Física Computacional 2026-1, Profesores: Pedro Porras, Ossmar Díaz

Modelo de Ising usando método montecarlo

Iván Morales Flores, Íñigo Casanova Díaz

MÉTODO METRÓPOLIS (MONTECARLO)

Promedio de una observable a temperatura T

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_s A(s) e^{-H(s)/k_b T}$$

Ecuación de balance detallado

$$w(X)T(X \to Y) = w(Y)T(Y \to X)$$

Probabilidad de aceptar movimiento

$$\min[1, w(Y)/w(X)]$$

MODELO DE ISING

Energía de un espín. (Para una red cuadrada con condiciones cíclicas)

$$E_{ij} = -J\, s_{ij} \left(s_{\,(i-1) \bmod L,\, j} + s_{\,(i+1) \bmod L,\, j} + s_{\,i,\,(j-1) \bmod L} + s_{\,i,\,(j+1) \bmod L} \right)$$

Energía de la red

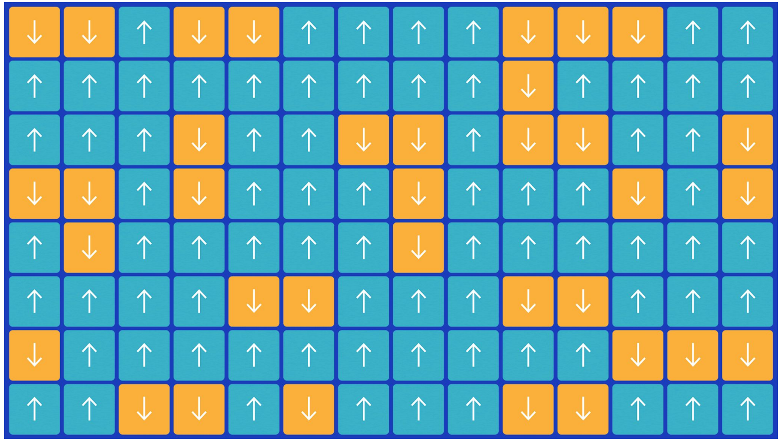
$$H(s) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j,$$

Magnetización de la red

$$M_{\text{total}} = \sum_{i,j} s_{ij}$$

Capacidad calorífica

$$C = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{(\Delta E)^2}{k_b T} = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_b T^2}$$

