

Modelo de ising. Voluntario 1

Rodrigo André González

7 de julio de 2023

Índice

1. Introducción	3
2. Resultados	5
2.1. Comportamiento de las magnitudes a diferentes T y N	5
3. Conclusiones	11
4. Uso del superordenador	12
5. Referencias	13

1. Introducción

El modelo de Ising es un modelo físico utilizado para estudiar el comportamiento de los materiales ferromagnéticos y las transiciones de fase de dichos materiales. Su resolución en una dimensión fue presentada por Ising y fue extendida a dos dimensiones por Onsager. Esta es la base para el estudio de muchos fenómenos críticos en física estadística. Se trata de una red cuadrada bidimensional $N \times N$ donde cada espín está ubicado en un nodo los cuales interactúan con los cuatro espines más cercanos; estos espines pueden tener dos valores: 1 y -1.

La energía de interacción del sistema de espines viene dada por:

$$E(S) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N s(i, j) [s(i, j+1) + s(i, j-1) + s(i+1, j) + s(i-1, j)] \quad (1)$$

Sabiendo esto calcularemos la magnetización promedio, la energía media, el calor específico y la función de correlación del sistema cuyas expresiones son las siguientes:

$$m_N = \left\langle \frac{1}{N^2} \left| \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N s(i, j) \right| \right\rangle \quad (2)$$

$$e_N = \frac{\langle E(S) \rangle}{2N} \quad (3)$$

$$c_N = \frac{1}{N^2} [\langle E(S)^2 \rangle - \langle E(S) \rangle^2] \quad (4)$$

$$f(i) = \frac{1}{N^2} \sum_{(n,m)} \langle s(n, m) s(n+i, m) \rangle \quad (5)$$

Esto lo haremos para varias temperaturas y varios valores de N .

Exponente critico

Un punto crítico es aquel al que, a una temperatura y presión concretas (T_c, P_c) , el volumen de la fase líquida es igual al de la fase gaseosa y, por lo tanto, sus densidades también.

En el punto crítico muchas magnitudes termodinámicas presentan una discontinuidad asintótica. Para estudiar su comportamiento al rededor del punto crítico utilizamos los exponentes críticos: $\alpha, \alpha', \beta, \gamma, \gamma', \nu, \nu'$; donde los valores con prima son para temperaturas menores que la crítica y los valores sin prima para temperaturas mayores a la crítica.

Definimos la temperatura reducida, t , como la medición de la distancia desde la temperatura crítica:

$$t = \frac{T - T_c}{T_c} \quad (6)$$

Para el calor específico tenemos la siguiente expresión:

$$c_N \approx t^{-\alpha} \quad \text{si } T > T_c \quad (7)$$

$$c_N \approx (-t)^{-\alpha'} \quad \text{si } T < T_c \quad (8)$$

En el caso de la magnetización utilizamos:

$$m_n \approx (-t)^\beta \quad \text{si } T < T_c \quad (9)$$

Esto solo es válido para temperaturas menores a la crítica porque para temperaturas mayores m_N se anula.

La expresión para la susceptibilidad magnética, χ , es:

$$\chi \approx t^{-\gamma} \quad \text{si } T > T_c \quad (10)$$

$$\chi \approx (-t)^{-\gamma'} \quad \text{si } T < T_c \quad (11)$$

La longitud de correlación viene dada por:

$$\xi \approx t^{-\nu} \quad \text{si } T > T_c \quad (12)$$

$$\xi \approx (-t)^{-\nu'} \quad \text{si } T < T_c \quad (13)$$

La igualdad de Rushbrooke nos relaciona los valores de los exponentes críticos α, β, γ :

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad (14)$$

Por otro lado, la ley del hiperesalamiento nos relaciona α con ν y la dimensión de la red d :

$$d\nu = 2 - \alpha \quad (15)$$

El hiperesalamiento es válido cuando la dimensión de la red es menor que la dimensión crítica. Para el caso del modelo de Ising, la dimension crítica es $d_c = 4$.

Teoría de tamaño finito

La teoría de tamaño finito describe cómo varían las propiedades de un sistema cuando modificamos su tamaño. Esta teoría es especialmente útil para sistemas correlacionados, donde al aumentar el tamaño del sistema se incrementen también los valores de las magnitudes en el punto crítico.

