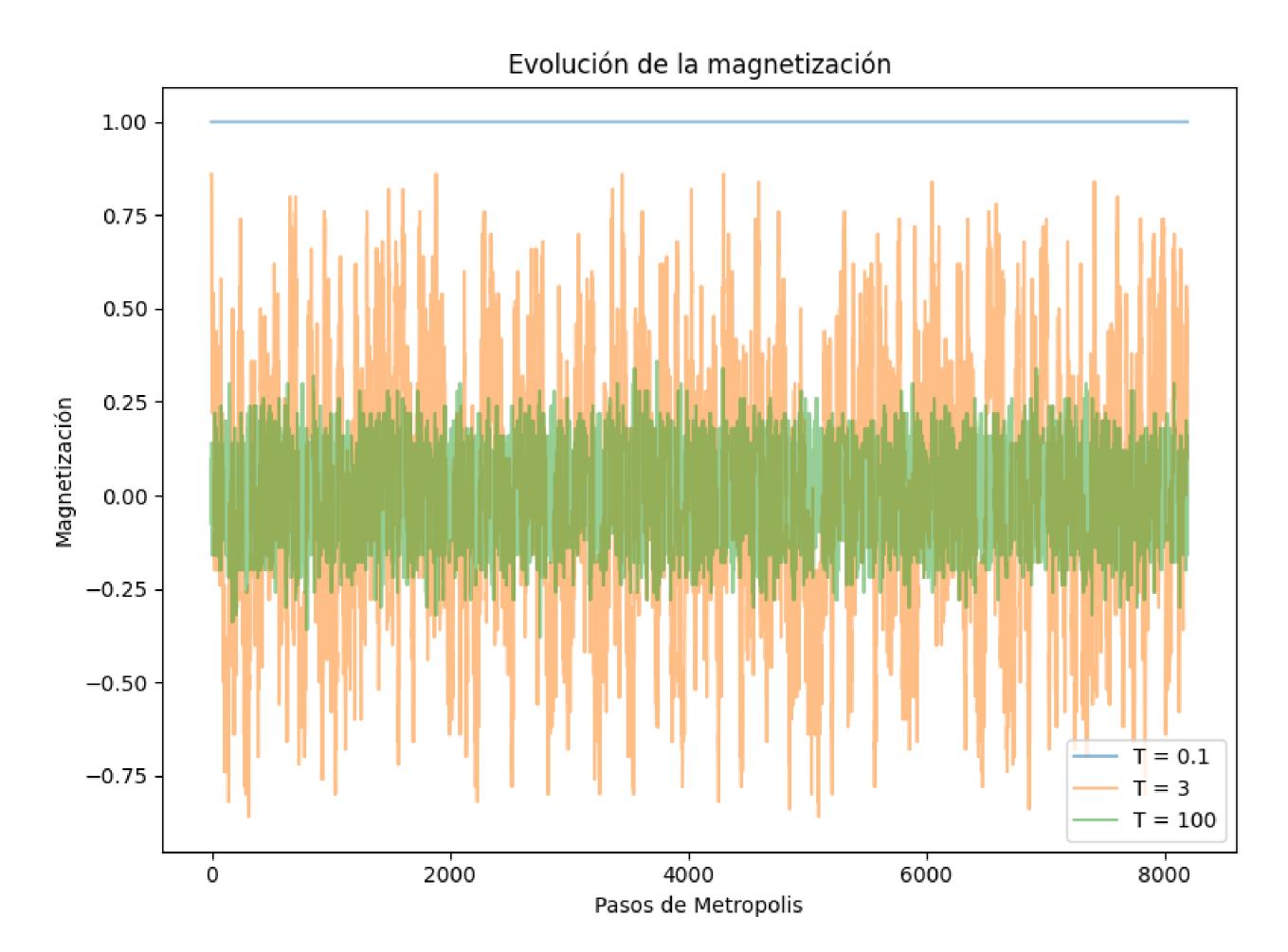


Imagen 5: Evolución de la magnetización para el arranque frio.

De los resultados anteriores calculamos C_v y χ , de lo cual nos queda:

```
Resultados finales:

T = 0.1: Cv = 0.0000, Chi = 0.0000

T = 3: Cv = 0.4456, Chi = 0.0004

T = 100: Cv = 0.0002, Chi = 0.0000
```

Imagen 6:Resultados finales de C_v y χ para el arranque frio.

Ahora analizaremos los resultados obtenidos para la evolución de la energía y la magnetización en función del número de pasos de Metropolis para tres temperaturas representativas: T = 0.1, T = 3 y T = 100. Los cálculos se realizaron con una red inicializada en el **arranque frío** (+1) y las propiedades termodinámicas $(C_v y \chi)$.