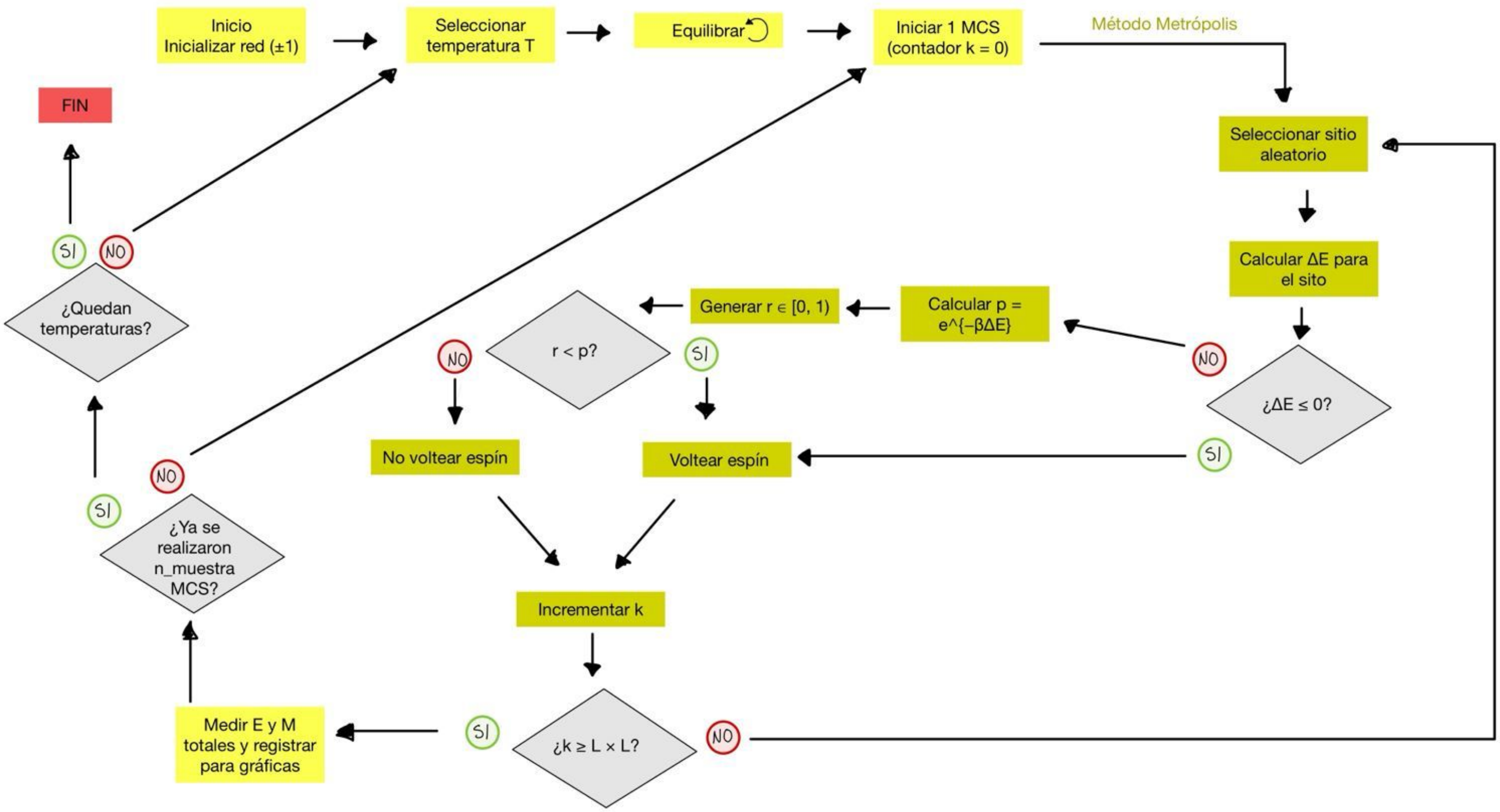


OBJETIVOS

Para una red de ising en estado de equilibrio, visualizar el comportamiento mediante gráficas de:

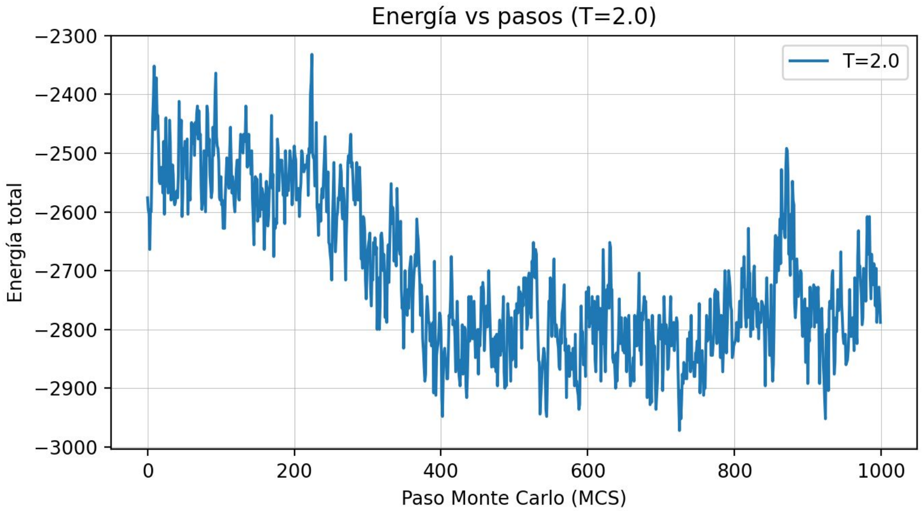
- La magnetización con respecto a la cantidad de MCS (Monte Carlo Steps)
- La energía del sistema con respecto a la cantidad de MCS
- La magnetización total y calor específico con respecto a valores de temperatura del baño térmico.
- Calor específico del sistema con respecto a valores de temperatura del baño térmico

