



Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación  
**Universidad Nacional de Córdoba**

# Física Computacional

## Modelo de Ising 2D

**Gastón Briozzo**

E-mail: gbriozzo@mi.unc.edu.ar

Fecha de entrega: jueves 27 de mayo del 2021

### Resumen

El objetivo de este trabajo es el estudio del modelo de Ising ferromagnético en dos dimensiones mediante simulaciones Monte Carlo y la implementación de generadores de números pseudoaleatorios.

Para esto, se construyeron sistemas de  $10 \times 10$ ,  $20 \times 20$  y  $40 \times 40$  spines, con condiciones de contorno periódicas y bajo un campo externo nulo, que se hicieron evolucionar mediante el algoritmo de Metropolis, estudiando su termalización en función del número de pasos Monte Carlo. Se estudió la energía, magnetización, calor específico, susceptibilidad magnética y cumulantes de Binder en función de la temperatura, con el objetivo de observar la transición de fase del sistema y estimar la temperatura y exponentes críticos del mismo. Además, se calcularon las curvas de autocorrelación para la energía y la magnetización en función del número de pasos Monte Carlo, estimando sus tiempos de correlación.

Se observó que los sistemas se encuentran completamente termalizados después de  $10^3$  pasos Monte Carlo. También se comprobó que, a temperaturas próximas a la crítica, las curvas de la energía, la magnetización y los cumulantes de Binder presentan sus mayores variaciones, mientras que el calor específico y la susceptibilidad magnética alcanzan sus valores máximos. Los tiempos de correlación encontrados no superan los 80 pasos Monte Carlo.

## 1. Introducción

El Modelo de Ising es una aproximación física propuesta para estudiar el comportamiento de materiales ferromagnéticos empleando las herramientas de la mecánica estadística y de la mecánica cuántica. Su principal ventaja se encuentra en que sus soluciones pueden obtenerse analíticamente, sin emplear métodos numéricos o aproximados.

Este modelo fue concebido originalmente por Wilhelm Lenz, como un problema para su alumno Ernst Ising, para demostrar que el sistema presentaba transiciones de fase. Sin embargo, al resolver el problema en una dimensión, Ising demostró que no existía tal transición. Tuvieron que pasar dos décadas hasta

que Lars Onsager demostrara que el sistema bidimensional, mucho más complejo, sí describía transiciones de fase.

El modelo consta de  $N$  partículas con spin colocadas en una matriz cuadrada. Dependiendo de las fluctuaciones térmicas del sistema y de su interacción con las partículas vecinas, el spin de cada partícula cambiara de orientación, pudiendo apuntar únicamente hacia arriba (*spin up*) o hacia abajo (*spin down*).

El hamiltoniano propuesto para este modelo puede escribirse como

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J \sigma_i \sigma_j \quad (1)$$

Aquí,  $\langle i,j \rangle$  denota la sumatoria sobre primeros vecinos,  $\sigma_i$  es el spin de la  $i$ -ésima partícula, el

cual solo puede tomar los valores  $\pm 1$ , y  $J$  es un factor de escala entre la interacción de los spines y la energía del sistema, normalmente provisto por la teoría.

Para determinar si un spin debe invertir su orientación o no (*flip*) de acuerdo a su interacción con el entorno y la temperatura, Nicholas Metropolis ideó el siguiente algoritmo, basándose en el método de rechazo de Von Neumann:

1. Calcular el Hamiltoniano inicial del sistema  $H_i$ .
2. Seleccionar el spin  $i$ -ésimo, fliparlo según  $\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$  y calcular el Hamiltoniano resultante  $H_f$ .
3. Calcular la diferencia  $\Delta H = H_f - H_i$  entre Hamiltonianos.
4. Si  $\Delta H < 0$  aceptar el nuevo estado.
5. Si  $\Delta H > 0$  calcular el cociente entre las probabilidades del estado final e inicial  $R = \exp\left(-\frac{\Delta H}{k_B T}\right)$  y generar un número al azar  $x$  entre 0 y 1, con distribución de probabilidad homogénea.
  - Si  $R > x$  aceptar el nuevo estado.
  - Si  $R < x$  rechazar el nuevo estado.