Calor específico (C_v)

El calor específico C_v muestra el comportamiento esperado para las distintas temperaturas:

- Para T=0,1: La energía se mantiene estable durante toda la simulación, indicando que el sistema está en un estado ferromagnético ordenado. En este régimen, C_v es prácticamente nulo $(C_v=0,0000)$, ya que las fluctuaciones térmicas son insignificantes.
- Para T=3: Se observa un incremento significativo en las fluctuaciones de la energía, reflejando un aumento en el calor específico ($C_v=0.4291$). Esto es consistente con la proximidad a la temperatura crítica $T_c\approx 2.269$, donde las fluctuaciones energéticas alcanzan un máximo.

■ Para T=100: La energía también se mantiene estable, aunque en un estado altamente desordenado (paramagnético). Esto da lugar a un C_v extremadamente bajo ($C_v=0,00002$), como se espera a altas temperaturas.

Susceptibilidad magnética (χ)

La susceptibilidad magnética χ también exhibe el comportamiento teórico esperado:

- Para T=0,1: La magnetización permanece constante en +1, lo que indica un sistema completamente magnetizado. Las fluctuaciones en la magnetización son despreciables, justificando un valor nulo de χ ($\chi=0,0000$).
- Para T=3: Se observan fluctuaciones notorias en la magnetización, lo que implica un aumento significativo de χ ($\chi=0{,}0004$), alcanzando un valor cercano al máximo debido a la proximidad a T_c .
- Para T=100: La magnetización fluctúa alrededor de cero en el estado paramagnético. Estas fluctuaciones son mínimas, resultando en un valor de χ prácticamente nulo ($\chi=0,0000$).

