

Actividad Libre 2

Israel Salinas Hernández

Fundamento Teórico

Problema Propuesto: Simulación del modelo de Ising en 2D con el método de MonteCarlo

El modelo de Ising describe el comportamiento de materiales ferromagnéticos, en este caso tomaremos el caso en dos dimensiones con un arreglo de $N \times N$ partículas. Cada partícula puede tener spin 1 o -1. Ising propone que para calcular la interacción de una partícula con las demás, podemos hacer la aproximación a primeros vecinos, es decir, tomar la interacción de una partícula con las partículas que están al lado suyo. Para esto propone un hamiltoniano de la forma:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \quad (1)$$

Donde J es la constante de acomplamiento, que en este caso, tomaremos igual a 1 y S es el valor de spin que puede tomar las partículas. La magnetización en este sistema será calculada como la suma de todos los valores S correspondientes a cada una de las partículas.

Tenemos dada ya la energía dada por la ecuación (1), por lo que podemos calcular cambios en la energía si cambiamos el valor del spin en alguna de las partículas, pero dado que nuestro sistema es finito, las partículas en los extremos interactúan con menos partículas en comparación de una partícula que esté en el centro de nuestro arreglo, por lo que hay que imponer condiciones de frontera. Las condiciones de frontera que se usarán para esta simulación serán del tipo periódicas, es decir que se repetirá el arreglo una vez que este termina, por lo que la última partícula de una línea interactuará con la partícula anterior y con la primera partícula de su línea, y de misma manera para las columnas, de esta forma interactuará con el mismo número de partículas que otra partícula en el arreglo.

Una vez teniendo como calcular los cambios de energía con sus respectivas condiciones de frontera, podemos implementar el método de Metropolis. Las simulaciones por el método de MonteCarlo nos dará aleatoriamente, a partir de una configuración inicial, una nueva configuración y así sucesivamente hasta que después de muchos pasos, lleguemos a una configuración final, pero sabemos que físicamente, algunas de estas configuraciones son muy poco probables, por lo que no podemos garantizar que los resultados que midamos a partir de las últimas

configuraciones sean físicamente correctos, para evitar eso implementamos el método de Metropolis, el cual nos garantiza que nuestras configuraciones finales son altamente probables y por lo tanto nuestras mediciones serán cercanas a las obtenidas en experimentos.

El método de metropolis calcula la nueva energía para una nueva configuración de nuestro sistema y la compara con la energía del estado anterior tal que:

$$W(S'_{ij}) = \frac{\exp(-\beta E(S'_{ij}))}{\exp(-\beta E(S_{ij}))} \quad (2)$$

Donde S'_{ij} indica el nuevo estado, S_{ij} el estado anterior y $\beta = 1/KT$ con K la constante de Boltzmann y T la temperatura de nuestro sistema. La expresión 2 puede ser simplificada si tomamos que la energía es $E_{total} = E_{total} + E_{cambio}$, por lo que si tomamos que la energía del estado primado es la energía final y la energía del estado no primado es la energía inicial, obtenemos:

$$W(S'_{ij}) = \exp\{-\beta(E_{final} - E_{inicial})\} = \exp(-\beta\Delta E) \quad (3)$$

El método de metropolis nos dice que a la cantidad W dada por 3 la comparemos con un número aleatorio entre 0 y 1 y si nuestro valor W es mayor que el número aleatorio dado, entonces aceptamos este nuevo estado, entonces, suponiendo que nuestro generador de números aleatorios es verdaderamente aleatorio, nuestro nuevo estado será escogido al azar. Si nos figamos en 3 cuando el cambio de energía sea 0, entonces nuestro valor de W sera 1, cualquier número aleatorio que generemos, estara por debajo de este valor, por lo que nuestro nuevo estado será aceptado siempre, sin embargo si el cambio en la energía es bastante grande, nuestro valor W será cada vez mas pequeño, sin contar por el momento el factor β , por lo que cualquier número aleatorio que demos será mayor que nuestro valor W por lo que la nueva configuración será rechazada y la configuración anterior permanecerá. Ahora, si tomamos en cuenta solamente el factor β tenemos que entre menor sea la temperatura, β será mayor, por lo que el valor de W será menor, por lo que a baja temperaturas los pasos que serán aceptados serán muy pocos, mientras que si la temperatura es muy lata, entonces el valor de β será menor, por lo que el valor de W será cercano a 1, por lo que a temperaturas altas el número de configuraciones aceptadas será mayor que a temperaturas bajas.

