

# Introducción a la Simulación Computacional Guía 2 (Proyecto 1): Método de Monte Carlo y aplicación al modelo de Ising

Gabriel Ostapchuk, Lucas Chej

2do Cuatrimestre 2021

Proyecto 1: Simulación por Monte Carlo "Térmico" del Modelo de Ising

# Índice

<b>1. Introducción</b>	<b>3</b>
<b>2. Metodología</b>	<b>3</b>
2.1. Consideraciones generales . . . . .	3
2.2. Algoritmo de Metrópolis . . . . .	3
2.3. Particularidades de nuestra simulación . . . . .	4
<b>3. Resultados</b>	<b>4</b>
3.1. Ejercicio N°1 . . . . .	4
3.2. Ejercicio N°2 . . . . .	7
3.3. Ejercicio N°3 . . . . .	10
3.4. Ejercicio N°4 . . . . .	11
3.5. Ejercicio N°5 . . . . .	12
<b>4. Bibliografía</b>	<b>13</b>

# 1. Introducción

El modelo de Ising es un modelo físico propuesto para estudiar el comportamiento de materiales ferromagnéticos [1]. En el trabajo actual se propuso simular dicho modelo mediante el método de Monte Carlo utilizando el algoritmo de Metrópolis [2]. Se utilizó para ello una matriz de dimensión 2D ( $L = 20$ ) a partir de la cuál se obtuvieron resultados para diferentes magnitudes del sistema, como la energía y la magnetización media, el calor específico y la susceptibilidad magnética en función de la temperatura. Para el caso particular de la magnetización, también se estudió que sucedía para una matriz con  $L = 100$ .

## 2. Metodología

### 2.1. Consideraciones generales

Se propuso escribir el código para una simulación Monte Carlo del Modelo de Ising en 2D con las siguientes características:

- Se tomó como configuración inicial del sistema una red cuadrada ( $A$ ) de  $20 \times 20$  spines ( $L = 20$ ). Se realizó una asignación aleatoria de 1 o -1 para cada spin, como simplificaciones de los estados 'up' o 'down'.
- Se implementó el algoritmo de Metrópolis.
- Asumimos que la última columna de espines interactúa con la primera y viceversa. De la misma forma, la última fila de espines interactúa con la primera y viceversa (condiciones periódicas de contorno). Estas condiciones se utilizan para suprimir los efectos de borde. Se busca estudiar la magnetización como si estuviera en el seno de un material magnético (bulk), sin considerar los efectos particulares de las superficies o bordes del sistema.
- El Hamiltoniano de Ising del sistema es de la forma:

$$H = -J \sum_{i=1}^N \sum_{j=\langle i \rangle_{1v}} s_i s_j, \quad [1]$$

donde  $\langle i \rangle_{1v}$  nota los 4 primeros vecinos de cada spin  $i$ .

### 2.2. Algoritmo de Metrópolis

En líneas generales, nuevas configuraciones del sistema son generadas por las anteriores, utilizando una probabilidad de transición que depende de la diferencia de energía entre un estado anterior y uno posterior.

1. Se calcula la energía inicial  $E_\mu$  del sistema ( $A$ ) mediante la ecuación (1) y la magnetización inicial  $M_\mu$  como la sumatoria de los spines.
2. Se selecciona al azar un spin  $S_k$ , se plantea la inversión como  $-S_k$  y se calcula el  $dE$  entre el nuevo estado y el anterior.
3. Si  $dE < 0$ , se acepta la nueva configuración del spin y  $E = E_\mu + dE$ ,  $M = M_\mu + 2S_k$ .
4. Si  $dE > 0$ , se genera un número al azar ( $r$ ) entre 0 y 1.
5. Si  $r < A(\mu \rightarrow \nu)$  se acepta la nueva configuración del spin y  $E = E_\mu + dE$ ,  $M = M_\mu + 2S_k$ .
6. De lo contrario, no se acepta la nueva configuración del spin y  $E = E_\mu$ ,  $M = M_\mu$ .

## 2.3. Particularidades de nuestra simulación

Se calcularon los valores medios de las magnitudes físicas de interés (Energía Media, Magnetización Media, Calor específico y Susceptibilidad Magnética) para diferentes temperaturas ( $T$ ).

Para todos los cálculos asumimos  $k_B = 1$  y  $J = 1$ .

El archivo *run.sh* inicia y corre *ising.f90*  $N$  veces.