Se denomina paso de Monte Carlo al procedimiento de aplicar el algoritmo de Metropolis una vez a cada spin del sistema.

Una cadena de Márkov es un proceso estocástico discreto en el que la probabilidad de que ocurra un evento depende solamente del estado inmediatamente anterior del sistema. Esto puede expresarse como

$$p(x_n | x_{n-1}, \dots, x_0) = p(x_n | x_{n-1}) \quad (2)$$

donde  $p(x_i | x_j)$  denota la probabilidad de que suceda el evento  $x_i$  dado el evento  $x_j$ . La evolución del modelo de Ising propuesto anteriormente resulta ser un proceso markoviano.

La energía  $E$  del sistema se define como el valor de expectación del Hamiltoniano, mientras que la magnetización  $M$  corresponde al valor de expectación del módulo de la sumatoria de todos los spines del sistema

$$E = \langle H \rangle \quad (3)$$

$$M = \langle |\mu| \rangle, \quad \mu = \sum_i \sigma_i \quad (4)$$

También podemos describir el calor específico  $c_v$  y la susceptibilidad magnética  $\chi$  del sistema como

$$c_v = \frac{k_B \beta^2}{V} (\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2) \quad (5)$$

$$\chi = \frac{\beta}{V} (\langle \mu^2 \rangle - \langle |\mu| \rangle^2) \quad (6)$$

donde  $k_B$  es la constante de Boltzmann,  $\beta = 1/k_B T$  y  $V$  es el tamaño del sistema.

Nótese que tanto el calor específico como la susceptibilidad magnética son directamente proporcionales a los cuadrados de las varianzas de la energía y la magnetización respectivamente.

También introducimos el cumulante de Binder  $U_L$  como un parámetro de utilidad en el estudio de las transiciones de fase, definiéndose el mismo como sigue

$$U_L = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle_L}{3 \langle M^2 \rangle_L^2} \quad (7)$$

donde  $L$  denota el tamaño del sistema. Al graficarlo en función de la temperatura, el punto donde las curvas correspondientes a distintos tamaños se cortan corresponde a la temperatura crítica de transición de fase en el límite termodinámico.

Por último, introducimos la función autocorrelación  $A$  para un dado observable  $O$  en función de los pasos de Monte Carlo como

$$A(k) = \frac{\langle O_0 O_k \rangle - \langle O_0 \rangle^2}{\langle O_0^2 \rangle - \langle O_0 \rangle^2} \quad (8)$$

Donde  $k$  es el número de pasos de Monte Carlo dados desde que el sistema termalizó.

## 2. Procedimiento Numérico

Antes que nada, se procedió a adimensionalizar todas las ecuaciones involucradas de la siguiente forma:

$$T^* = \frac{k_B T}{J}, \quad E^* = \frac{E}{J}, \quad c_v^* = \frac{c_v}{k_B}, \quad \chi^* = J \chi \quad (9)$$

De ahora en adelante, cada vez que mencionemos algún observable del sistema, nos estaremos refiriendo a los valores adimensionalizados recién definidos.

Se implementó una simulación Monte Carlo para el modelo de Ising ferromagnético en dos dimensiones, con campo externo nulo y condiciones de contorno periódicas. Se trabajó en simultaneo con varios sistemas de distintos tamaños, siendo estos de  $10 \times 10$ ,  $20 \times 20$  y  $40 \times 40$  spines cada uno.

## 2.a Dependencia con los pasos Monte Carlo

En primer lugar, para el sistema de  $40 \times 40$  spines, se calculó la energía y la magnetización en función de los pasos de Monte Carlo, hasta un total de  $10^4$  pasos, para el siguiente set de temperaturas:

$$\begin{aligned} T_1 &= 2.0000 \\ T_2 &= 2.2200 \\ T_3 &= 2.2676 \\ T_4 &= 2.2682 \\ T_5 &= 2.2692 \\ T_6 &= 2.2702 \\ T_7 &= 2.2708 \\ T_8 &= 2.5000 \\ T_9 &= 3.3000 \end{aligned} \quad (10)$$

Los valores de expectación se obtuvieron promediando para cada paso sobre un total de  $10^3$  simulaciones independientes. Este procedimiento se realizó tanto para la condición inicial  $T_0 \rightarrow 0$ , con todos los spines alineados, como para  $T_0 \rightarrow \infty$ , con todos los spines orientados al azar en el instante inicial.