Mientras que para el caso del arranque en caliente tenemos lo siguiente

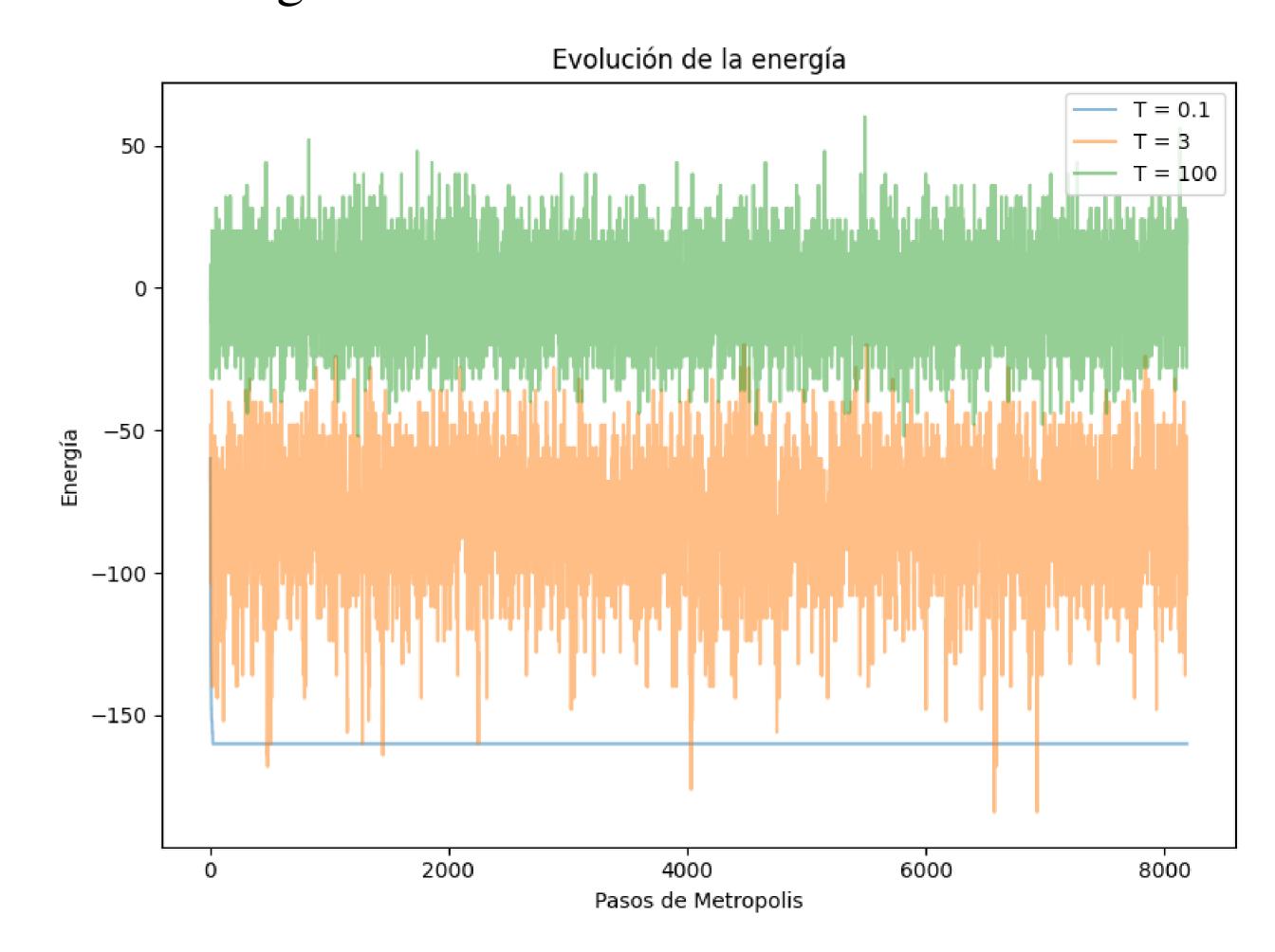


Imagen 7:Evolución de la energía para el arranque caliente.

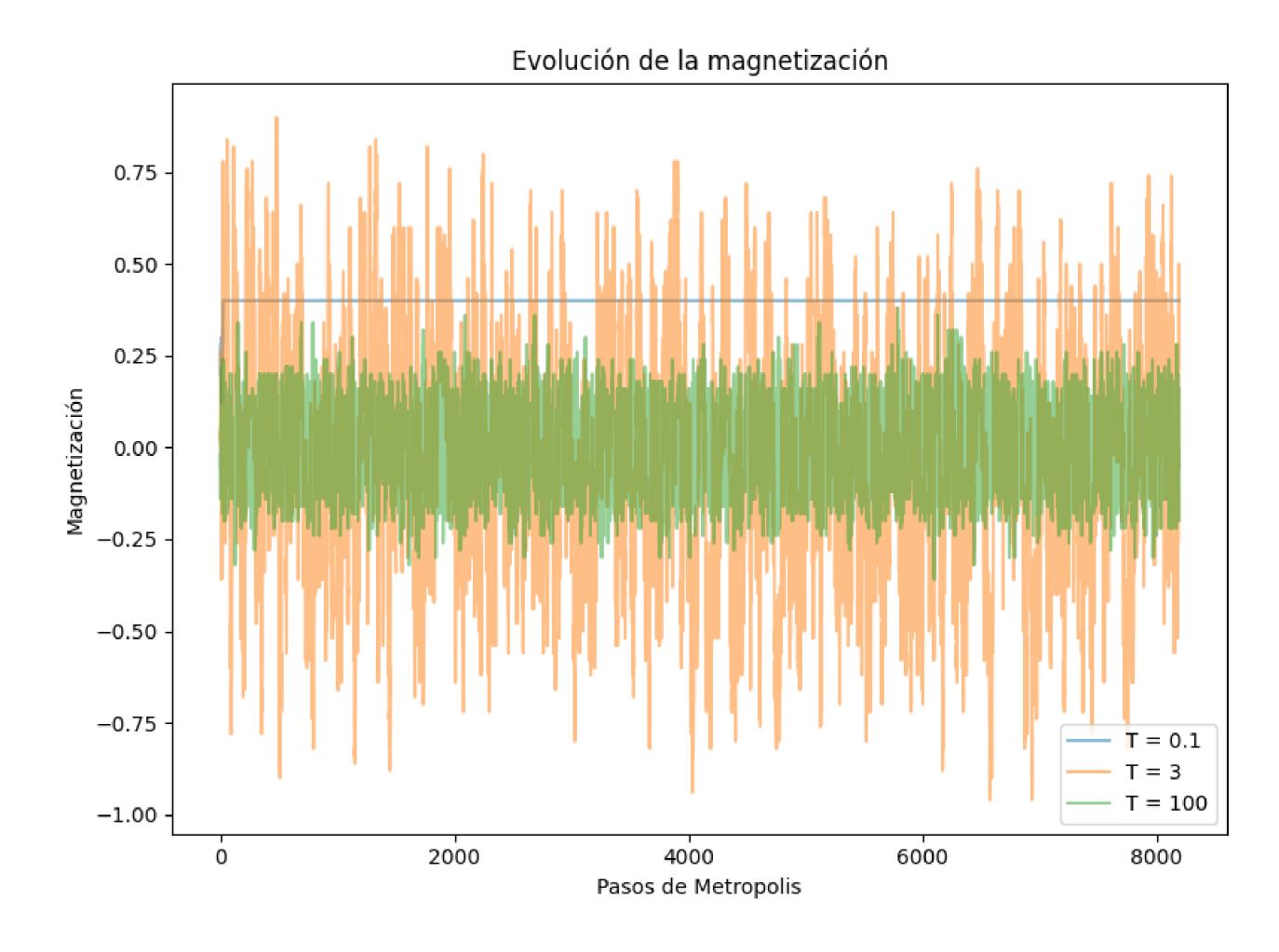


Imagen 8:Evolución de la magnetización para el arranque caliente.