1.  $L = 20$
2. Por defecto,  $T_{inicial} = 0,1$ .  $T$  ( $0 \rightarrow 5$ ),  $dT = 0,1$  para  $1,5 > T > 3,5$  y  $dT = 0,01$  para  $1,5 < T < 3,5$ . Esta condición impuesta busca lograr una mayor densidad de puntos en el gráfico para la zona de la temperatura crítica del sistema.
3. Se realiza una primera corrida del archivo *ising.f90* con  $N = 1$  *millon* de pasos de MC y se obtiene una matriz termalizada ('A\_termal.dat'). De manera automática, las sucesivas corridas utilizan la 'A\_termal' correspondiente a la temperatura anterior.
4. Por cada corrida de 1 millón MC/step se calcula el promedio de la magnitud correspondiente (Ej. ' $E$ ') como  $SUM(E)/N$ , con  $N = 1$  millón.
5. Para cada temperatura y magnitud, se obtiene un  $N = 10$  (Ej. 10 *valores de E para*  $T = 0,1$ ) a partir de  $N = 1$  millón MC/steps ('Mag.dat').
6. Se compila (*gfortran*) y se corre *plot.f90*, el cuál calcula los promedios de los valores medios obtenidos para cada temperatura. Se obtienen los archivos 'E\_med.dat', 'M\_med.dat', 'Cv.dat', 'Chi.dat' y 'Z\_.dat' (cantidad de pasos aceptados). Se crean además archivos que permiten graficar las varianzas para diferentes temperaturas.

## 3. Resultados

### 3.1. Ejercicio N°1

Gráficos de las magnitudes medias en función de la temperatura.

A partir de los 10 valores medios para cada magnitud, se calcula el promedio de los mismos como mencionamos anteriormente, y se gráfica el valor promedio en función de su respectiva temperatura, obteniendo así los tres gráficos siguientes.

1. Magnetización media  $\langle M(T, B = 0) \rangle$

En la *Figura 1* observamos la magnetización media, normalizada para una matriz de 20x20 spines. Para valores de  $T$  cercanos a 0, podemos ver una magnetización máxima que se corresponde con los espines ordenados apuntando en la misma dirección (1 o -1, se computaron valores absolutos). Superado cierto valor de temperatura (*Temperatura crítica*, que analizaremos más adelante), la magnetización media decrece rápidamente y oscila levemente en valores próximos a 0.

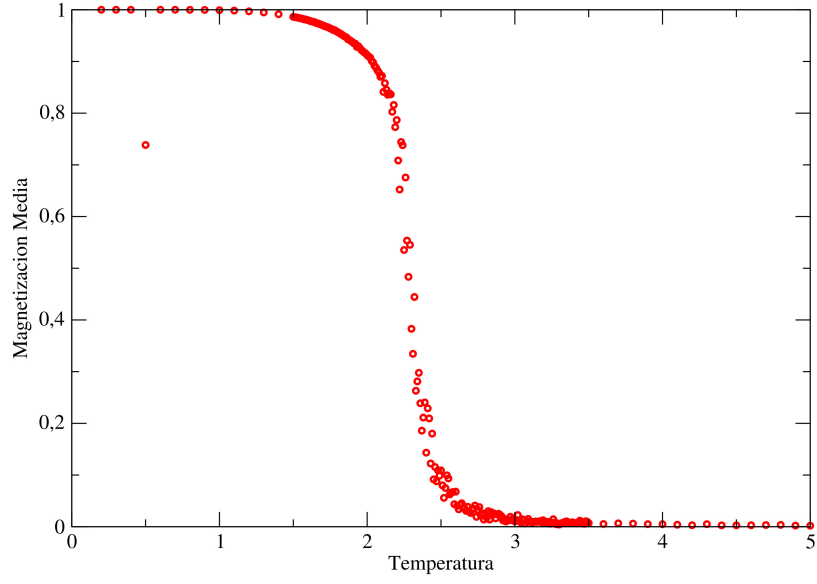


Figura 1: Magnetización media en función de la temperatura.