## 2.b Dependencia con la temperatura

A continuación, se calcularon en función de la temperatura la energía, la magnetización, el calor específico y la susceptibilidad magnética para sistemas de spines de los tres tamaños mencionados.

Los promedios se realizaron sobre un total de  $10^5$  mediciones independientes. Para esto, a una dada temperatura y partiendo de un estado inicial aleatorio, se dejó evolucionar a cada sistema un número  $n_{desc} = 10^3$  de pasos de Monte Carlo que fueron descartados, lo suficiente para asegurar que los sistemas alcanzaran el equilibrio termodinámico. Luego, entre medición y medición, se descartaron otros  $n_p = 10^2$  pasos de Monte Carlo para minimizar la correlación entre estas.

Las temperaturas a evaluar se seleccionaron según la siguiente distribución, para todo  $i$  entero entre 0 y 500:

$$i = 0, \dots, 500, \quad x_i = \frac{i}{500} \\ a = 12.556, \quad b = -21.297, \quad c = 12.041$$

$$T_i = ax_i^3 + bx_i^2 + cx_i \quad (11)$$

Esta distribución asegura una mayor densidad de puntos a evaluar próximos a la temperatura crítica  $T_c = 2.2692$ , mientras que la imagen pertenece al intervalo  $[0, 3.3]$ .

## 2.c Histograma

Se realizaron histogramas sobre los valores de la magnetización, para el sistema de  $40 \times 40$  spines, para temperaturas por debajo y por encima de la temperatura crítica, siendo estas  $T_< = 2.0$  y  $T_> = 2.5$ .

Para cada temperatura y partiendo de un estado inicial aleatorio, se descartaron los primeros  $n_{desc} = 10^3$  de pasos de Monte Carlo, mientras que entre medición y medición se descartaron otros  $n_p = 10^2$  pasos.

Se realizaron un total de  $10^6$  mediciones de la magnetización para cada temperatura, los cuales fueron comparados para realizar los histogramas, de  $10^2$  bins cada uno.

## 2.d Cumulantes de Binder

Se calcularon los cumulantes de Binder en función de la temperatura para sistemas de los tres tamaños mencionados.

Para obtener los valores de expectación, se promediaron un total de  $10^4$  simulaciones independientes. Nuevamente, para cada temperatura y partiendo de un estado inicial aleatorio, se descartaron los primeros  $n_{desc} = 10^3$  de pasos de Monte Carlo, mientras que entre medición y medición se descartaron otros  $n_p = 10^2$  pasos.

Se empleó para esto una distribución de temperaturas similar a la descrita en (11), reduciendo el número de puntos a evaluar a 101, pertenecientes al mismo intervalo.

A partir de las curvas obtenidas se estimó la temperatura crítica del sistema, así como los exponentes críticos de la magnetización.

## 2.e Autocorrelación

Para el set de temperaturas descrito en (10) se calculó la correlación en la energía y la magnetización de los sistemas de  $40 \times 40$  spines, según la Ecuación 8.