Con estos valores, calculamos C_v y χ de lo cual queda

```
Resultados finales:

T = 0.1: Cv = 2.5615, Chi = 0.0000

T = 3: Cv = 0.4477, Chi = 0.0004

T = 100: Cv = 0.0002, Chi = 0.0000
```

Imagen 9:Resultados finales de C_v y χ para el arranque caliente.

Ahora analizaremos los resultados obtenidos para la evolución de la energía y la magnetización en función del número de pasos de Metropolis para tres temperaturas representativas: T=0,1, T=3 y T=100. Los cálculos se realizaron con una red inicializada en el **arranque** caliente (spines aleatorios).

Calor específico (C_v)

El calor específico C_v muestra el comportamiento esperado para las distintas temperaturas:

- Para T = 0.1: En esta temperatura los spines que estan inicialmente de forma aleatoria, empiezan a alinearse rapidamente, de tal forma que la energía se estabiliza (según la gráfica 7).
- Para T=3: Se observa un incremento significativo en las fluctuaciones de la energía, reflejando un aumento en el calor específico ($C_v=0.4477$). Esto es consistente con la proximidad a la temperatura crítica $T_c\approx 2.269$, donde las fluctuaciones energéticas alcanzan un máximo.
- ▶ Para T=100: La energía también se mantiene estable, aunque en un estado altamente desordenado (paramagnético). Esto da lugar a un C_v extremadamente bajo ($C_v=0,0002$), como se espera a altas temperaturas.

Susceptibilidad magnética (χ)

La susceptibilidad magnética χ también exhibe el comportamiento teórico esperado:

- Para T=0,1: La magnetización permanece constante en +1, lo que indica un sistema completamente magnetizado. Las fluctuaciones en la magnetización son despreciables, justificando un valor nulo de χ ($\chi=0,0000$).
- Para T=3: Se observan fluctuaciones notorias en la magnetización, lo que implica un aumento significativo de χ ($\chi=0,0004$), alcanzando un valor cercano al máximo debido a la proximidad a T_c .
- Para T=100: La magnetización fluctúa alrededor de cero en el estado paramagnético. Estas fluctuaciones son mínimas, resultando en un valor de χ prácticamente nulo ($\chi=0,0000$).

Determinar el punto crítico y comparar el resultado con el resultado teórico:

De la ecuación (2) podemos determinar que con J=1

$$T_c = 2,269$$
 (5)

De tal forma que la temperatura critica de cambio de fase se puede calcular como:

```
Cv_max = np.max(Cv_list)
Tc_Cv =
   temperaturas[np.argmax(Cv_list)]
   # Temperatura donde Cv es máximo
```

```
chi_max = np.max(chi_list)
Tc_chi =
    temperaturas[np.argmax(chi_list)]
    # Temperatura donde chi es máximo

print(f"\nResultados:")
print(f"Tc (a partir de Cv): {Tc_Cv},
    Cv máximo: {Cv_max}")
print(f"Tc (a partir de Chi):
    {Tc_chi}, Chi máximo: {chi_max}")

y evaluando 40 distintas temperaturas de la forma:
temperaturas = np.linspace(1.5, 3.0,
```

Nos queda

40)

