

Simulación en Física: Modelo de Ising.

Pedro Jesús López Abenza

1. Introducción al problema

El **modelo de Ising** es un modelo físico propuesto en Física Estadística para estudiar el comportamiento de los materiales ferromagnéticos en una transición de fase. Es especialmente conocido por ser uno de los pocos modelos útiles con solución analítica exacta. Como sabemos, este modelo no presenta transición de fase en el caso unidimensional, aunque ésta sí que existe en el caso bidimensional, el cual será objeto de nuestro estudio.

Para ello, hemos de considerar un sistema compuesto por una red bidimensional cuadrada, de dimensión $N \times N$ y condiciones periódicas en ambos ejes, de modo que a cada elemento o partícula del sistema se le asocia un espín, el cual puede estar orientado hacia arriba(+1) o hacia abajo(-1). Como sabemos, el hamiltoniano del sistema viene dado por la interacción entre los espines de primeros vecinos, de modo que podemos expresarlo como:

$$\mathcal{H} = -\mathcal{J} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j$$

donde \mathcal{J} es una constante positiva y σ_k es el espín de la partícula situada en la posición k . De acuerdo a esta definición de nuestro hamiltoniano y en base a la interacción con los primeros vecinos, podemos señalar sólo 5 posibles configuraciones y, con ello, sólo 5 posibles valores para nuestro hamiltoniano:

- Si todos los espines vecinos están alineados con el espín que estamos estudiando, tenemos que el hamiltoniano valdrá: $\mathcal{H} = -4\mathcal{J}$
- Si todos los espines vecinos menos uno están alineados con el espín que estamos estudiando, tenemos que el hamiltoniano valdrá: $\mathcal{H} = -2\mathcal{J}$
- Si dos de los espines vecinos están alineados con el espín que estamos estudiando y los otros están antiparalelos a él, tenemos que el hamiltoniano valdrá: $\mathcal{H} = 0$
- Si sólo uno de los espines vecinos está alineado con el espín que estamos estudiando mientras que el resto están antiparalelos a él, tenemos que el hamiltoniano valdrá: $\mathcal{H} = 2\mathcal{J}$
- Si todos los espines vecinos están antiparalelos al espín que estamos estudiando, tenemos que el hamiltoniano valdrá: $\mathcal{H} = 4\mathcal{J}$

Como sabemos, para temperaturas muy bajas, nuestros espines tenderán a alinearse, dando lugar al fenómeno del ferromagnetismo; mientras que, para temperaturas muy altas, los espines estarán distribuidos aleatoriamente. De tal modo, nuestro objetivo en este proyecto es estudiar cómo evoluciona el sistema en base a la temperatura definida, analizando así la transición de fase que se produce.

Para ello, dado un cierto elemento de nuestra red, hemos de estudiar, en base a la interacción de nuestro elemento con sus vecinos, si la configuración dada es más o menos favorable energéticamente que en caso de flippear nuestro elemento de estudio. De tal modo, como sabemos, si flippeamos nuestro elemento tendremos la configuración con una energía con signo opuesto, de forma que sabemos cómo será la diferencia de energía entre el estado original y el flippeado y podemos sortear si dicha transición sucede en base a una probabilidad de transición. Así, dado un estado inicial E_α y un estado final E_γ , utilizamos el *algoritmo de Metrópolis*, de modo que podemos definir 5 posibles valores para la probabilidad de transición:

- Si todos los espines vecinos o la mayoría de ellos están alineados con el espín de estudio, la probabilidad de transición será 1, pues la transición es energéticamente favorable.
- Si todos la mitad de los espines vecinos están alineados con el espín de estudio y la otra mitad están antiparalelos a él, dejamos el sistema conforme está.
- Si todos o la mayoría de los espines vecinos están alineados con el espín de estudio, la transición es poco favorable pero no imposible, de modo que la probabilidad de transición vendrá como $e^{-8\mathcal{J}\beta}$ ó $e^{-4\mathcal{J}\beta}$, respectivamente.

Realizaremos así un estudio de la magnetización y la energía media del sistema en función de la temperatura a la que es sometido. Asimismo, nos trataremos de obtener de forma numérica las magnitudes características del sistema: Por un lado, trataremos de obtener la temperatura crítica, T_c , la cual se refiere a la temperatura a partir de la cual la magnetización es nula. Por otro lado, buscaremos obtener el factor de Boltzmann, β , el cual nos indica el comportamiento de la magnetización en función de la temperatura para un intervalo cercano a T_c .