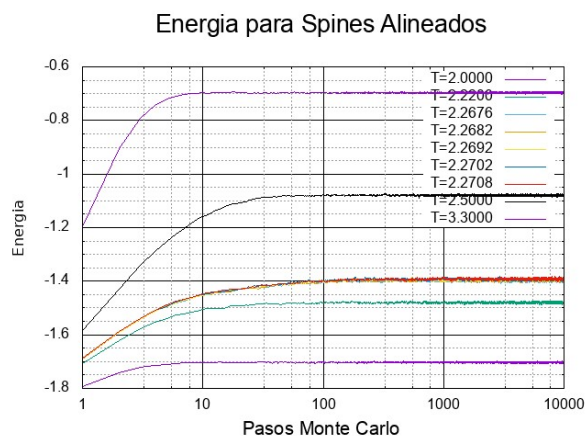
Para cada simulación, a una dada temperatura y partiendo de un estado inicial aleatorio, se descartaron los primeros  $n_{desc} = 10^3$  de pasos de Monte Carlo. Luego se tomó al estado siguiente como el estado inicial del sistema y se prosiguió a medir la correlación en función del número de pasos de Monte Carlo dados desde dicho instante, hasta realizar un total de  $10^3$  pasos. Para obtener los valores de expectación, se promediaron un total de  $10^6$  simulaciones independientes. A partir de las curvas obtenidas se estimaron también los tiempos de correlación de cada sistema.

## 3. Resultados y discusión

### 3.a Dependencia con los pasos Monte Carlo

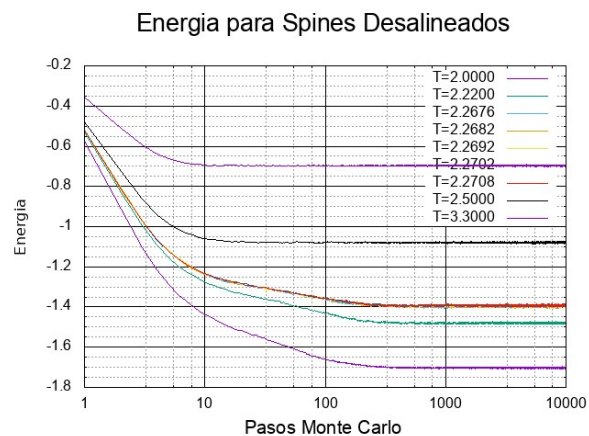
Las curvas obtenidas para la energía y la magnetización en función de los pasos de Monte Carlo se muestran en las Figuras 1 a 4.

En la Figura 1 podemos observar que, para las temperaturas más alejadas de la crítica, los sistemas tardan tan solo 10 pasos en termalizar, mientras que las temperaturas más próximas a la crítica tardan alrededor de 200. Por otro lado, en la Figura 2 vemos que son los sistemas con menores temperaturas los que tardan más en

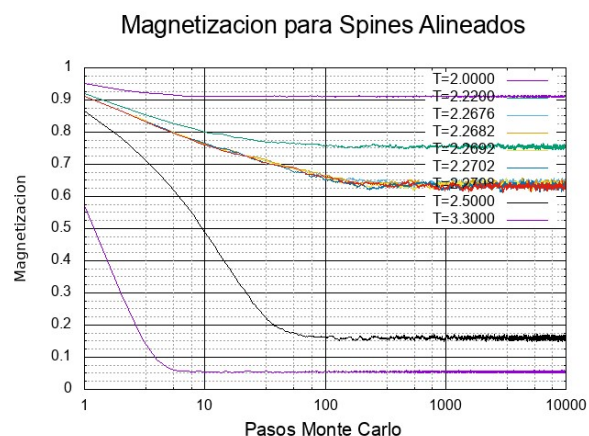


**Figura 1:** Energía del sistema  $40 \times 40$  en función de los pasos Monte Carlo iniciando con los spines alineados. Promedio realizado sobre  $10^3$  simulaciones independientes.

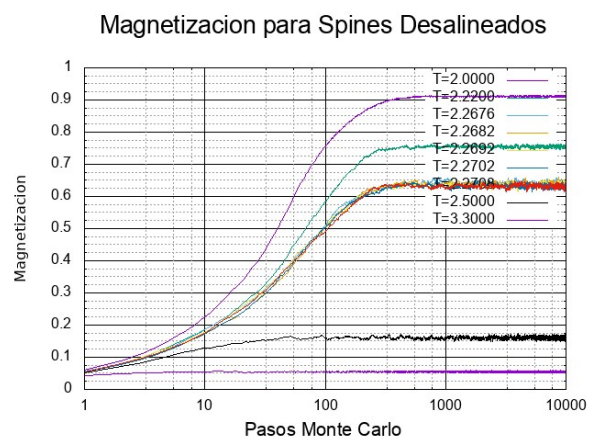
UNC - FaMAF



**Figura 2:** Energía del sistema  $40 \times 40$  en función de los pasos Monte Carlo iniciando con los spines desalineados. Promedio realizado sobre  $10^3$  simulaciones independientes.