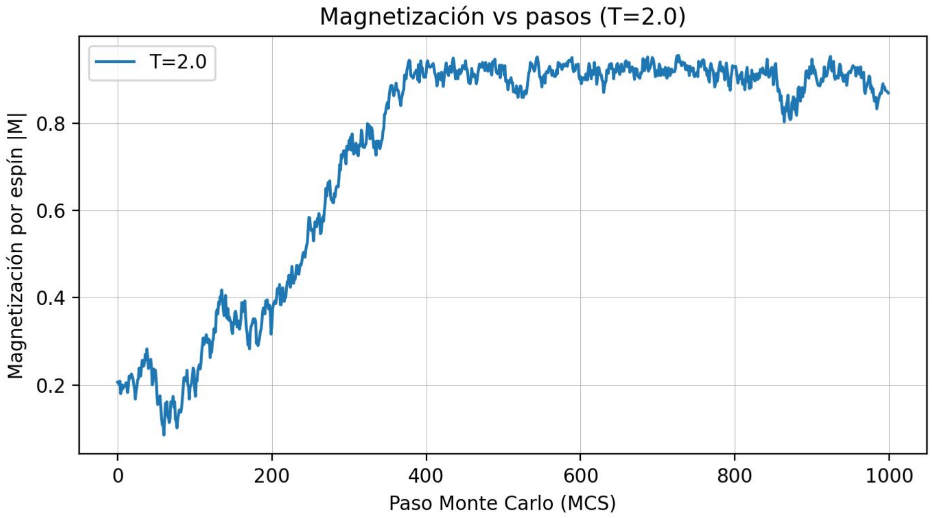
CÓDIGO (Diagrama de flujo):