2. Cálculo numérico y simulación

2.1. Simulación numérica del modelo físico

Para simular numéricamente nuestro problema en una red bidimensional, contamos con nuestro programa `ising-test-pjla.f`, en el cual simulamos nuestra red mediante una matriz de tamaño $L \times L$. Así pues, hemos de partir de una configuración aleatoria de manera que asociamos a cada elemento de la red un cierto espín inicial (+1 ó -1) con igual probabilidad para ambos y, para una cierta temperatura, hemos de analizar cómo evoluciona el sistema en el tiempo hasta estabilizarse. Además, cabe destacar que en nuestro caso hemos tomado que $\mathcal{J} = 1$, de forma que si realizamos el cambio de variable $x = \frac{\mathcal{J}}{kT}$, tenemos que, en unidades de K, nuestra nueva variable x se identifica con la inversa de la temperatura.

De tal modo, hemos de realizar muchas simulaciones para promediar, dentro de las cuales realizaremos un paso de montecarlo, consistente en realizar N iteraciones en un sistema de N elementos. De tal modo, tomaremos las simulaciones más avanzadas (en concreto deshechamos las 100 primeras simulaciones) asegurándonos así de que el sistema alcance el equilibrio.

Así pues, es posible ejecutar el programa para una temperatura alta y una temperatura baja, de modo que podemos ver como el comportamiento del sistema coincide con lo señalado en la introducción al problema. Por tanto, a continuación se muestra la representación los resultados obtenidos para una $x = 10^2$ (i.e. baja temperatura) y una $x = 10^{-2}$ (i.e. alta temperatura):

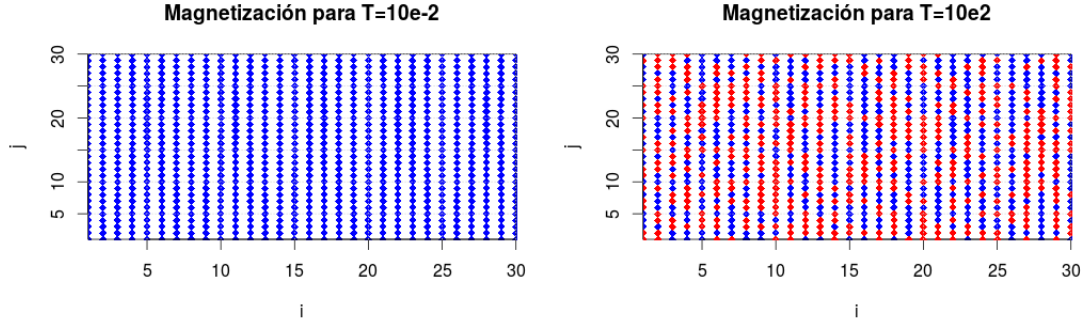


Figura 1: A la izquierda, representación gráfica de la orientación de los espines en el equilibrio para una red bidimensional de 30×30 y una variable $x = 10^{-2}$. A la derecha, representación gráfica de la orientación de los espines en el equilibrio para una red bidimensional de 30×30 y una variable $x = 10^2$.

Podemos ver como para el caso de bajas temperaturas todos los espines están alineados, dado lugar al fenómeno del ferromagnetismo, mientras que para altas temperaturas tenemos un comportamiento totalmente aleatorio y prácticamente se encuentran distribuidos en igual número.

2.2. Estudio de la magnetización y de la energía media

A continuación, vamos a estudiar la dependencia de algunas magnitudes del sistema como la magnetización y la energía media, de modo que continuaremos aplicando el mismo algoritmo mediante el programa `ising-magnener-pjla.f`. Así pues, realizaremos un barrido para los distintos valores de temperatura comprendidos entre 0 y 6 con un total de $N_{temp} = 100$ pasos, de modo que para cada temperatura realizaremos $N_{simul} = 10000$ sobre las que aplicaremos el paso de montecarlo, de forma que realizaremos un promedio de todas para calcular la magnetización y la energía por espín.

Por tanto, a continuación se muestra la representación gráfica del comportamiento de la magnetización con su correspondiente error en función de la temperatura para tamaños de la red bidimensional de 20×20 , 30×30 , 40×40 y 50×50 :