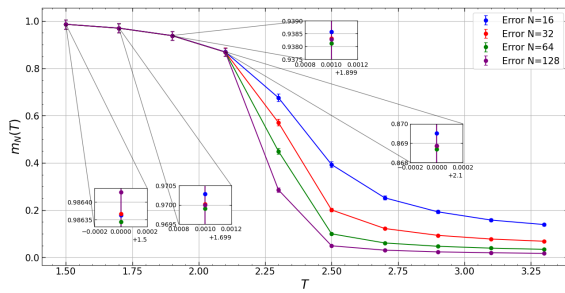
Empleando la teoría de tamaño finito podemos extrapolar sistemas finitos a sistemas de tamaño $N \rightarrow \infty$.

Sabiendo esto, analizaremos el comportamiento de la magnetización promedio, la energía media, el calor específico y la función de correlación para varias temperaturas en el rango $T \in [1,5, 3,5]$ y para diferentes tamaños $N = 16, 32, 64, 128$. A continuación, estimaremos el valor del punto crítico cuando $N \rightarrow \infty$ y obtendremos el valor de β y, finalmente, estudiaremos la función $f(i)$ respecto a T y a N y hallaremos el valor de la longitud de correlación y su exponente crítico haciendo uso de todo lo expuesto anteriormente.

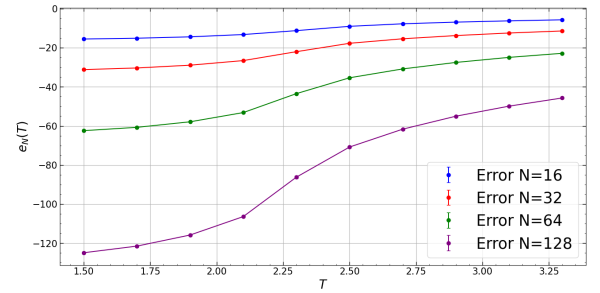
2. Resultados

2.1. Comportamiento de las magnitudes a diferentes T y N

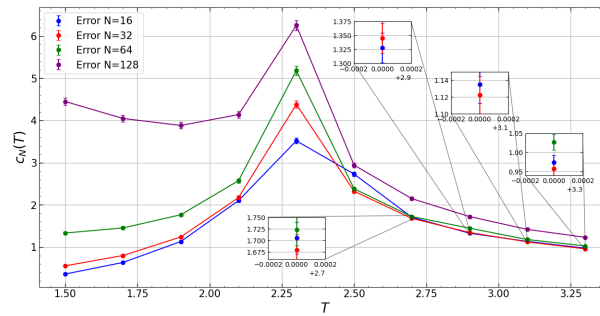
Mostramos a continuación las gráficas para la magnetización promedio, la energía media y el calor específico para tamaños de red $N = 16, 32, 64, 128$ y evaluadas a 10 temperaturas $T \in [1,5, 3,5]$ con un espaciado de 0.2 entre cada una:



(a) Magnetización promedio



(b) Energía media



(c) Calor específico

Empezaremos analizando el comportamiento de la magnetización promedio. Como podemos ver en su correspondiente gráfica, el valor de la magnetización para los cuatro tamaños de red es prácticamente idéntico para las cuatro primeras temperaturas evaluadas sin embargo, podemos ver que en torno a $T = 2,3$ se produce una caída brusca del valor de la magnetización y, a continuación, se puede apreciar una tendencia a un límite asintótico. A medida que aumentamos el tamaño de la red la caída es mayor y el límite asintótico es un valor cada vez mas cercano a 0.

Teóricamente, para temperaturas menores a la cual se produce la caída, la magnetización permanece

casi constante a valor 1 y, a partir de dicha temperatura, la magnetización es 0. Podemos ver que cuanto mayor es el tamaño de nuestra red más nos acercamos a este resultado.