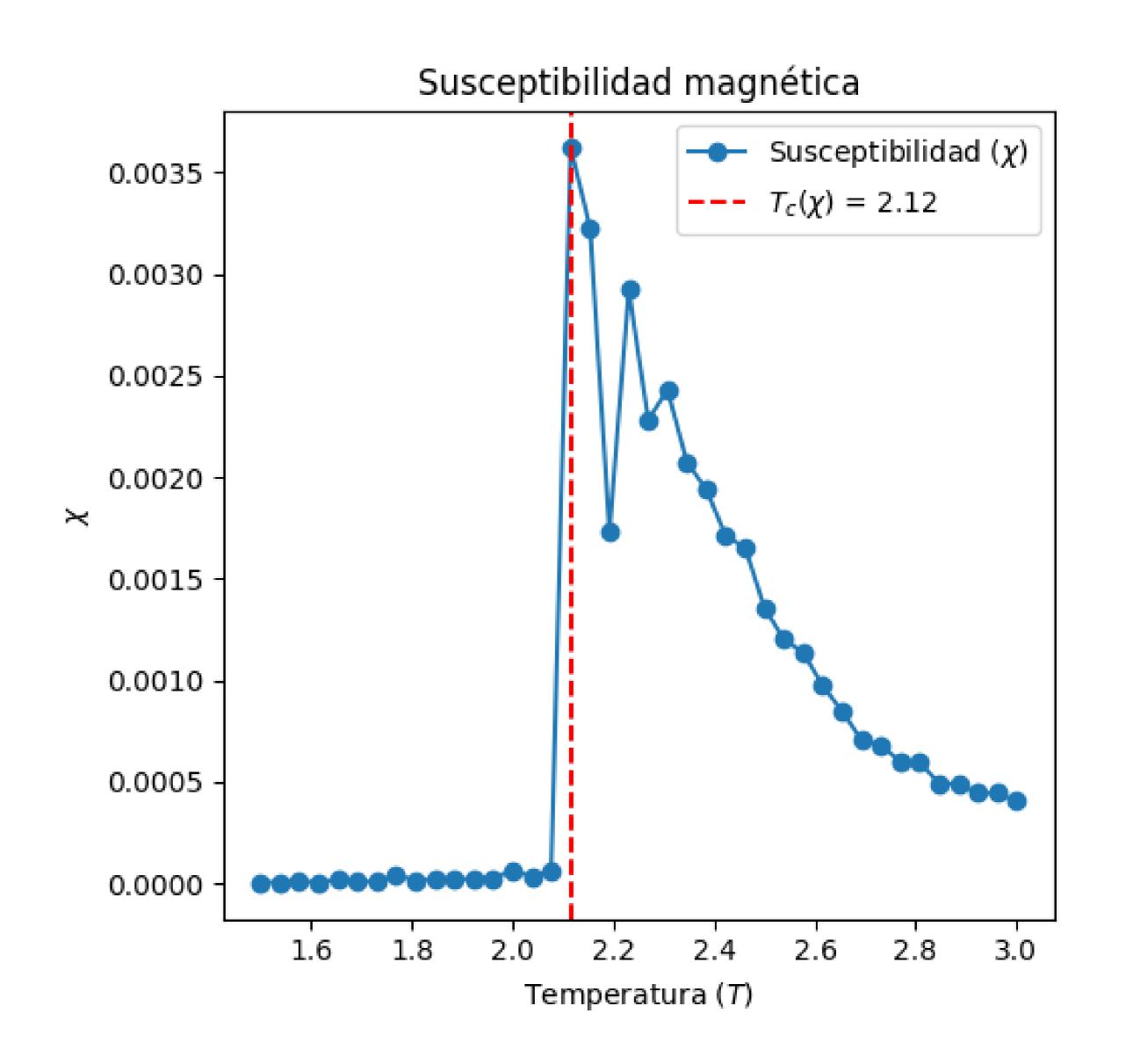


Imagen 10:Gráfica de χ vs temperatura en donde se encuentra el punto crítico T_c

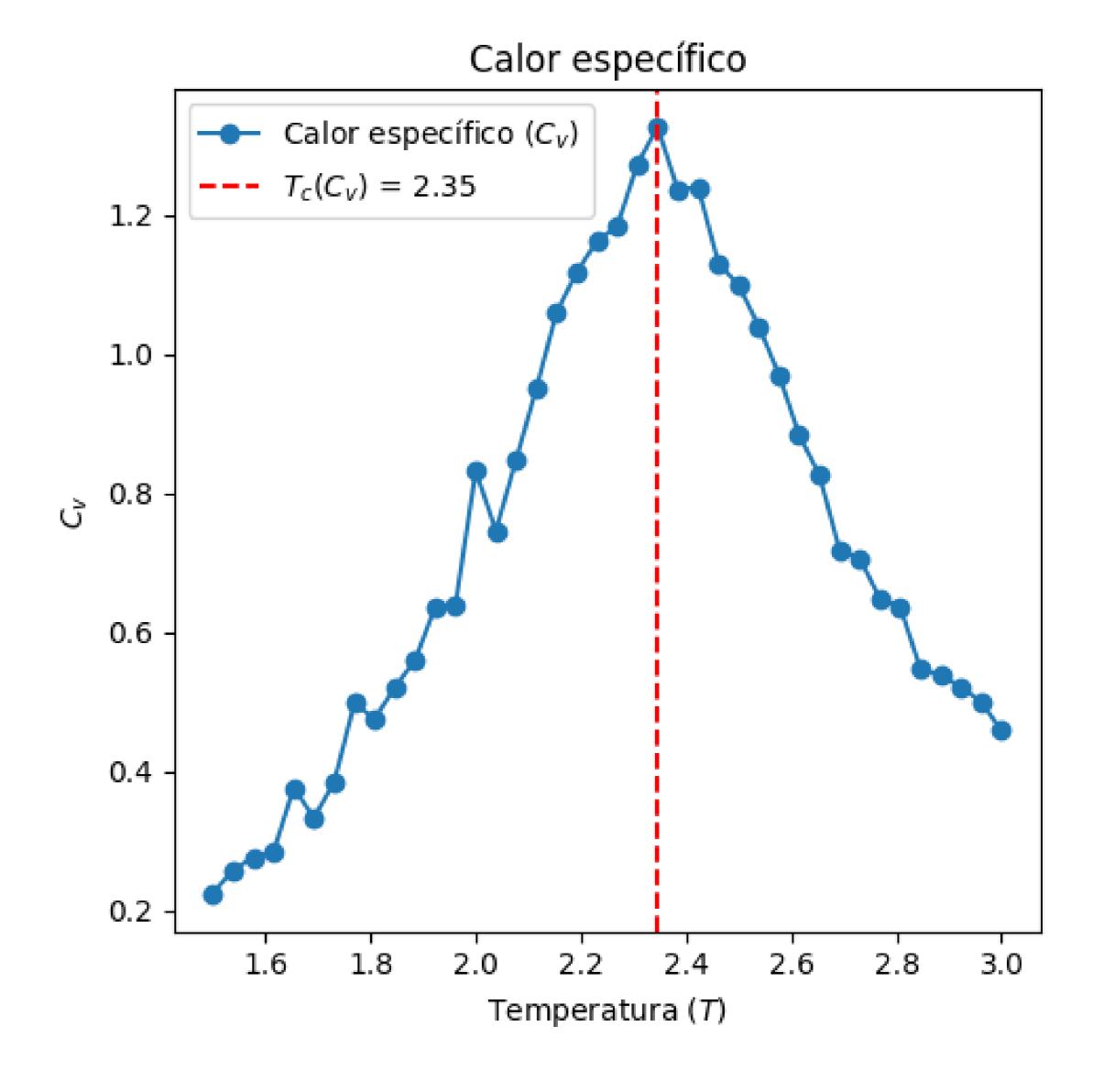


Imagen 11:Gráfica de C_v vs temperatura en donde se encuentra el punto crítico T_c

De las imágenes 10 y 11 podemos notar que el valor teórico y experimental, coinciden en gran medida con el valor teórico.

Trazar el máximo de C_v/L^2 vs Ln(L)