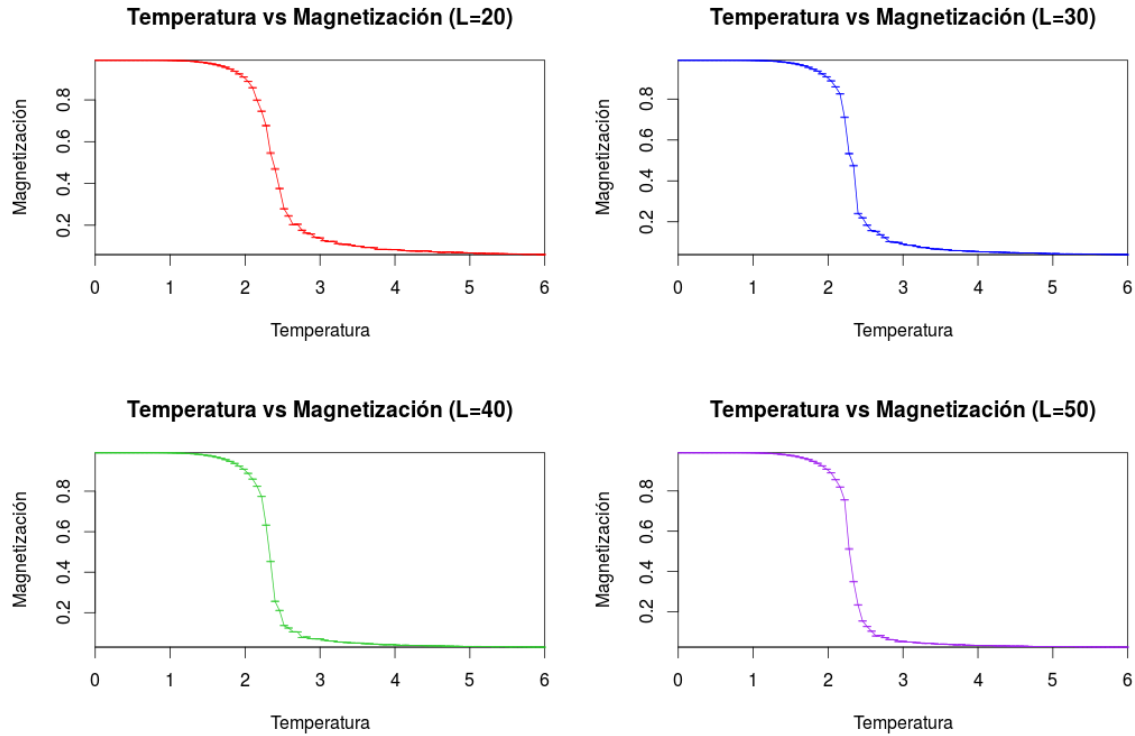


Figura 2: Representación gráfica de la magnetización con su correspondiente error en función de la temperatura para varios tamaños de la red bidimensional.

Tal y como esperabamos, vemos como tenemos una magnetización máxima para temperaturas bajas, mientras que, a partir de una temperatura igual a 1.5, se aprecia como a medida que aumenta la magnetización dicha magnitud se va reduciendo hasta llegar a una temperatura igual a 4, donde se puede ver como la magnetización ya es nula. Así pues, cabe destacar que este decrecimiento se produce de forma mucho más abrupta entre las temperaturas de 2 y 2.5, de modo que esta región de decrecimiento tan pronunciado será de especial interés en partes posteriores de nuestro estudio.

Así pues, para ver el comportamiento de las curvas en función del tamaño del sistema y cómo a medida que éste aumenta existe una tendencia hacia una línea vertical en un valor concreto de la temperatura, se muestra conjuntamente la representación gráfica de la magnetización en función de la temperatura para tamaños de la red bidimensional 20×20 , 30×30 , 40×40 y 50×50 :