## 2. Energía media $\langle E \rangle$

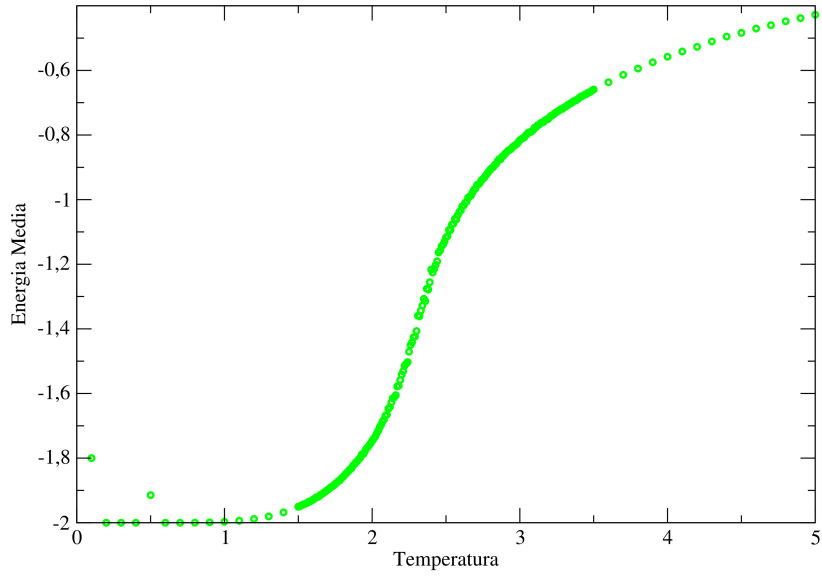


Figura 2: Energía media en función de la temperatura.

En cuanto a los valores de energía media (*Figura 2*), encontramos que a temperaturas bajas ( $T < 1,5$ ), dicha magnitud se encuentra estable en un mínimo ( $\langle E \rangle \approx -2$  para  $E$  normalizada) y aumenta con un

comportamiento sigmoideo en correlato con el incremento de temperatura. Dicho fenómeno se condice con lo observado en la *Figura 3* respecto al porcentaje de pasos aceptados durante la ejecución del algoritmo de Metrópolis. La dinámica de la curva  $\langle E \rangle$  vs  $T$  depende de la probabilidad de aceptación  $A(\mu \rightarrow \nu)$ , donde:

$$A(\mu \rightarrow \nu) = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} , \quad \beta = \frac{1}{K_B T} \quad [2]$$

El incremento de temperatura se traduce en un incremento de la probabilidad de aceptación y por lo tanto, se permiten valores energéticos mayores.

Teniendo en cuenta lo observado en las *Figuras 1 y 2*, el fenómeno que ocurre con la magnetización puede ser explicado en términos de la energía de Helmholtz:

$$F = U - TS \quad [3]$$

Dado que el sistema tiene a minimizar ' $F$ ', cuando la temperatura es muy baja, el término ' $TS$ ' resulta despreciable. En esta condición por lo tanto prima la minimización de la energía (tal y como se observa en la *Figura 2*), obteniéndose un sistema ferromagnético ( $M > 0$ ) con los espines alineados. En el caso contrario, cuando la temperatura es muy elevada ' $F \approx -TS$ '. Con lo cual minimizar ' $F$ ' implica maximizar la entropía ' $S$ ', resultando en un sistema paramagnético ( $M = 0$ ) con los espines desalineados.

### 3. Fracción de pasos aceptados respecto de pasos totales de MC

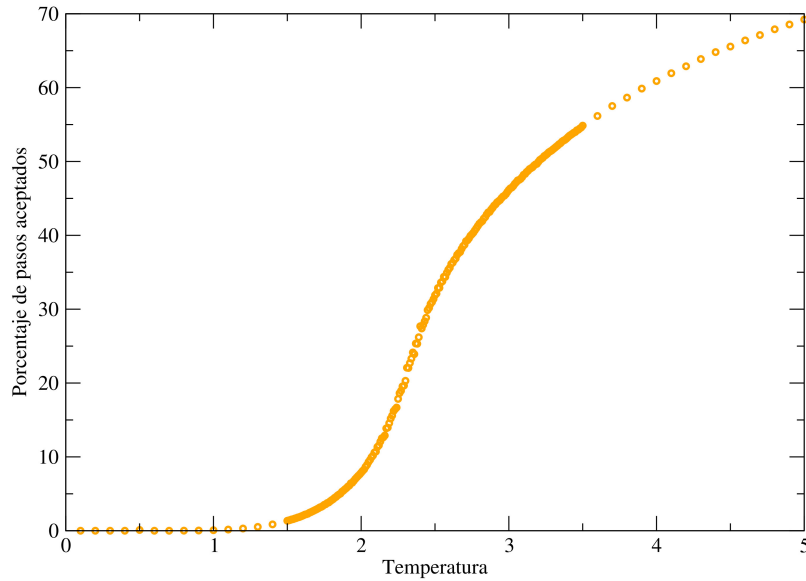


Figura 3: Aceptación de pasos en función de la Temperatura.

