
Nom:

Certs materials magnètics pateixen una transició entre una fase ferromagnètica a baixes temperatures (amb una magnetització espontània no nul·la) i una fase paramagnètica a altes temperatures (on la magnetització és zero). Un model simplificat d'aquest fenomen considera un sistema d'espins amb dues possibles orientacions, que representem amb una variable d'espí σ que pot prendre valors $\sigma = \pm 1$. L'Hamiltonià del sistema es pot escriure com

$$H = - \sum_{\langle u,v \rangle} \sigma_u \sigma_v$$

on $\langle u,v \rangle$ representa una suma sobre els primers veïns i els índexs u i v prenen valors $1, \dots, N$ amb N el nombre total d'espins. Amb aquesta definició, la magnetització per espí es defineix com

$$m = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N \sigma_u.$$

Noteu que dos espins veïns minimitzen la seva energia d'interacció si tenen la mateixa orientació. Per tant, a temperatura zero, el sistema evolucionarà cap a una configuració amb tots els espins alineats, amb probabilitat $1/2$ per cadascuna de les possibles orientacions. Si la temperatura és més gran que zero, el que es minimitza és l'energia lliure de Helmholtz i només una part dels espins comparteixen la mateixa orientació. Per sobre d'una temperatura crítica, la meitat dels espins està orientada en una direcció i l'altra meitat en la direcció contrària i, per tant, la magnetització del sistema s'anula.

Per simular aquest sistema, fem servir l'algorisme de Metropolis-Hastings. Es tracta d'un algorisme que genera configuracions del sistema compatibles amb l'equilibri termodinàmic. La implementació es realitza de la següent forma:

1. En cada pas de la simulació triem uniformement a l'atzar un espí, σ_u , i fem avançar el temps físic com

$$t \rightarrow t + \frac{1}{N}$$

2. Proponem fer el canvi $\sigma_u \rightarrow -\sigma_u$ i calculem la variació d'energia associada al canvi, ΔH
3. Si $\Delta H < 0$ acceptem el canvi i tornem al punt 1
4. Si $\Delta H \geq 0$ acceptem el canvi amb probabilitat $e^{-\Delta H/T}$, on T és la temperatura del sistema i tornem al punt número 1

En el nostre cas considerem una xarxa quadrada bidimensional $L \times L$ amb condicions periòdiques de contorn, tal com s'indica a la figura, així que el nombre d'espins és $N = L^2$

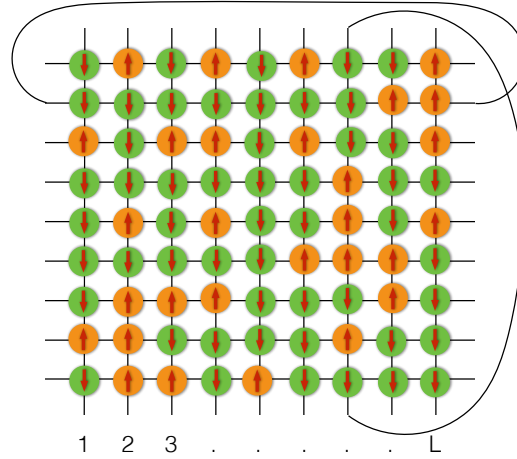


Figura 1: Esquema d'una xarxa bidimensional ($L \times L$) amb condicions periòdiques de contorn.

i la variable d'espí del node amb coordenades (i, j) l'escriuim com $\sigma(i, j)$. Noteu que la variació d'energia associada al possible canvi

$$\sigma(i, j) \rightarrow -\sigma(i, j)$$

és

$$\Delta H = 2\sigma(i, j) [\sigma(i, j + 1) + \sigma(i, j - 1) + \sigma(i + 1, j) + \sigma(i - 1, j)]$$

on, evidentment, s'han de tenir en compte les condicions de contorn, si cal, i on el valor de $\sigma(i, j)$ és el valor abans de fer cap canvi. Noteu també que en cas de que hi hagi un canvi, la magnetització canvia com

$$m \rightarrow m \pm \frac{2}{L^2}$$

depenent de si el canvi ha estat de $\sigma(i, j) = -1$ a $\sigma(i, j) = 1$ (positiu) o a l'inrevés (negatiu).

1. **(6 punts)** Escriu una subrutina METROPOLIS(S,L,T,M,TIME) que implementi l'algorisme descrit. Les variables input/output de la subrutina són:

- $S(L, L)$, una matriu d'enters $L \times L$ amb els valors dels espins de tots els nodes de la xarxa. És una variable input/output de la subrutina
- L , enter que representa l'amplada de la xarxa. És una variable input de la subrutina
- T , real a doble precisió que representa la temperatura del sistema. És una variable input de la subrutina
- M , enter que mesura la magnetització absoluta del sistema, es a dir, la suma de totes les variables d'espí, $M = \sum_{i,j} \sigma(i, j)$. És una variable input/output de la subrutina

- $TIME$, real a doble precisió que representa el temps físic del sistema. És una variable input/output de la subrutina
2. (4 punts) Fes un programa “main” que inicialitzi la matriu d’espins $S(L, L)$, el temps físic $TIME = 0$ i calculi la magnetització absoluta inicial M . Un cop inicialitzat, el programa ha de cridar la subrutina METROPOLIS dins un bucle per tal de simular l’evolució del sistema fins un temps final. Farem dues inicialitzacions diferents:
- (a) $L = 50$, $T = 2.2$ i $S(i, j) = \pm 1$ triats a l’atzar. Guarda en quatre fitxers les coordenades dels nodes amb espí +1 pels temps $TIME = 0, 1, 10, 100$. Amb l’script de gnuplot que trobaràs al campus virtual genera figures de l’evolució del sistema als diferents temps. Guarda també l’evolució de la magnetització per espí en un fitxer fins el temps $TIME = 100$ i genera un fitxer pdf amb la figura corresponent.
 - (b) Repeteix el mateix per $L = 50$, $T = 3.5$ i $S(i, j) = 1$ per tot i, j .
-