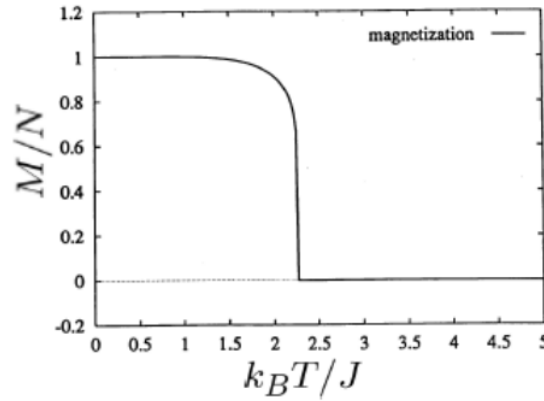


Figura 1: Magnetización teórica frente a la temperatura.

En el caso de la energía media tenemos una curva creciente que cambia su comportamiento a uno similar a una curva logarítmica para temperaturas mayores a $T = 2,3$. A medida que aumentamos el tamaño del sistema la diferencia entre la energía de la primera y última temperatura es mayor. También vemos que el valor de la energía es mayor (en valor absoluto) cuanto más grande es el sistema.

La curva teórica presenta el mismo comportamiento descrito para temperaturas mayores a $T = 2,3$. Podemos destacar que para temperaturas cercanas a 0 el valor de la energía es constante, no obstante, nuestra simulación solo contempla valores de temperatura entre 1,5 y 3,3, por lo que no podemos hacer una comparativa.

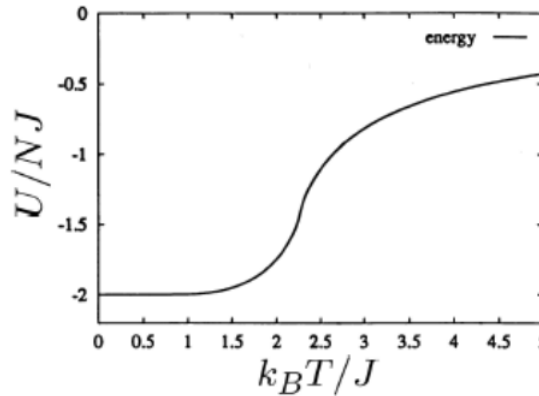


Figura 2: Energía teórica frente a la temperatura.

Por último, vemos que la curva del calor específico presenta algunas diferencias entre los diferentes N . Para los tres primeros tamaños el calor específico a temperatura $T = 1,5$ es bajo incluso cercano a 0 para las dos N más pequeñas, sin embargo, para $N = 128$ vemos que su valor es significativamente mayor provocando que la curva tenga otra forma con un mínimo cerca de $T = 1,9$. Por otro lado, vemos que todas las gráficas presentan un máximo en $T = 2,3$ y decrecen rápidamente, a excepción de $N = 16$, que presenta una caída menos pronunciada; tendiendo a un valor asintótico para temperaturas elevadas.

La curva teórica es 0 para temperaturas bajas y empieza a crecer a $T = 1$ hasta el máximo en $T = 2,3$ y decrece hasta un valor asintótico cercano a 0. Comparando con nuestros resultados vemos que la curva

con $N = 128$ para temperaturas bajas no se ajusta bien a la teórica y tampoco la curva con $N = 16$ para temperaturas altas debido a que su decrecimiento es más lento. Los dos tamaños restantes se ajustan bastante bien a la teoría, destacando la de $N = 32$ ya que para temperaturas bajas el valor del calor específico está más próximo a 0.

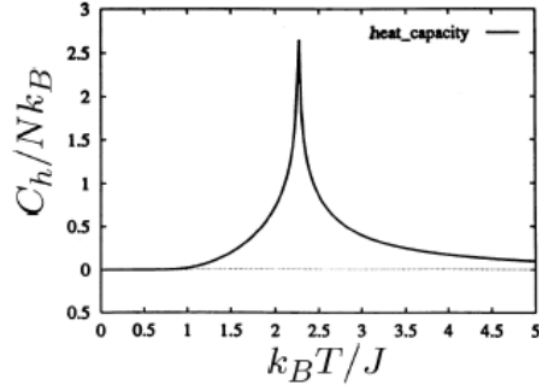


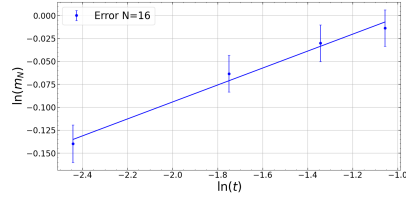
Figura 3: Calor específico teórico frente a la temperatura.