### 3.2. Ejercicio N°2

Con el motivo de evaluar la variación de las magnitudes durante el proceso de aceptación, se realizaron histogramas de  $\langle E \rangle$  y  $\langle M \rangle$  para las configuraciones obtenidas con la simulación de Monte Carlo (recopiladas cada 10 mil  $MC/step$ , de un total de 1 millón  $MC/step$  por  $T$ ) para tres temperaturas ( 'baja'  $T=0.7$  , temperatura crítica teórica  $T = 2.26$  y 'alta'  $T = 4.5$ )

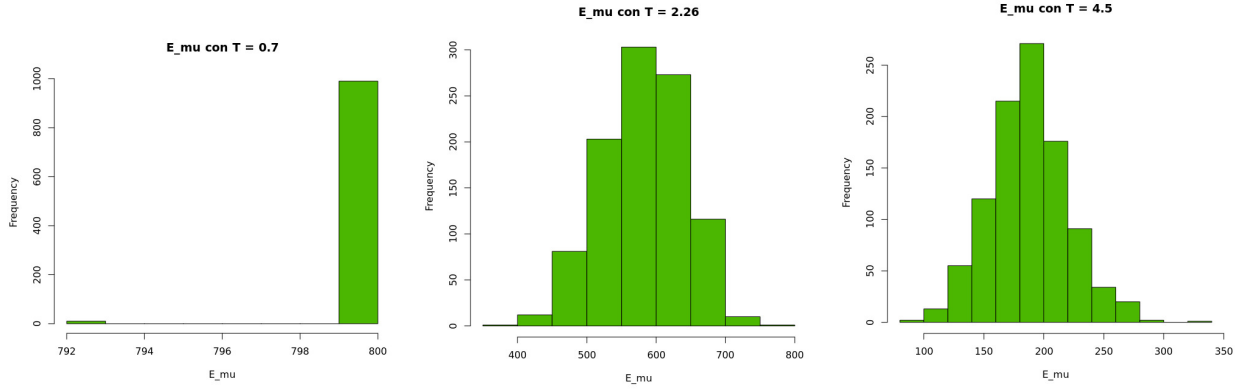


Figura 4: Histogramas de energía para distintas temperaturas.

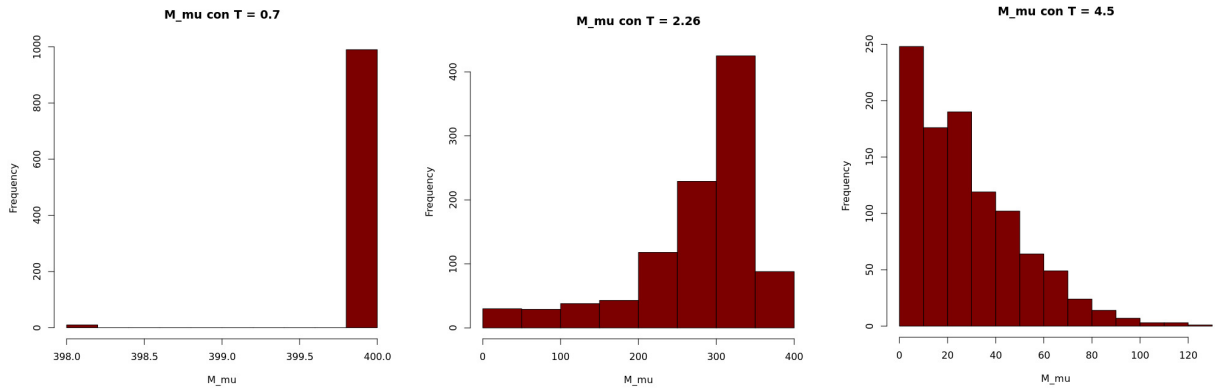


Figura 5: Histogramas de magnetización para distintas temperaturas.

A grandes rasgos, la variación tanto de la energía (*Figura 4*) como de la magnetización (*Figura 5*) presentan el mismo comportamiento. A temperatura 'baja' la variación es mínima, las magnitudes permanecen constantes la mayor cantidad del tiempo. Por otro lado, al evaluar  $T = T_c$  podemos ver que la variación aumenta considerablemente y tanto es así, que resulta ser la mayor dentro de los tres casos estudiados. Finalmente para  $T = 4,5$  , la variación sigue siendo considerable pero disminuye respecto del caso anterior.