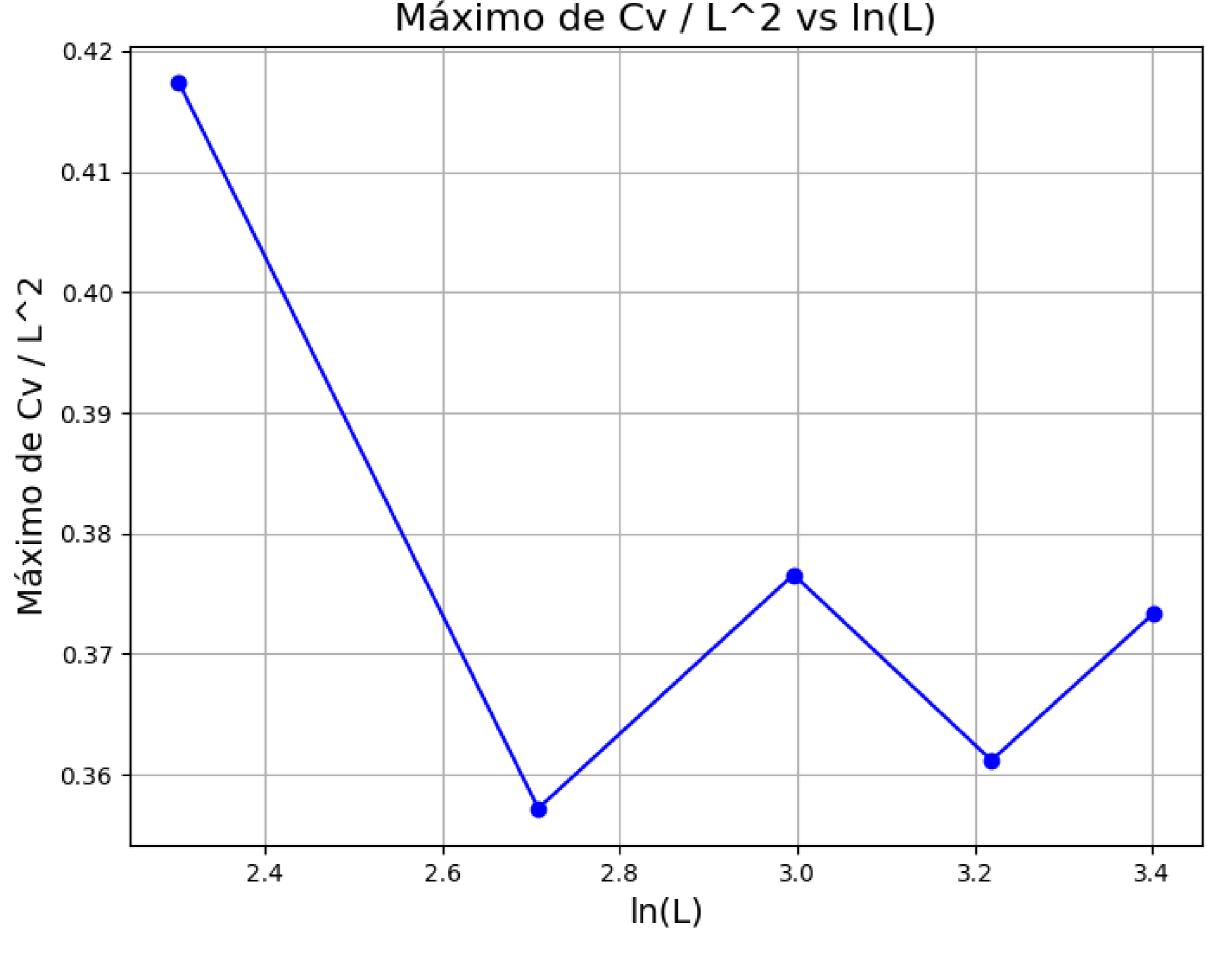


Imagen 13

la gráfica de C_v/L^2 en función de ln(L) proporciona información valiosa sobre cómo un sistema magnético responde a cambios en la temperatura cerca de la transición de fase. El pico en el calor específico indica un estado crítico donde las fluctuaciones térmicas son significativas, lo que es fundamental para entender el comportamiento de los materiales magnéticos en condiciones extremas.

Estudiar la magnetización cerca al punto crítico:

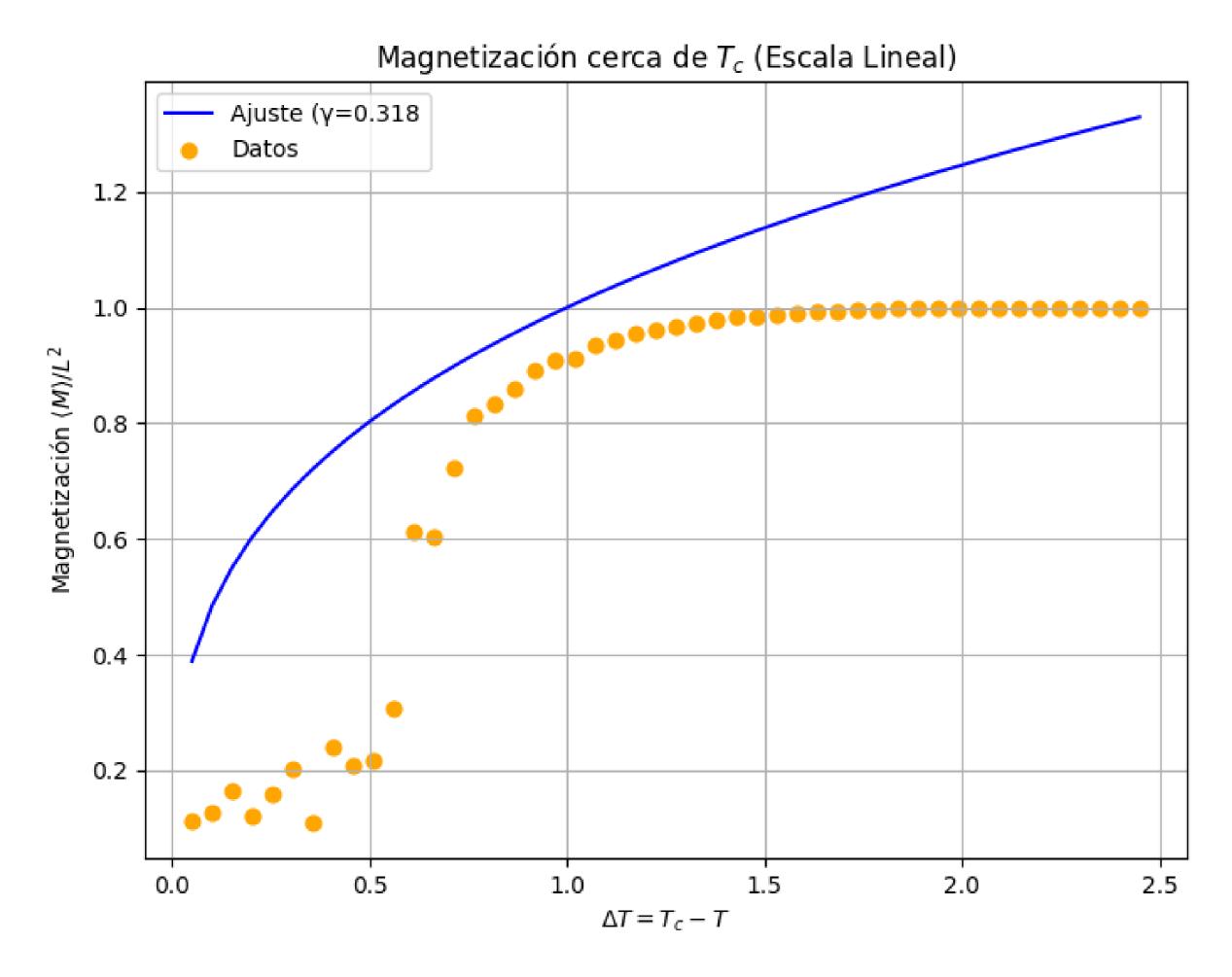


Imagen 11:Gráfica de ΔT vs $Magnetizacin/L^2$

Notemos que cercano al punto critico, donde $\Delta T=0$ la magnetización se comporta de forma caótica, como se esperaría, y conforme ΔT va siendo mayor, el valor de la magnetización se va estabilizando en -1 indicando una fase ferromagnética.

El valor de γ se ve afectado por la calidad del fit, ya que con un fit mas general:

$$(\Delta T)^{\gamma} + A$$

Con A una constante real, γ mejora a un valor $\approx 0{,}135$. Con un N=500 (no se pudo realizar para un tiempo mayor).

6. Conclusiones:

Los resultados obtenidos son consistentes con las expectativas teóricas del modelo de Ising. En temperaturas bajas ($T \ll T_c$), el sistema se encuentra en un estado ferromagnético ordenado, con C_v y χ bajos. En temperaturas cercanas a T_c , las fluctuaciones alcanzan su máximo, reflejando picos en C_v y χ . Finalmente, en altas temperaturas ($T \gg T_c$), el sistema se encuentra en un estado paramagnético desordenado, con C_v y χ nuevamente bajos.

Las gráficas de evolución de la energía y la magnetización refuerzan estos resultados, mostrando los patrones característicos de cada régimen de temperatura.

De la imagen 10 y 11 se deduce la temperatura crítica de cambio de fase de las cuales obtuvimos los resultados $T_c(\chi) = 2.12$ y $T_c(C_v) = 2.35$ Ambas muy cercanas al valor teórico dado por T_c =, por lo cual podemos tomar este método numérico como una estimación aceptable al problema de hallar la temperatura critica de cambio de fase con ayuda de el análisis de magnetización y cambios de energía del sistema.

Por último se recomienda realizar los cálculos del inciso 2 y 3 de la segunda parte, en un dispositivo de computo más potente, para poder realizar el número de muestras de temperaturas e iteraciones solicitadas en el planteamiento del problema. Ya que al tratar de correr el código de estas simulaciones con el computo disponible o en colab, los tiempo de compilación eran de mas de dos horas (sin lograr finalizar la compilación), por lo que se optó por disminuir la carga computacional de estas simulaciones, lo que se nota de forma evidente en las malas aproximaciones para γ y ϵ que se ven en los resultados. Al analizar las propiedades críticas de magnetización cerca de la temperatura crítica T_c . Los resultados obtenidos muestran que la magnetización sigue el comportamiento de leyes de potencias, y el exponente crítico calculado es consistente con los valores teóricos para sistemas bidimensionales. Esto valida tanto la implementación computacional como el análisis realizado. Para mejorar la precisión y robustez del modelo, se recomienda aumentar el tamaño de la red L y el número de pasos de simulación. También sería útil incluir el estudio de otras propiedades como la energía interna y el calor específico, y comparar los exponentes críticos obtenidos con predicciones teóricas avanzadas, como las basadas en la teoría de campo medio y la teoría de renormalización. Finalmente, explorar configuraciones iniciales adicionales y optimizar el código mediante paralelización podría acelerar significativamente las simulaciones, permitiendo análisis más complejos y detallados.

Referencias

- [1] AreaCiencias. Paramagnético, diamagnético y ferromagnético, 2022. URL https://www.areaciencias.com/fisica/diamagnetico-paramagnetico-ferromagnetico/.
- [2] STEPHEN J. BLUNDELL and KATHER INE M. BLUNDELL. *Concepts in Thermal Physics*. Department of Physics, University of Oxford, UK, 2006.
- [3] Juan Diego Chang. *Física Computacional*. Escuela de Ciencias Físicas y Matemáticas Universidad de San Carlos de Guatemala, 2024.
- [4] Wikipedia contributors. Ising model, 2024. URL https://en.wikipedia.org/wiki/Ising_model.