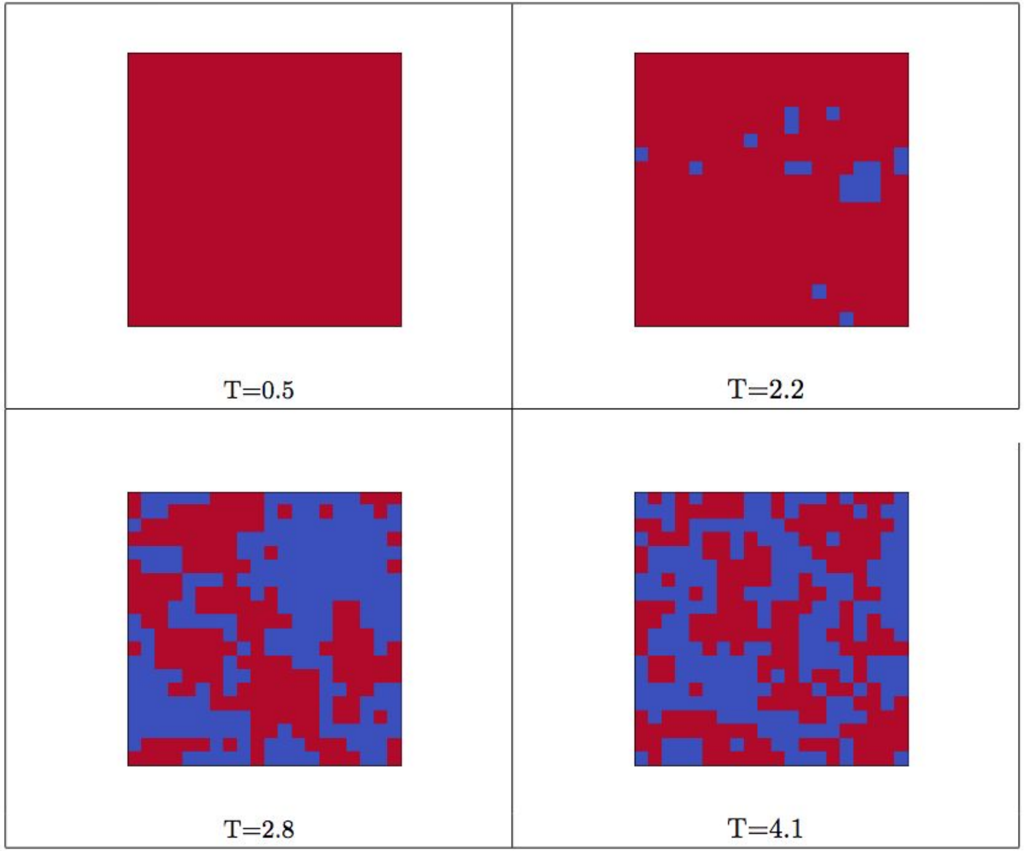
RESULTADOS

Convergencia de Energía y Magnetización del sistema tras 1000 MCS





RESULTADOS

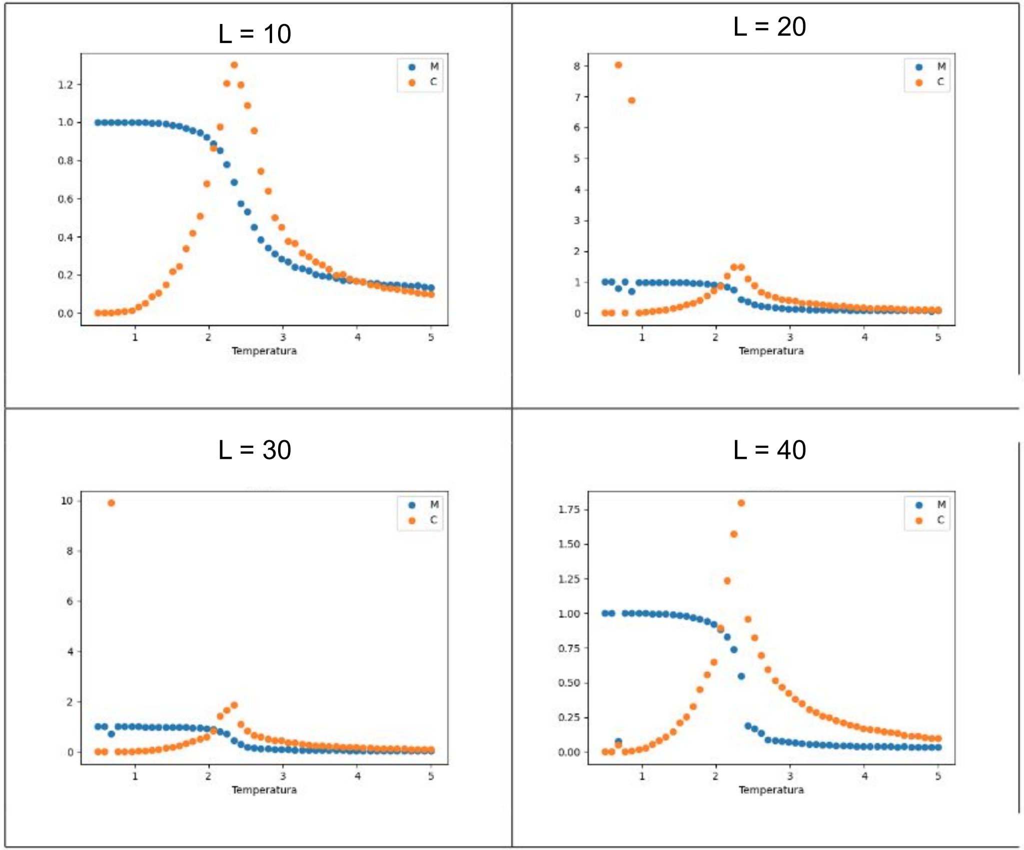


Estados típicos para L=20

Algunos estados que ocurrieron durante el programa.

La magnetización decrece con la temperatura.

RESULTADOS



Magnetización y calor específico contra temperatura

Entre T=2 y T=3 la magnetización decrece drásticamente y la capacidad calorífica sube.

El sistema aproxima un cambio de fase.