En las *Figuras 6 y 7* se muestran gráficos de la varianza para las magnitudes media  $\langle E \rangle$  y  $\langle M \rangle$  en función de la temperatura. Se puede observar en detalle la dinámica previamente descrita en base a los histogramas, donde efectivamente la variación es máxima para las temperaturas cercanas a  $T_c$ .

1. Analizar el comportamiento de sus fluctuaciones. Relacione la varianza de éstas cantidades

$$\langle \sigma^2 E \rangle = (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \text{ y } \sigma^2 M \text{ con magnitudes físicas de interés.}$$

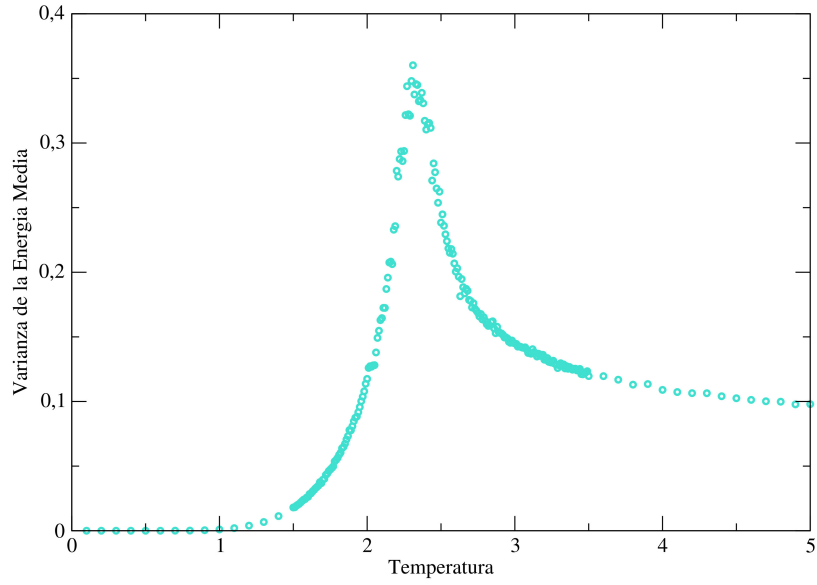


Figura 6: Varianza de la Energía

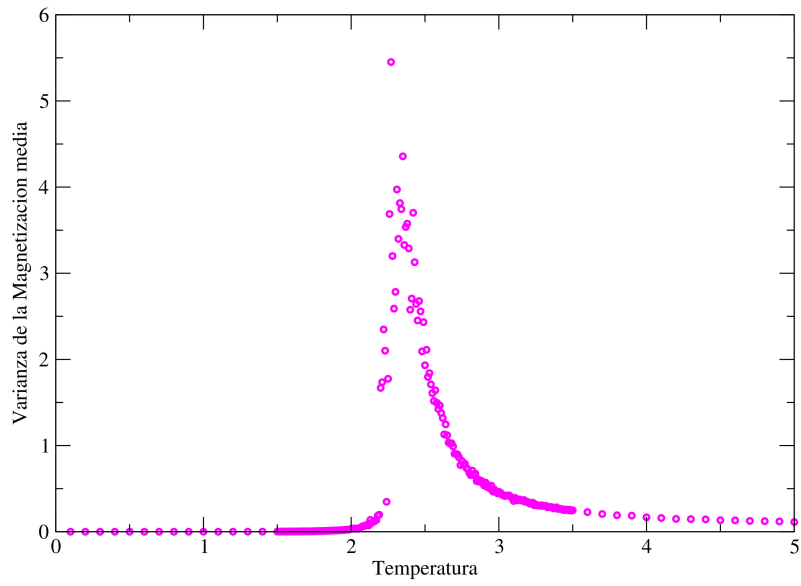


Figura 7: Varianza de la Magnetización

Conociendo la varianza para  $\langle E \rangle$  y para  $\langle M \rangle$ , podemos calcular el calor específico y la susceptibilidad magnética como se indica a continuación. Dichas magnitudes fueron obtenidas a partir del promedio de 10 mediciones de varianza para la magnitud media correspondiente por cada temperatura.