**Figura 3:** Magnetización del sistema  $40 \times 40$  en función de los pasos Monte Carlo iniciando con los spines alineados. Promedio realizado sobre  $10^3$  simulaciones independientes.



**Figura 4:** Magnetización del sistema  $40 \times 40$  en función de los pasos Monte Carlo iniciando con los spines desalineados. Promedio realizado sobre  $10^3$  simulaciones independientes.

Física Computacional



termalizar, alcanzando el equilibrio después de unos 500 pasos, mientras que los sistemas con mayores temperaturas alcanzan el equilibrio después de unos 20 pasos.

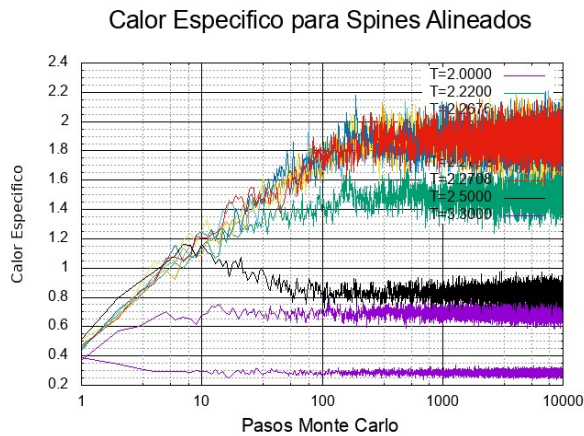
El mismo comportamiento se repite para la magnetización. Partiendo con todos los spines alineados, las temperaturas lejanas a la crítica termalizan más rápido (10 pasos) que las próximas (200 pasos), mientras que al iniciar con todos los spines desalineados más se tarda en alcanzar el equilibrio mientras menor sea la temperatura (20 a 1000 pasos).

Recordemos que tener todos los spines alineados es equivalente a estar a temperatura nula  $T = 0$ . El hecho de que, partiendo desde este estado, sean los sistemas con temperaturas próximas a la crítica los que tardan más en encontrar el equilibrio puede deberse a que estos oscilan entre las distintas fases, siendo más sensibles a las perturbaciones.

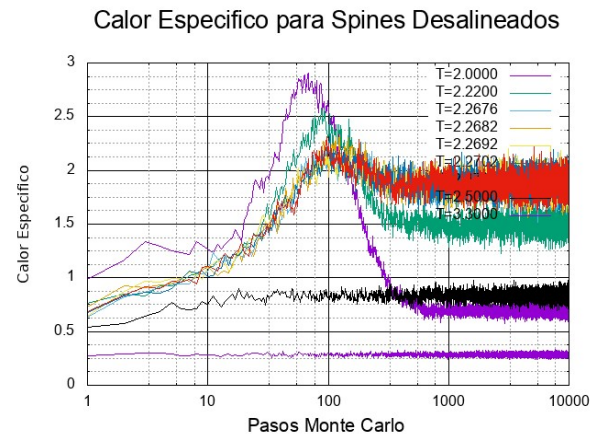
Por otro lado, dado que tener todos los spines distribuidos de forma aleatoria equivale a una temperatura tendiendo a infinito  $T \rightarrow \infty$ , tiene sentido que al iniciar en este estado los sistemas con temperaturas altas lleguen pronto al equilibrio, mientras que los de temperaturas más bajas tardan más en termalizar.

A su vez, siguiendo el mismo procedimiento se realizaron idénticas mediciones para el calor específico y la susceptibilidad magnética, obteniéndose las Figuras 5 a 8.