Para las tres magnitudes estudiadas se puede apreciar que el cambio en el comportamiento de éstas se produce cuando la temperatura del sistema es aproximadamente $T = 2,3$ independientemente del tamaño del sistema. Debido a esto, es razonable definir la temperatura crítica del sistema como $T_c = 2,3$. A esta temperatura el calor específico obtenido para cada sistema es:

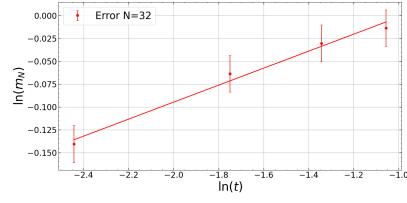
N	$c_N(T_c)$
16	$3,519 \pm 0,035$
32	$4,382 \pm 0,044$
64	$5,182 \pm 0,052$
128	$6,254 \pm 0,063$

Cuadro 1: Valor del calor específico en T_c para varios sistemas de varios tamaños.

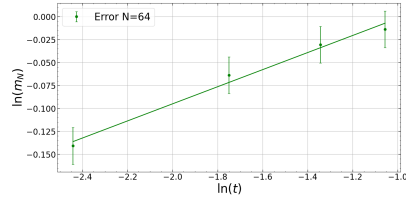
Sabemos que la magnetización se relaciona con la temperatura reducida a través de la ecuación (9). Tomando logaritmos a ambos lados obtenemos: $\ln(m_N) = \beta \ln(-t)$, por lo que podemos hacer una regresión lineal cuya pendiente sea el valor del exponente crítico β . Calculando la regresión para cada N obtenemos:



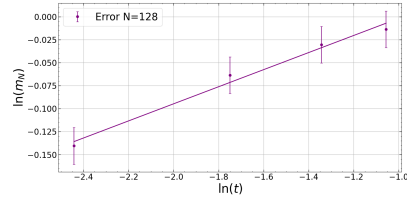
(a) Regresión N=16



(b) Regresión N=32



(c) Regresión N=64



(d) Regresión N=128

donde hemos separado las cuatro regresiones porque se superponían entre ellas en todos los puntos.

Las pendientes y los coeficientes de regresión obtenidos fueron los siguientes:

N	β	r
16	$0,0924 \pm 0,0080$	0,993
32	$0,0930 \pm 0,0080$	0,993
64	$0,0931 \pm 0,0079$	0,993
128	$0,0930 \pm 0,0080$	0,993

Cuadro 2: Valores de β y coeficientes de regresión lineal para cada N .

Haciendo una media ponderada obtenemos un valor medio para el exponente crítico: $\bar{\beta} = 0,0929 \pm 0,0040$. El valor teórico para este coeficiente es $\beta_{teorico} = \frac{1}{8} = 0,125$, que dista significativamente de nuestro resultado. El error relativo de nuestra medida es $\varepsilon = 25,7\%$

A continuación estudiaremos el comportamiento de la función de correlación para diferentes temperaturas y tamaños de red.

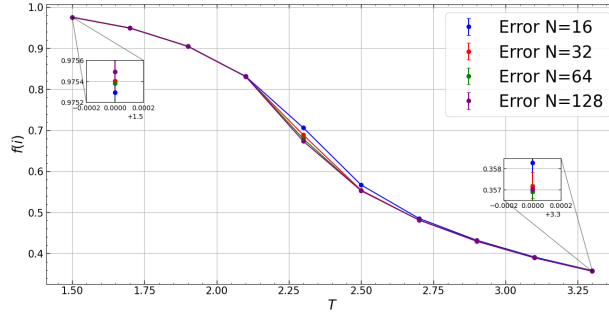


Figura 4: Función de correlación para varios N en función de la temperatura.

Podemos ver que para todas los tamaños del sistema obtenemos los mismos valores para la función de correlación a excepción de en el punto crítico donde a mayor tamaño de la red, menor el valor de la función.

Para calcular la longitud de correlación necesitaremos hallar primero el valor de su exponente crítico, ν , utilizando la ecuación (15), por lo que tendremos que calcular también el exponente crítico α .