2. Calor específico por partícula:  $c_V = \frac{\beta^2}{N}(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$

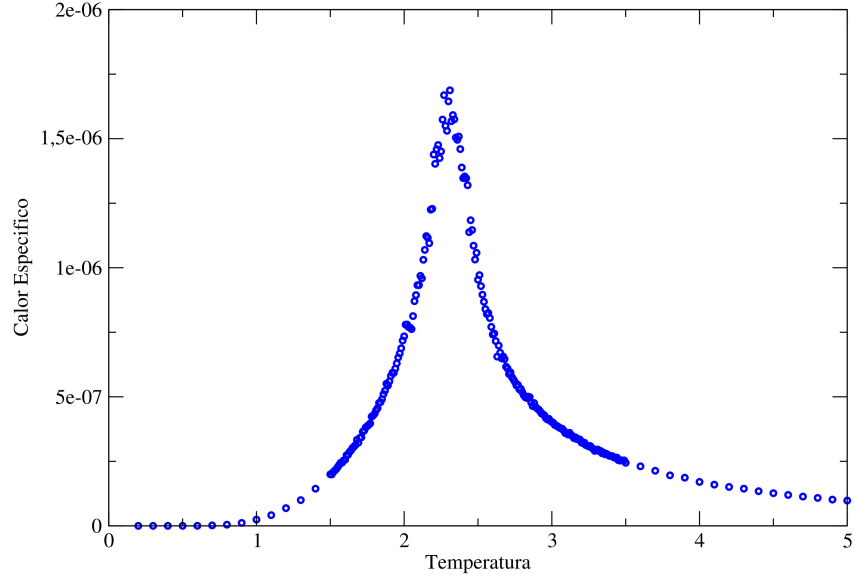


Figura 8: Calor específico en función de la temperatura.

3. Susceptibilidad a campo nulo  $\chi(H \rightarrow 0) = \beta N(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2)$

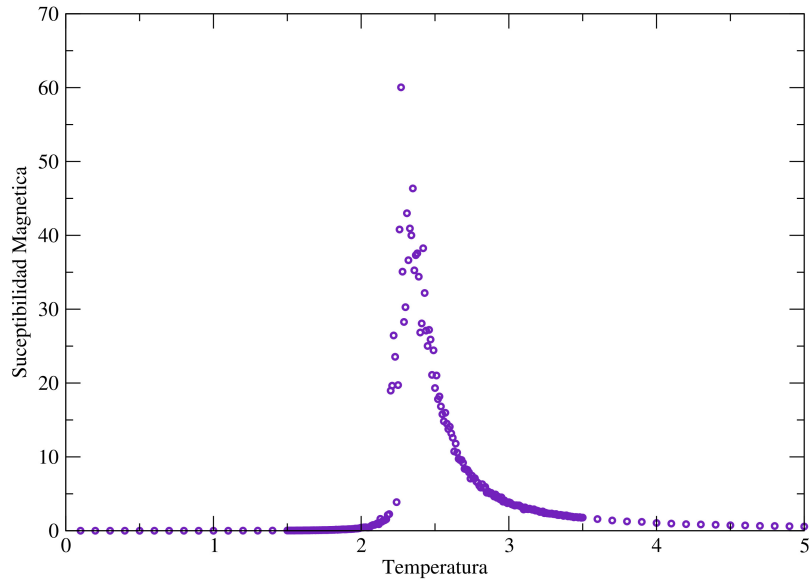


Figura 9: Susceptibilidad magnética en función de la temperatura.

En las *Figuras 8 y 9* vemos el calor específico  $C_v$  y la Suseptibilidad magnética  $\chi$  en función de la temperatura. De acuerdo con la teoría [5], el calor específico y la suseptibilidad magnética divergen en  $T_c$  en el límite termodinámico (arreglo de largo infinito). En las mencionadas figuras, vemos que esto no ocurre ya que estamos en un tamaño de matriz de  $L=20$ , muy alejados de un límite termodinámico ideal.

### 3.3. Ejercicio N°3

Se corrió el programa variando el tamaño de la matriz "L", de 20 a 100 para graficar y comparar los resultados.