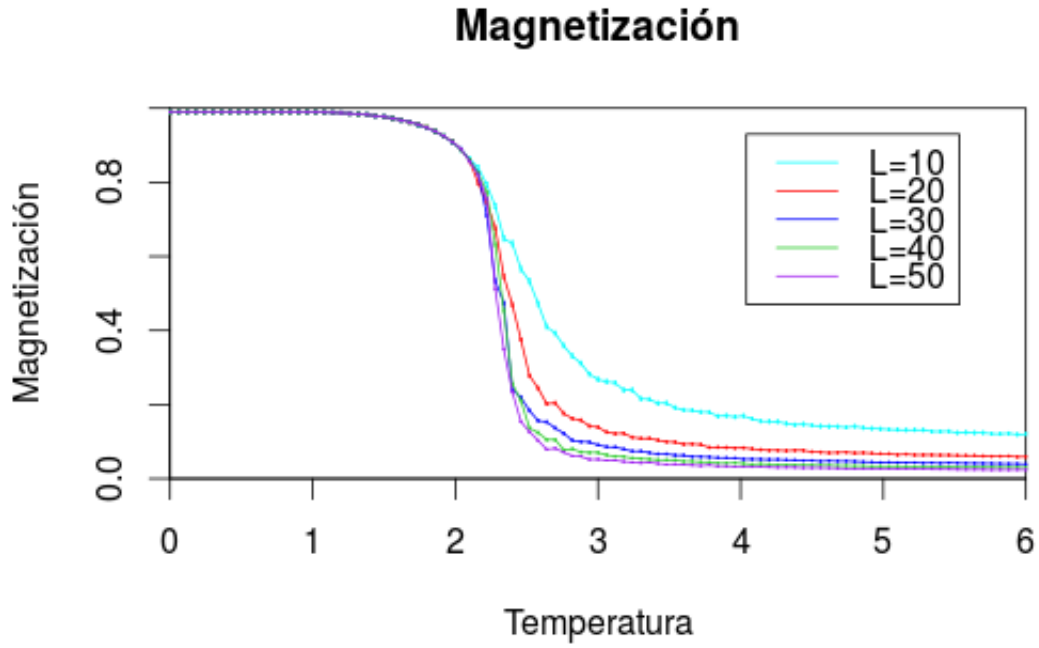


Figura 3: Representación gráfica de la magnetización con su correspondiente error en función de la temperatura para varios tamaños de la red bidimensional

Es claro que a medida que aumenta el tamaño de nuestra muestra de estudio la transición se produce de una forma mucho más abrupta, tendiendo así a una línea vertical.

De igual modo, a continuación se muestra la representación gráfica del comportamiento de la energía media por espín con su correspondiente error en función de la temperatura para varios tamaños de la red bidimensional 20×20 , 30×30 , 40×40 y 50×50 :

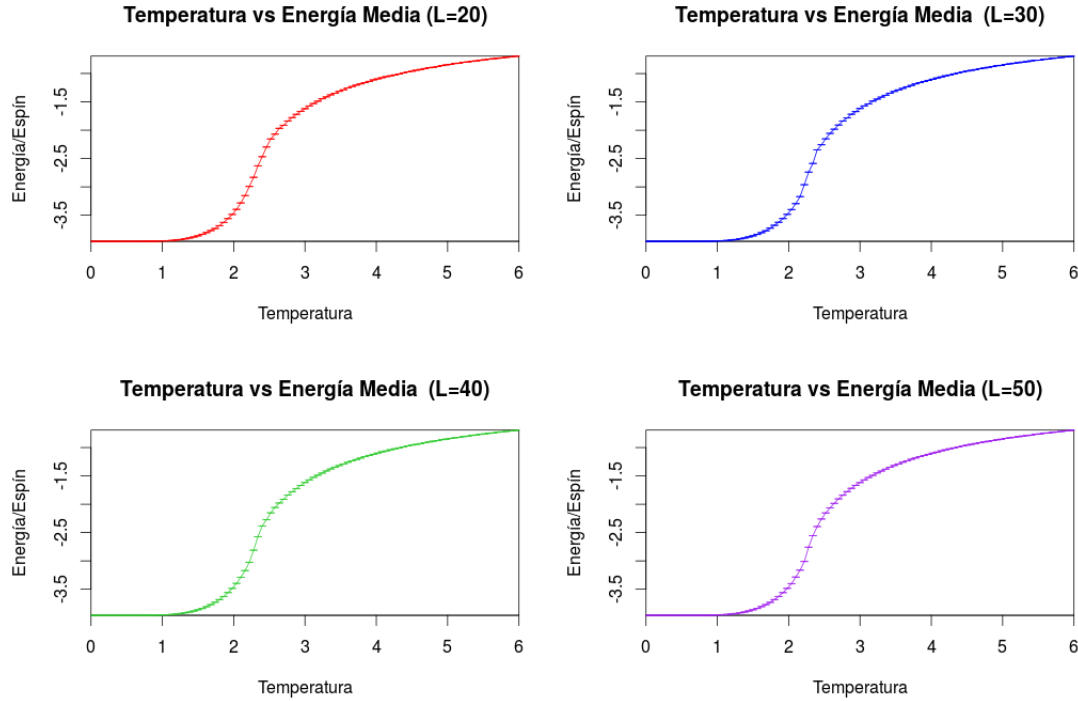


Figura 4: Representación gráfica de la energía media por espín con su correspondiente error en función de la temperatura para varios tamaños de la red bidimensional

Vemos como, a medida que mayor es la temperatura, mayor es la energía asociada a cada elemento del sistema. Ello queda explicado por el hecho de que el sistema presenta una mayor energía debida a la agitación térmica generada por la temperatura. Por tanto, podemos ver como dicha energía siempre sigue una tendencia de crecimiento.

2.3. Búsqueda de la temperatura crítica y el exponente γ a partir de la magnetización

Siguiendo el mismo programa anteriormente utilizado, vamos a tratar de obtener dos constantes importantes en el estudio de nuestro sistema: la temperatura crítica, T_c y el exponente γ .