Obtenemos α realizando un ajuste lineal tal y como hicimos para hallar β pero utilizando los datos para temperaturas mayores que la crítica porque se ajustan mejor a la curva teórica.

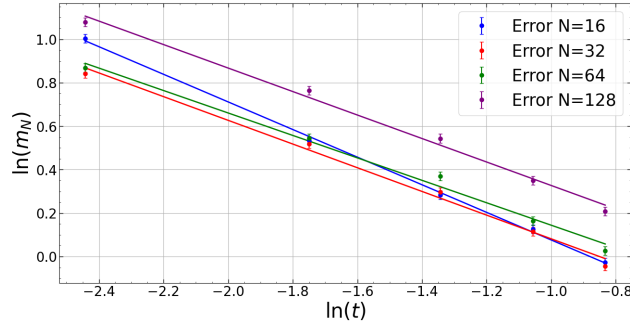


Figura 5: Ajuste lineal $\ln(c_N) = -\alpha \ln(t)$ para diferentes N.

Los valores obtenidos de cada regresión son los siguientes:

N	α	r
16	$0,635 \pm 0,013$	0.9994
32	$0,545 \pm 0,026$	0.997
64	$0,516 \pm 0,029$	0.995
128	$0,540 \pm 0,027$	0.996

Cuadro 3: Coeficientes críticos obtenidos en cada regresión y sus respectivos coeficientes de regresión lineal.

Calculando la media ponderada de α obtenemos su valor medio: $\bar{\alpha} = 0,594 \pm 0,010$. Utilizando el valor medio del exponente crítico α y suponiendo que se cumple que $\alpha' = \alpha$, como sucede teóricamente, obtenemos $\nu = 0,703 \pm 0,005$ y, finalmente ξ :

T	ξ
1.5	$1,8725 \pm 0,0094$
1.7	$2,221 \pm 0,011$
1.9	$2,826 \pm 0,014$
2.1	$4,266 \pm 0,021$
2.5	$4,266 \pm 0,021$
2.7	$2,826 \pm 0,014$
2.9	$2,2211 \pm 0,011$
3.1	$1,8725 \pm 0,0094$
3.3	$1,6401 \pm 0,0082$

Cuadro 4: Longitud de coherencia para cada temperatura.

3. Conclusiones

A continuación resumiremos los resultados que hemos ido obteniendo a lo largo de este estudio sobre el modelo de Ising.

En primer lugar, el comportamiento de la magnetización respecto de la temperatura se ajusta satisfactoriamente a la curva teórica, especialmente para los tamaños de red más grandes. El comportamiento de la curva teórica es razonable ya que para temperaturas bajas los espines del sistema poseen la misma orientación, sucediendo lo contrario para temperaturas altas y provocando que la magnetización tienda a 0 en este caso.

Para el caso de la energía media vemos que obtenemos curvas similares a la teórica para todos los tamaños del sistema. Además, podemos ver que a mayor N , mayor es la diferencia entre la energía final y inicial. Esto sucede porque hay mayor número de contribuciones a la energía, que disminuye (en valor absoluto) a medida que incrementamos la temperatura debido a que los espines estarán menos ligados.

Las curvas del calor específico difieren algo más de la teórica, especialmente para el caso de $N = 16$ y $N = 128$, para las que se aprecia una disminución más lenta de la capacidad calorífica para el primero y un comportamiento diferente para temperaturas bajas para $N = 128$.

Analizando el comportamiento general de estas gráficas vemos que a temperatura $T = 2,3$ se producen cambios en el comportamiento de las magnitudes anteriores, por lo que podemos suponer que esa es la temperatura crítica de nuestro modelo. Al no tener datos para temperaturas cercanas a $T = 2,3$ no podemos estimar con mayor precisión el punto crítico. Por otro lado, el valor teórico del punto crítico es $T = 2,269$, por lo que nuestra aproximación es bastante acertada.