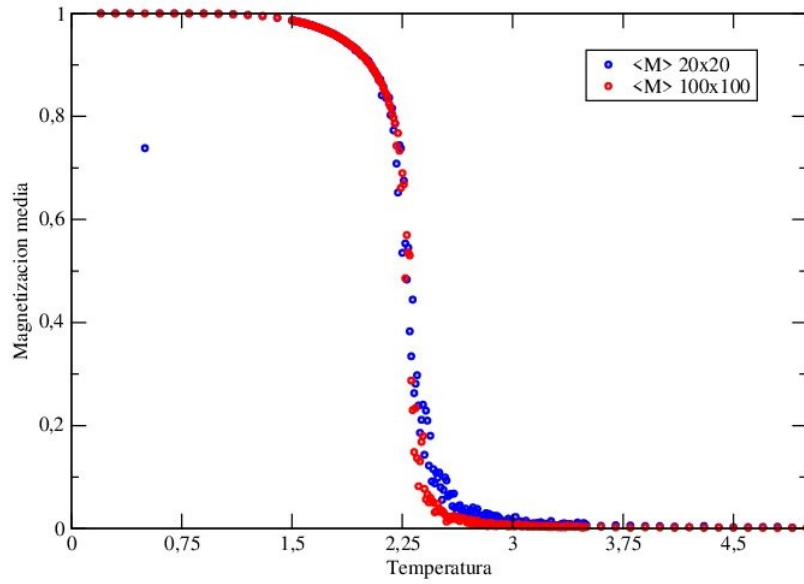


Figura 10: Comparación de la curva de magnetización para una matriz de 20x20 y otra de 100x100

En la figura 10 se puede observar que al utilizar un tamaño de matriz mas grande, con mayor número de spines, la curva en la zona cercana a la  $T_c$  se vuelve mas pronunciada y además, con un valor nuevo de  $T_c$  mas cercano al teórico [3].

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

De continuar incrementando el tamaño  $L$  de nuestra matriz, observaríamos (*Figura 11*) que la curva cercana a la  $T_c$  se convierte en una linea recta, ubicada en el punto exacto donde se produce la transición de fase.

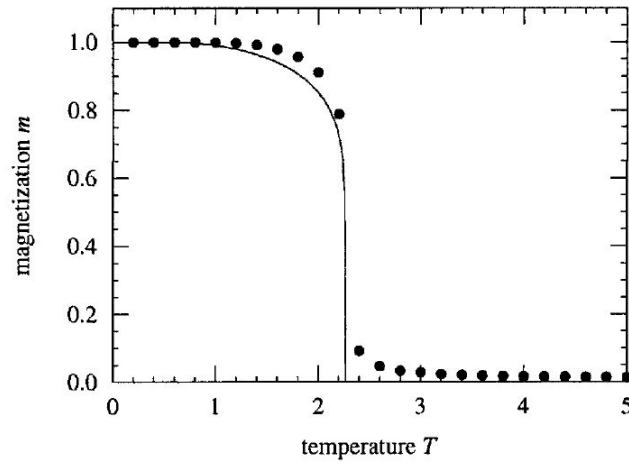


Figura 11: Figura extraída de [3], pag. 80. La línea sólida es la solución exacta conocida para el modelo de Ising en una red cuadrada bidimensional infinita.

### 3.4. Ejercicio N°4

Analizando el gráfico de magnetización en función de la temperatura de la matriz *Figura 12*, se puede observar que los valores de  $T$  cercanos a la fase de transición están en el orden de 2.28 a 2.35.

Asimismo, buscando el máximo valor que adopta la susceptibilidad magnética *Figura 9*, asumimos un valor aproximado de  $T_c = 2,3$ .

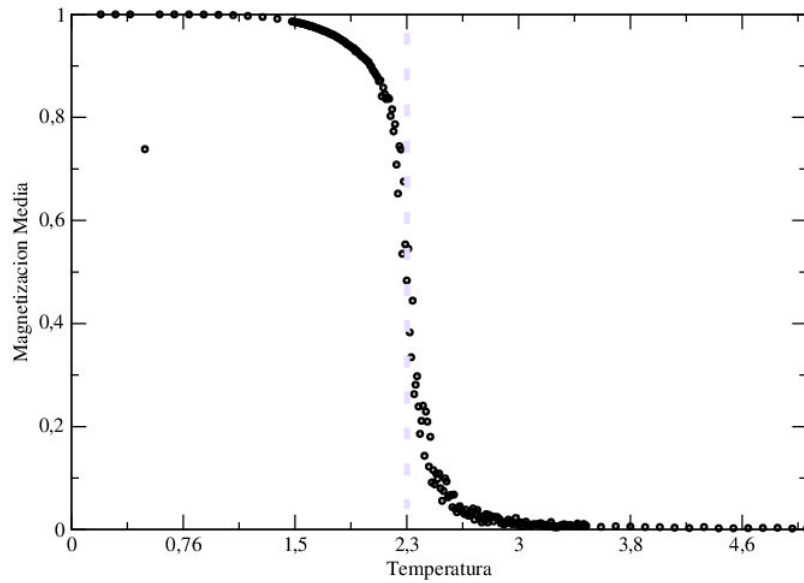


Figura 12: Método gráfico de estimación del  $T_c$

A altas temperaturas, los valores de los spines (que varían entre 1 y -1) son aleatorios y no están correlacionados, pero al bajar la temperatura las interacciones entre ellos estimula a que los espines cercanos apunten en la misma dirección (adoptar el mismo valor), dando lugar a correlaciones en el sistema.