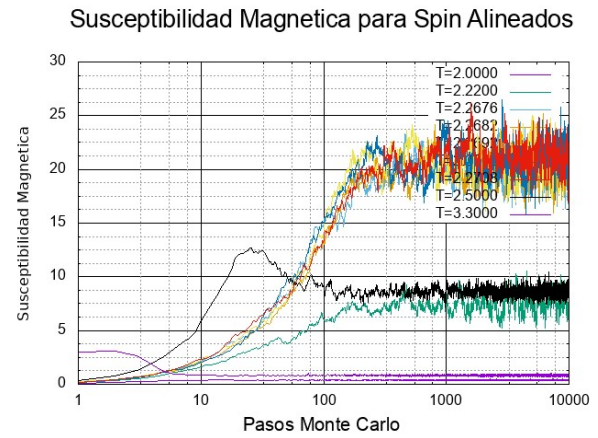
Igual que para la energía y la magnetización, observamos que, partiendo de  $T = 0$ , son los sistemas con temperaturas más próximas a la



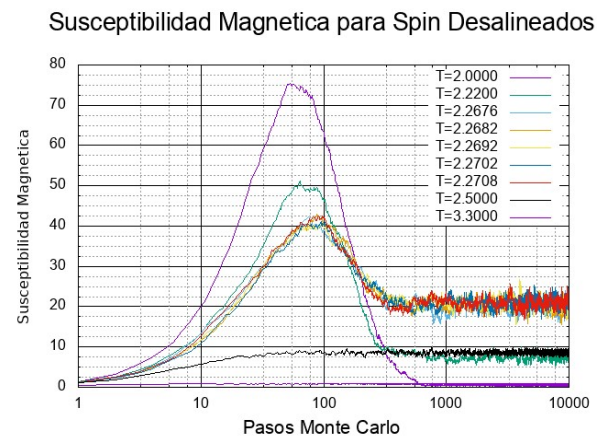
**Figura 5:** Calor específico del sistema  $40 \times 40$  en función de los pasos Monte Carlo iniciando con los spines alineados. Promedio realizado sobre  $10^3$  simulaciones independientes.



**Figura 6:** Calor específico del sistema  $40 \times 40$  en función de los pasos Monte Carlo iniciando con los spines desalineados. Promedio realizado sobre  $10^3$  simulaciones independientes.



**Figura 7:** Susceptibilidad magnética del sistema  $40 \times 40$  en función de los pasos Monte Carlo iniciando con los spines alineados. Promedio realizado sobre  $10^3$  simulaciones independientes.



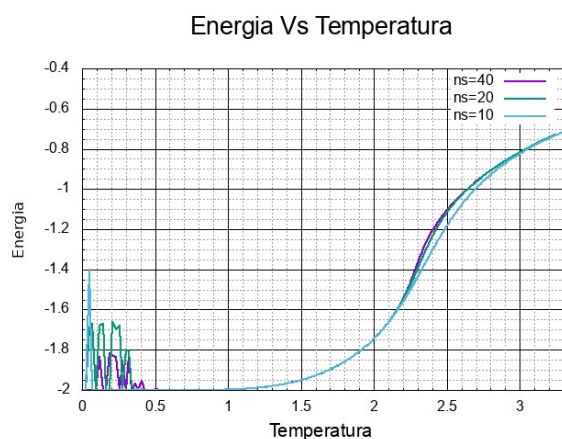
**Figura 8:** Susceptibilidad magnética del sistema  $40 \times 40$  en función de los pasos Monte Carlo iniciando con los spines desalineados. Promedio realizado sobre  $10^3$  simulaciones independientes.

crítica los que tardan más en termalizar, mientras que iniciando con  $T \rightarrow \infty$ , más se tarda en alcanzar el equilibrio mientras menor sea la temperatura del sistema. Supondremos que los motivos de esto son los mismos que los expuestos para la energía y la magnetización.