Una vez que se termina el criterio de metropolis, se vuelve a iniciar buscando una nueva configuración. Este ciclo se hace tantas veces como sea necesario hasta alcanzar un estado de equilibrio, es decir, donde la energía de nuestro sistema ya no cambie, una vez alcanzado este estado, podemos calcular, en este caso, la magnetización de nuestro sistema y compararla con datos teóricos.

Descripción del código

Definimos un arreglo de 25 partículas por cada lado, por lo que, al estar en 2D, serán 625 partículas. Iniciamos todas con el mismo valor de spin, 1 y se

calcula la energía y magnetización inicial. Escogemos una partícula al azar con coordenadas (i,j) y cambiamos su valor de spin, una vez hecho esto calculamos la energía con el nuevo valor de spin y también calculamos la energía con su anterior valor de spin, calculamos la diferencia de energía y usamos el criterio de metropolis. Para asegurar que nuestras mediciones sean correctas, dejamos que el programa corra 1000000 de ciclos antes de empezar a tomar valores para la energía y la magnetización. Dado que hacemos 1.5M de ciclos, a partir del 1M empezamos a tomar mediciones, las cuales promediamos entre 0.5M ciclos y también entre el número total de partículas, quedandonos el promedio de la magnetización por partícula y la energía por partícula.

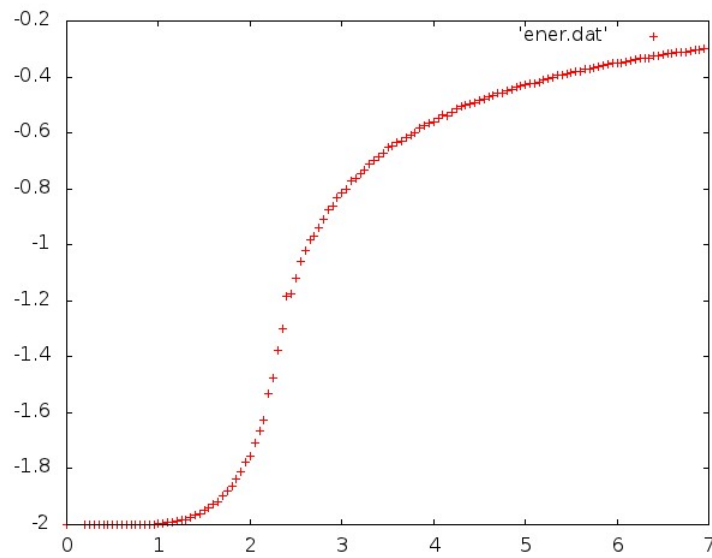


Figure 1: Energía por partícula

En la figura (1) vemos que la energía, con respecto a la temperatura, se obtiene menos energía a mayores temperaturas, mientras que a menores temperaturas se obtienen mayores energías. En la figura (2) se observa que efectivamente, la curva para la magnetización concuerda con los resultados teóricos, donde se da la caída de la magnetización en la temperatura crítica, que es alrededor de 2.5.

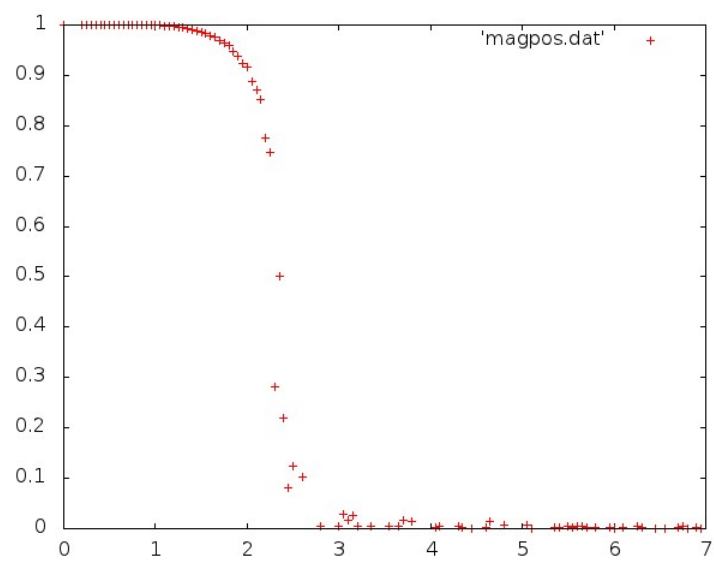


Figure 2: Magnetización por partícula