El valor obtenido para el exponente crítico de la magnetización β ha sido: $\beta = 0,0929 \pm 0,0040$, mientras que el valor teórico es $\beta_{teorico} = 0,125$, por lo que nuestro resultado no es muy acertado. El error relativo de la medida fue $\varepsilon = 25,7\%$

El exponente crítico α lo hemos calculado para temperaturas superiores a la temperatura crítica porque se ajustaban mejor a la curva teórica. Pese a esto, el resultado obtenido, $\alpha = 0,594 \pm 0,010$ es significativamente mayor que el teórico, $\alpha_{teorico} = 0$. Por último, el resultado obtenido para el exponente crítico de la longitud de correlación fue $\nu = 0,703 \pm 0,005$, también muy diferente del teórico, $\nu_{teorico} = 1$, con un error relativo $\varepsilon = 0,29,7\%$.

Como hemos podido ver, los datos obtenidos para las diferentes magnitudes se ajustan de una manera satisfactoria a los modelos teóricos sin embargo, a la hora de calcular los exponentes críticos nuestros resultados difieren en gran medida de los teóricos.

4. Uso del superordenador

En esta sección explicaremos el uso del superordenador.

En primer lugar, hemos subido el código utilizado para calcular las diferentes magnitudes (magnetización promedio, energía, energía media, calor específico y la función de correlación) a diferentes temperaturas y tamaños de red a GitHub desde nuestro ordenador personal para poder ejecutarlo en el superordenador. Esto lo hemos hecho mediante Git Bash donde hemos introducido los siguientes comandos:

```
spiro@Rodrigo MINGW64 ~  
$ cd FisicaComputacional/  
  
spiro@Rodrigo MINGW64 ~/FisicaComputacional (main)  
$ git add *  
  
spiro@Rodrigo MINGW64 ~/FisicaComputacional (main)  
$ git commit -m "programa voluntario ising"
```

Figura 6: Comando para cambiar de directorio, git add y git commit.

```
spiro@Rodrigo MINGW64 ~/FisicaComputacional (main)  
$ git push
```

Figura 7: Comando git push.

A continuación, como estamos trabajando en Windows, utilizamos MobaXterm para conectarnos al superordenador vía ssh. Para ello, introducimos en la terminal ‘ssh cphys-***@joel.ugr.es’ y la clave de identificación. Con esto ya podremos trabajar en el superordenador.

Seguidamente, hacemos un ‘cd’ para cambiar a la carpeta sincronizada con el repositorio de GitHub y hacemos un ‘git pull’ para descargar el código en el superordenador. Ejecutamos el código utilizando los siguientes comandos:

```
cphys-rodrigo.andregonzalez@joel:~$ cd FisicaComputacional/Voluntario 1\ ising/  
cphys-rodrigo.andregonzalez@joel:~/FisicaComputacional/Voluntario 1 ising$ gsl-config --libs  
-L/usr/lib/x86_64-linux-gnu -lgsl -lgslcblas -lm  
cphys-rodrigo.andregonzalez@joel:~/FisicaComputacional/Voluntario 1 ising$ g++ voluntario1.cpp -o voluntario1.exe -L/usr/lib/x86_64-linux-gnu -lgsl -lgslcblas -lm  
cphys-rodrigo.andregonzalez@joel:~/FisicaComputacional/Voluntario 1 ising$ ./voluntario1.exe
```

Como nuestro programa necesitaba generar números aleatorios hemos utilizado el comando ‘gsl-config --libs’ para que la librería funcione. Además, como el programa tarda mucho en realizar los cálculos hemos utilizado el comando ‘tmux’ para que no se nos cerrase la sesión en el superordenador.

Para finalizar, subimos a GitHub los archivos que nos crea el programa siguiendo los pasos de las figuras (6) y (7) para poder descargarlos en nuestro ordenador personal y hacer en él el resto de cálculos que no requieren tanta memoria (gráficas, errores relativos...).

5. Referencias

- Marcia Vianey Bojórquez Avitia. Estudio de Transiciones de Fase en Redes con Interacciones de Largo Alcance. <https://ipicyt.repositorioinstitucional.mx/jspui/bitstream/1010/873/3/TMI-PICYTB6E72006.pdf>
- Xin-Zeng Wu, Di Li, Zheng Dai. MATH 505 Project: Ising model – Phase transition. <https://dornsife.usc.edu/assets/sites/406/docs/505b/Ising.phase.transition.pdf>
- Mark W. Zemansky, Richard H. Dittman. Calor y Termodinámica.