Comenzaremos por la búsqueda de la temperatura crítica, T_c , la cual representa la temperatura a partir de la cual se hace nula la magnetización y ya no aparece nunca más para un sistema de tamaño infinito. Para obtenerla, hemos de calcular la magnetización en la zona de temperaturas donde se produce el descenso de la misma, en concreto entre 2 y 2.5, pues en dicha zona es posible aproximar la magnetización a una recta.

Hemos realizado este proceso para el caso de varios tamaños de la red bidimensional, como son 10×10 , 20×20 , 30×30 , 40×40 y 50×50 . Así, a continuación se muestra la representación gráfica de la magnetización en dicha región para dichos tamaños:

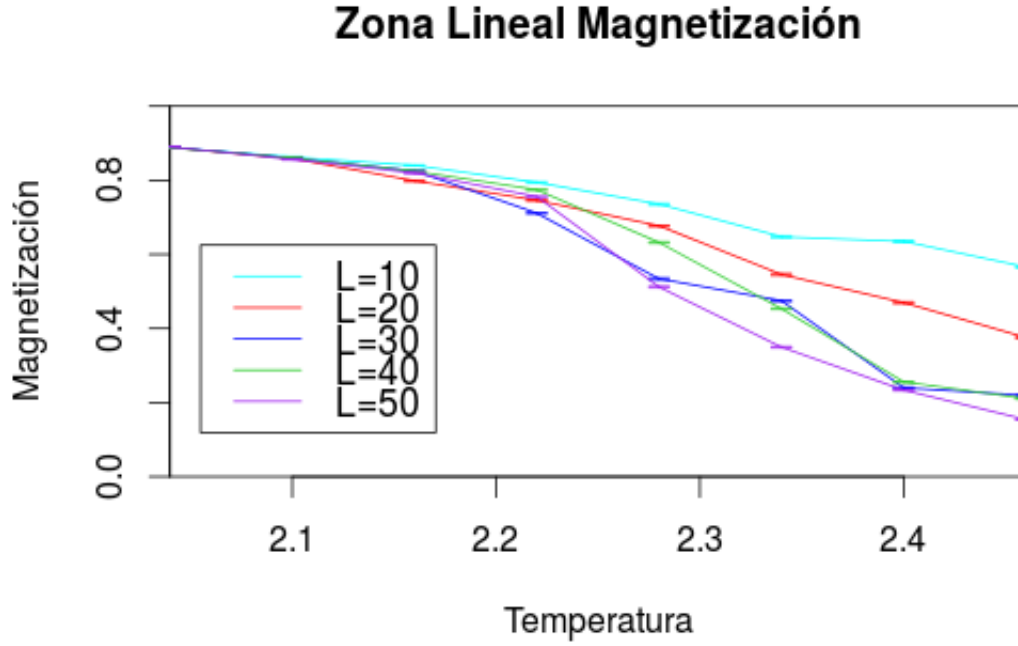


Figura 5: Representación gráfica de la magnetización en la zona lineal de temperaturas ($T \in [2, 2.5]$) para el caso de varios tamaños de la red bidimensional de 10×10 , 20×20 , 30×30 , 40×40 y 50×50 .

De tal modo, es posible realizar un ajuste lineal para dichos datos, de forma que el punto donde la recta obtenida corta al eje X representará la temperatura crítica para cada tamaño. Por tanto, resolviendo la ecuación, la temperatura crítica vendrá como:

$$a \cdot T_{crit} + b = 0 \Rightarrow T_{crit} = -\frac{b}{a}$$

De modo que será el cociente entre ordenada en el origen y pendiente obtenidos en nuestro ajuste lineal. Por su parte, el error vendrá dado por la propagación de errores como:

$$\Delta T_{crit} = \left| \frac{1}{a} \right| \Delta b + \left| \frac{b}{a^2} \right| \Delta a$$

De tal modo, podemos realizar un nuevo ajuste lineal de los resultados obtenidos para la temperatura crítica en función de la inversa del tamaño de la red bidimensional al cuadrado. Así pues, a continuación se muestran la representación gráfica de los datos obtenidos de temperaturas críticas y el error asociado a las mismas frente a la inversa del cuadrado del tamaño de la muestra para el caso de una red bidimensional de tamaño 10×10 , 20×20 , 30×30 , 40×40 y 50×50 y el ajuste lineal de dicha temperatura crítica:

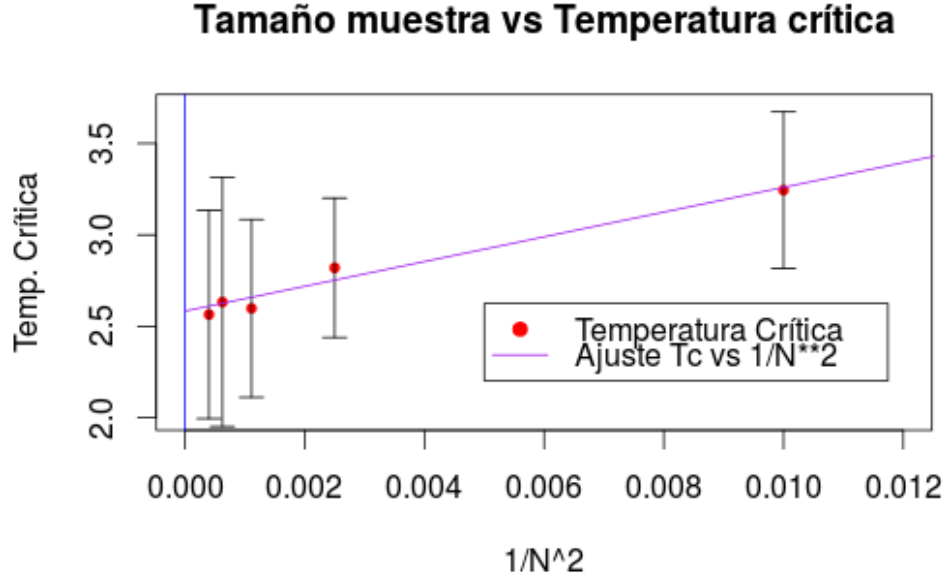


Figura 6: Representación gráfica de la temperatura crítica en función de la inversa del tamaño de la red bidimensional al cuadrado con su respectivo error y ajuste lineal de los datos obtenidos.

De tal modo, una vez realizado el ajuste lineal podemos recurrir a hacer una extrapolación para así poder obtener la temperatura crítica del sistema, la cual se corresponderá con la ordenada en el origen de dicha recta pues se corresponde con el límite donde $N \rightarrow \infty$. Así pues, el valor obtenido para dicha temperatura crítica es el siguiente:

$$T_{crit} = 2,58 \pm 0,04$$

Vemos como este resultado es relativamente cercano al valor teórico de dicha temperatura crítica, situado en $T_{crit,teo} = 2,269$.

Del mismo modo, vamos a proceder a la búsqueda del exponente γ , el cual hace referencia al comportamiento de la magnetización en función de la temperatura para un intervalo cercano a la temperatura crítica T_c (para la cual usaremos el valor teórico). Así, hemos de tener en cuenta que la magnetización es proporcional al factor $(\frac{T_c - T}{T_c})$ elevado a un exponente γ :

$$M \propto \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^\gamma$$

De manera que hemos de linealizar la ecuación aplicando logaritmos:

$$\ln(M) \propto \gamma \ln\left(1 - \frac{T}{T_c}\right)$$

De tal modo, utilizaremos los datos obtenidos para nuestra muestra bidimensional de 50×50 para temperaturas menores a la temperatura crítica. A continuación se muestra la representación gráfica obtenida para el logaritmo de la magnetización en función del logaritmo del factor $(1 - \frac{T}{T_c})$:

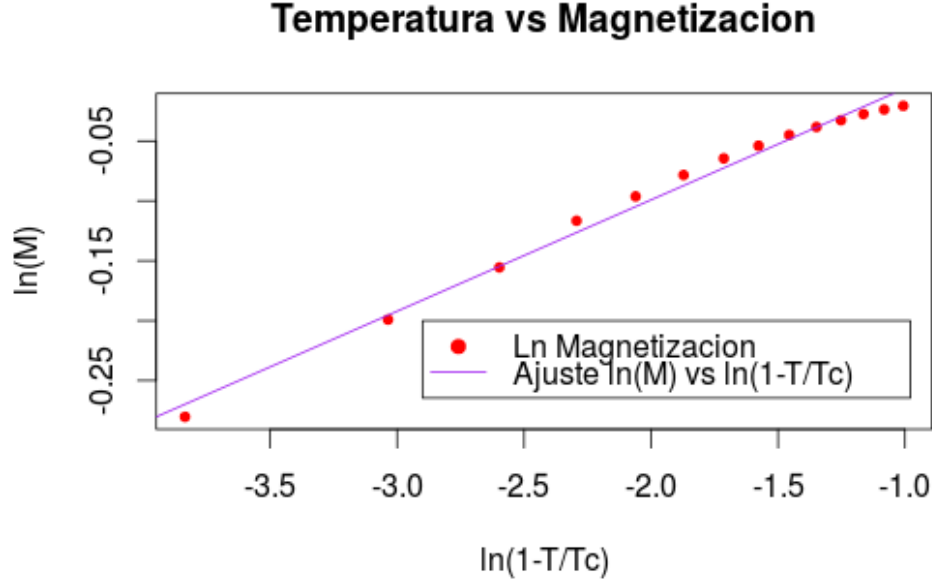


Figura 7: Representación gráfica del logaritmo de la magnetización en función del logaritmo del factor $(1 - \frac{T}{T_c})$ y ajuste lineal de dichos datos.