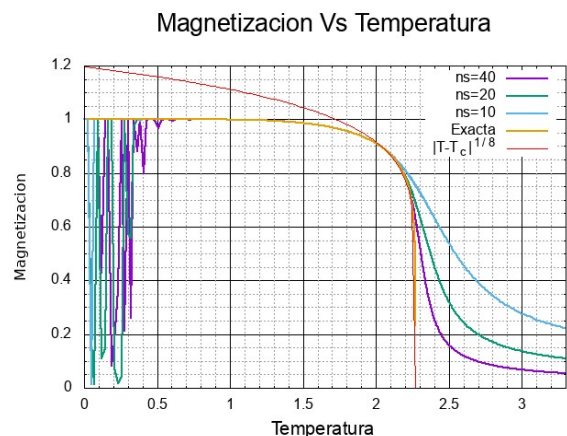
Además, en las Figuras 5 a 8 podemos hacer otras observaciones. En primer lugar, notamos que tanto el calor específico como la susceptibilidad magnética, una vez termalizado el sistema, alcanzan valores máximos para temperaturas próximas a la crítica, mientras que al alejarnos de esta sus valores decrecen. Esto es un claro indicio de la transición de fase del sistema. Por otro lado, notamos que estas mediciones presentan una varianza mucho mayor a las observadas anteriormente, lo que sugiere una mayor sensibilidad por parte de estos valores ante perturbaciones del sistema. Finalmente, señalamos que, al iniciar con  $T = 0$ , los sistemas a altas temperaturas describen una oscilación subamortiguada, creciendo rápidamente hasta alcanzar un valor máximo para después decaer al valor de equilibrio. Iniciando con  $T \rightarrow \infty$  sucede el mismo fenómeno, pero para los sistemas a menor temperatura.

### 3.b Dependencia con la temperatura

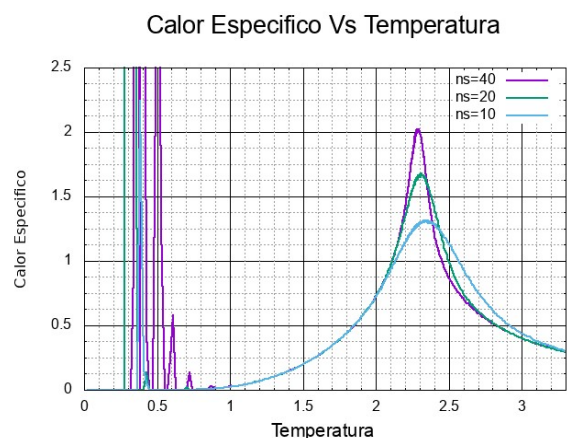
Las curvas obtenidas para la energía, la magnetización, el calor específico y la susceptibilidad magnética en función de la temperatura se muestran en las Figuras 9 a 12 respectivamente, para sistemas de los distintos tamaños empleados.



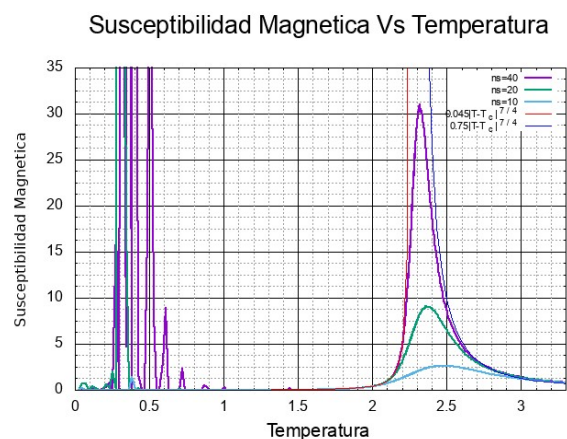
**Figura 9:** Energía en función de la temperatura. Promedio realizado sobre  $10^6$  mediciones, tomadas cada  $10^2$  pasos de Monte Carlo, después de descartar un transitorio de  $10^3$  pasos.



**Figura 10:** Magnetización en función de la temperatura. Promedio realizado sobre  $10^6$  mediciones, tomadas cada  $10^2$  pasos de Monte Carlo, después de descartar un transitorio de  $10^3$  pasos.



**Figura 11:** Calor específico en función de la temperatura. Promedio realizado sobre  $10^6$  mediciones, tomadas cada  $10^2$  pasos de Monte Carlo, después de descartar un transitorio de  $10^3$  pasos.