Los grupos de espines adyacentes que están correlacionados de esta manera y que tienden a apuntar en la misma dirección se denominan clusters.

A medida que el sistema se acerca a  $T_c$ , el tamaño de estos grupos diverge, de modo que cuando estamos precisamente en la transición, podemos encontrarnos con zonas arbitrariamente grandes en las que los espines apuntan mayoritariamente hacia arriba o hacia abajo. Este es el motivo de que para un rango acotado de valores de  $T$ , ubicados en la zona de transición, vemos valores extremos de Magnetización, cercanos al orden de 0 o 1.

Finalmente, si la temperatura sigue descendiendo por debajo de la temperatura de transición, el sistema elige aleatoriamente tener la mayoría de sus espines en una dirección, hacia arriba o hacia abajo, y desarrolla una magnetización no nula en esa dirección.

### 3.5. Ejercicio N°5

Para obtener el exponente crítico  $\beta$ , en primer lugar aplicamos logaritmo natural a ambos lados de la ecuación para poder despejar el exponente.

$$\begin{aligned} M &= (T_c - T)^\beta \\ \ln M &= \ln(T_c - T)^\beta \\ \ln M &= \beta \ln(T_c - T) \end{aligned}$$

Una vez hecho esto, realizamos un grafico con los valores obtenidos para  $\ln(M)$  y  $\ln(T_c - T)$ , tomando  $T_c = 2,3$  y valores de  $T$  entre 1,5 y 2,19.

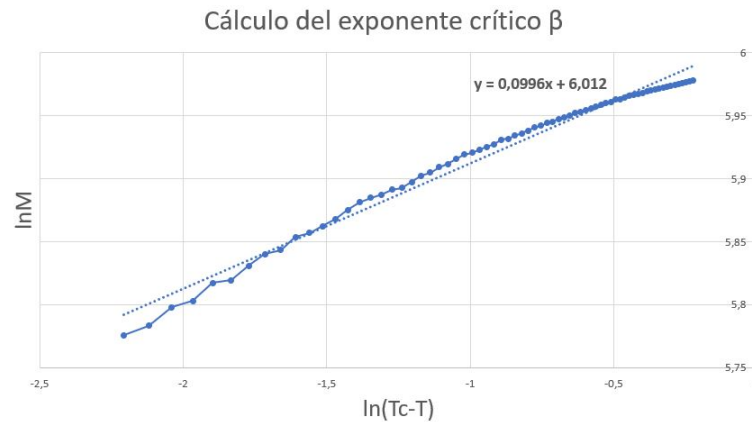


Figura 13: Línea de tendencia para obtención del exponente crítico

Al graficar podemos observar una línea de tendencia con forma lineal, que responde a la siguiente ecuación:  $y = 0,0996x + 6,012$ , donde la pendiente corresponde el valor de  $\beta$ .

La aproximación de Bragg-Williams (o campo medio) [4] es utilizada para predecir la temperatura crítica en dos dimensiones. Si bien está en desacuerdo con el valor exacto que surge de la solución de Onsager, sirve como un buen primer estimador.

El exponente crítico de campo medio para el modelo de Ising bidimensional bajo la aproximación de Bragg-Williams es  $\beta = \frac{1}{2}$ . En nuestro caso particular, podemos observar que nuestro valor de  $\beta \approx 0,1$  es mas cercano al valor de exponente crítico de la solución exacta de Onsager  $\beta = \frac{1}{8}$ .

## 4. Bibliografia

- [1] Fundamentals of statistical and thermal physics. Reif, F. McGraw-Hill Book Company. 1965
- [2] Equations of state calculations by fast computing machines. Metropolis, N. Rosenbluth, A. Rosenbluth M. Teller, A. The Journal of Chemical Physics. V21 N6. June, 1953.
- [3] M. E. J. Newman and G. T. Barkem, Monte Carlo Methods in Statistical Physics. New York, USA: Oxford University Press Inc, 1999.
- [4] Michael Plischke and Birger Bergersen, Equilibrium Statistical Physics 3rd Edition. Singapore: World Scientific, 2005.