Así pues, si realizamos un ajuste lineal de dichos datos, la pendiente del mismo nos dará el valor obtenido para el exponente γ . Así pues, el valor obtenido para dicho exponente es el siguiente:

$$\gamma = 0,093 \pm 0,003$$

De nuevo vemos como este resultado es relativamente cercano al valor teórico de dicho exponente, situado en $\gamma_{teo} = 0,125$.

2.4. Búsqueda de la temperatura crítica a partir del calor específico

Podemos hacer uso de una nueva magnitud para calcular la temperatura crítica, T_c , de nuestro modelo: El calor específico por partícula, el cual está relacionado con las fluctuaciones de la energía media por espín. Así pues, la temperatura crítica, T_c , se corresponde con la temperatura a partir de la cual el calor específico presenta un valor máximo. Dicho calor específico viene dado por la siguiente relación:

$$C_v = \frac{1}{NT^2} \left(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right)$$

Así pues, siguiendo el algoritmo anterior, hacemos uso del programa `ising-calor-pjla.f`, el cual será el encargado de realizar nuestro cálculo para el calor específico en función de la temperatura. Así pues, realizaremos un barrido para los distintos valores de temperatura comprendidos entre 0 y 6 con un total de $N_{temp} = 100$ pasos, de modo que para cada temperatura realizaremos $N_{simul} = 10000$.

Por tanto, utilizaremos así nuestro algoritmo para que nos indique cuál es la temperatura para la que el calor específico presenta dicho valor máximo. De nuevo hemos de destacar que situamos nuestro criterio para el error asociado a las temperaturas obtenidas como la mitad del intervalo de nuestro muestreo, aunque de nuevo es importante señalar que esto no influye en nuestro cálculo, puesto que será común para todos los valores de la probabilidad y, por tanto, todos tendrán el mismo peso a la hora de hacer el ajuste lineal.

De tal modo, a continuación se muestra la representación gráfica del comportamiento del calor específico en función de la temperatura para varios tamaños de la red bidimensional como 20×20 , 30×30 , 40×40 y 50×50 :

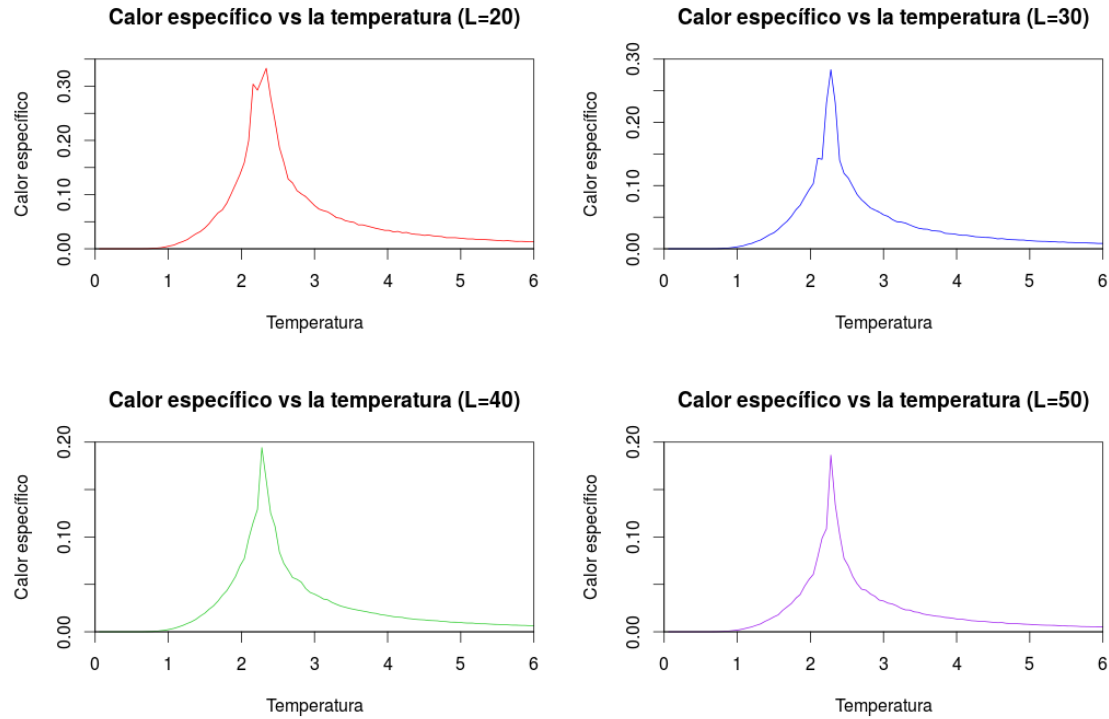


Figura 8: Representación gráfica del calor específico con su correspondiente error en función de la temperatura para varios tamaños de la red bidimensional.

