

Introducción a la Simulación Computacional

Guía 3: Método de Monte Carlo y aplicación al modelo de Ising

Proyecto 1: Entrega de Informe y Código

2^{do} Cuatrimestre de 2025

Docentes: Joaquín Torres y Claudio Pastorino

Proyecto 1: Simulación de Monte Carlo “Térmico” del Modelo de Ising

- Se formarán grupos de 2 personas, que trabajarán en equipo, para implementar el programa de simulación y calcular las cantidades físicas relevantes.
- Se entregará un informe en el cuál se presentarán los gráficos de las cantidades obtenidas y se analizarán los resultados. No es necesaria una larga introducción sobre el modelo de Ising, prefiriéndose más énfasis en la discusión física de los resultados numéricos obtenidos. Puede explicarse lo que se considere necesario del modelo de Ising, para el análisis de los datos obtenidos.

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

- Se implementará el algoritmo de Metrópolis para una red cuadrada de spines. Se obtendrá una colección representativa de distintos micro-estados del ensemble canónico.
- Condiciones de contorno periódicas. Esto quiere decir, que asumimos que la última columna de spines interactúa con la primera y viceversa. De la misma forma, la última fila de espines interactúa con la primera y viceversa. 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. Esta es una forma numérica usual de considerar un sistema infinito.
- Considerar una red cuadrada de 30×30 spines. El Hamiltoniano de Ising del sistema es de la forma:

$$H = -J \sum_{i=1}^N \sum_{j=\langle i \rangle_{\text{p.v.}}} s_i s_j,$$

donde $\langle i \rangle_{\text{p.v.}}$ nota los 4 primeros vecinos de cada spin i . Conviene definir el estado del sistema en una matriz cuadrada donde los estados de spin estén dados por los valores -1 o 1, según los spines estén en estados *up* o *down*. J es la constante de acoplamiento entre espines y se asume positiva para describir un ferromagneto. Puede tomarse $J = 1$.

- Tome como configuración inicial del sistema una asignación aleatoria de 1 o -1 para cada spin.
- Luego de verificar que el programa funcione, calcule los valores medios de las magnitudes físicas de interés. Tomamos para los cálculos $k_B \equiv 1$.

Cantidades a estudiar y presentar

1. Presentar gráficos de las siguientes cantidades como función de la temperatura:
 - a) Magnetización media $\langle M(T, B = 0) \rangle$
 - b) Energía media $\langle E \rangle$
 - c) Fracción de pasos aceptados respecto de pasos totales de MC.
2. Presentar histogramas de $\langle E \rangle$ y $\langle M \rangle$ para las configuraciones obtenidas con la simulación de Monte Carlo para distintas temperaturas.
 - a) Analizar el comportamiento de sus fluctuaciones. Relacione la varianza de éstas cantidades ($\langle \sigma_E^2 \rangle \equiv (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$ y $\langle \sigma_M^2 \rangle$) con magnitudes físicas de interés.
 - b) Calculen, el calor específico por partícula: $c_V = \frac{\beta^2}{N} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$.
 - c) Calculen la susceptibilidad a campo nulo $\chi(H \rightarrow 0) = \beta(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2)$.
3. Discutir brevemente los efectos de tamaño finito, debidos a que las muestras usadas en la simulación tienen un número de espines pequeño en comparación con el límite termodinámico. Pueden analizar las diferencias entre muestras de dos tamaños.
4. A partir de la curva M vs. T estimen la temperatura crítica T_c . Expliquen qué observa con los valores medios de M a medida que se acerca al punto crítico. Tomen como referencia que la temperatura crítica del cálculo exacto es $T_c = 2,269$.
5. Con el valor de T_c , encuentre el exponente crítico β tal que $M \sim (T - T_c)^\beta$. Comparen con el resultado de la aproximación de Bragg-Williams.

Sugerencias:

- No duden en realizar consultas en clase y *discord*. Hay muchos detalles que surgirán durante el trabajo y que podrán consultarse.
- Implementar primero el algoritmo de Monte Carlo y luego de confirmar que está funcionando, agregue las cantidades a medir. Es decir, use la técnica “dividir y conquistar”, de resolver completamente porciones del problema, antes de pasar a otra parte.
- La configuración inicial, al ser aleatoria, pone al sistema en un punto del espacio de fases, que seguramente no será de equilibrio respecto de las condiciones físicas. Realice una primera corrida, de la cuál no utilizará datos, para “termalizar” al sistema. Es decir, llegar al equilibrio compatible con las condiciones físicas impuestas. Luego realice otra simulación, desde donde termina la anterior, en la que sí se medirán las magnitudes de interés.
- La llegada al equilibrio puede verificarse observando que la energía, por ejemplo, fluctúa respecto de un dado valor en lugar de tener derivas al observar un gráfico de energía vs. paso de Monte Carlo.