Vemos como para todos los tamaños de la red representados el calor específico por partícula presenta un pico bastante nítido en un valor situado entre el 2 y el 2.5. Así pues, nuestro programa ha sido capaz de calcularnos el valor de la temperatura para el cual el calor específico presenta su máximo, de modo que este será el que asociamos a la temperatura crítica.

A continuación se muestra una representación gráfica de la temperatura crítica en función de la inversa del tamaño de la red bidimensional al cuadrado:

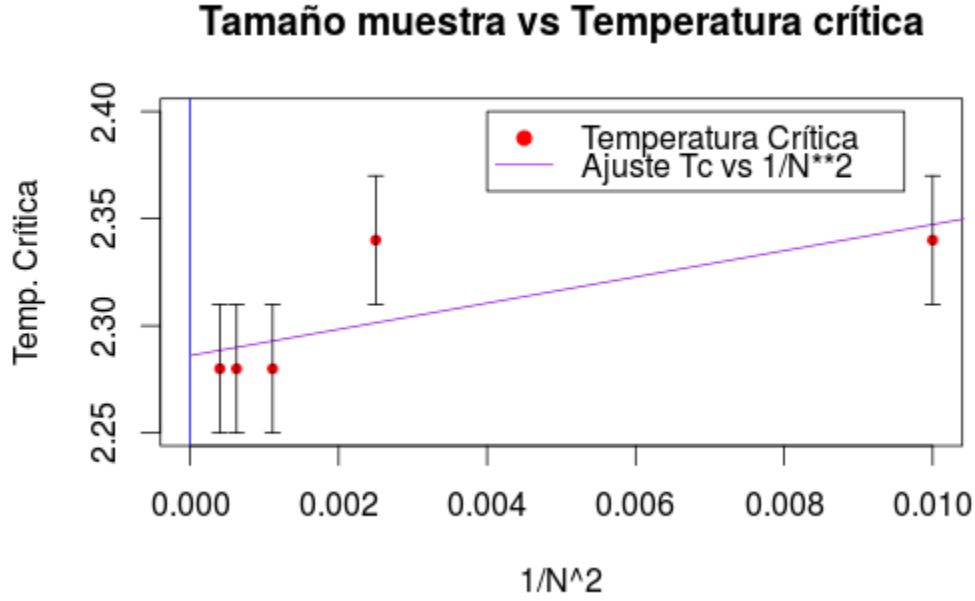


Figura 9: Representación gráfica de la temperatura crítica en función de la inversa del tamaño de la red bidimensional al cuadrado y ajuste lineal de los datos obtenidos mediante el uso del calor específico.

De tal modo, podemos realizar un ajuste lineal de los resultados obtenidos para la temperatura crítica en función de la inversa del tamaño de la red bidimensional al cuadrado y, mediante una extrapolación obtener la temperatura crítica para $L \rightarrow \infty$ identificandola con el valor de la ordenada de la origen de nuestro ajuste. Así, el valor obtenido por este método para la temperatura crítica es:

$$T_{crit} = 2,286 \pm 0,014$$

Vemos como este valor calculado es algo más cercano al de la temperatura crítica teórica, $T_{crit,teo} = 2,269$, que el obtenido anteriormente. Cabe destacar que podríamos haber mejorado aún más la precisión de los resultados haciendo uso de un barrido más fino.

3. Conclusiones

En conclusión, en este proyecto hemos sido capaces de simular con bastante éxito el modelo de Ising, de forma que hemos podido calcular con una precisión relativamente acertada las magnitudes características del modelo, tales como la temperatura crítica y el exponente γ .

No obstante, es obvio que existe la posibilidad de mejorar los resultados obtenidos mediante una mejora de la estadística a través del aumento del número de simulaciones realizadas y/o la simulación del modelo para tamaños aún mayores (sólo hemos llegado a 50×50), pues en tal caso nuestro sistema se acerca más.

Además, adicionalmente se ha repetido el cálculo de la temperatura crítica a partir del calor específico, el cual ha sido calculado utilizando las fluctuaciones de la energía media por espín. Así, hemos podido ver como el valor obtenido por este método nos ofrece un valor más cercano al teórico.

4. Referencias

- <http://www.fisica.unlp.edu.ar/academica/Members/rossigno/TD%20-%20Juan%20Muglia.pdf>
- <http://materias.df.uba.ar/ft3a2012c2/files/2012/11/guia11.pdf>