**Figura 12:** Susceptibilidad magnética en función de la temperatura. Promedio realizado sobre  $10^6$  mediciones, tomadas cada  $10^2$  pasos de Monte Carlo, después de descartar un transitorio de  $10^3$  pasos.

Lo primero que observamos en las 4 figuras es que, para temperaturas menores a 1, todas las curvas presentan fluctuaciones erráticas no predichas por la teoría. Para el calor específico y la susceptibilidad magnética estas fluctuaciones llegan a ser incluso órdenes de magnitud mayores a los valores mostrados en las figuras. Esto nos sugiere que, a bajas temperaturas, los sistemas se vuelven sumamente inestables, por lo que los observables presentan varianzas que podrían considerarse exageradas. Otra explicación, menos probable, sería la existencia de otras transiciones de fase a bajas temperaturas, aunque no contamos con información suficiente para apoyar o desmentir esto.

En la *Figura 9* vemos que las tres curvas de la energía presentan puntos de inflexión al aproximarnos a la temperatura crítica, donde las pendientes de estas alcanzan su valor máximo. Notamos además que los valores de  $T$  donde se dan estos puntos de inflexión sobreestiman a la temperatura crítica, pero se aproximan mejor a esta a medida que el tamaño del sistema aumenta. Cerca de esta temperatura, las tres curvas se separan, mientras que al alejarnos de esta parecen converger. Nuevamente, esto es consecuencia de la transición de fase, sugiriendo una temperatura crítica próxima a  $T = 2.3$ . Por otro lado, vemos que, cuando la temperatura tiende a cero, el valor de la energía presentado por los tres sistemas coincide con el límite teórico, correspondiente a tener todos los spines alineados, es decir, a una energía por spin de  $-2$ .

Algo similar ocurre con resultados obtenidos para la magnetización. En la *Figura 10* notamos que las tres curvas presentan puntos de inflexión para temperaturas apenas por encima de  $T_c$ , de forma tal que la temperatura a la cual se produzca el punto de inflexión será más próxima a la crítica mientras mayor sea el tamaño del sistema. Vemos además que, para temperaturas menores a  $T_c$ , las tres curvas coinciden con la predicción teórica para un sistema de tamaño termodinámico ( $n \rightarrow \infty$ ), resultando en una magnetización que tiende exponencialmente a 1 a medida que decrece  $T$ . Nótese además que, en la vecindad de  $T_c$ , para temperaturas menores a esta, la curva teórica es correctamente descrita por el exponente crítico  $\beta = 1/8$ . Además, las curvas obtenidas son mejor descritas por dicho exponente mientras mayor sea el tamaño del sistema. Por otro lado, para temperaturas

mayores a la crítica, la magnetización es menor mientras mayor sea el tamaño del sistema, aproximándose más a su valor teórico 0, sugiriendo que este se alcanzará para un sistema de tamaño termodinámico.

En la *Figura 11* observamos que las temperaturas a las cuales ocurren los máximos de cada curva se aproximan más a  $T_c$  a medida que aumenta el tamaño del sistema, sugiriendo un valor para ésta próximo a  $T = 2.25$ . Del mismo modo, los picos obtenidos se vuelven más altos y estrechos a medida que crece el número de spines. Notamos también que, además de las irregularidades ya mencionadas para bajas temperaturas, el calor específico parece ir a cero al alejarnos de  $T_c$ . Estas observaciones sugieren que, en el límite termodinámico, la curva del calor específico podría presentar un perfil similar al de una delta de Dirac centrada en  $T_c$ , lo que evidencia nuevamente la existencia de una transición de fase en dicho punto.

Lo mismo sucede en la *Figura 12* con las curvas obtenidas para la susceptibilidad magnética, aunque de una forma un poco más exagerada. Aquí vemos además que, en algún entorno próximo a  $T_c$ , las curvas parecen aproximarse a la descripción realizada por el exponente crítico  $\gamma = 7/4$  a medida que aumentamos el tamaño del sistema.

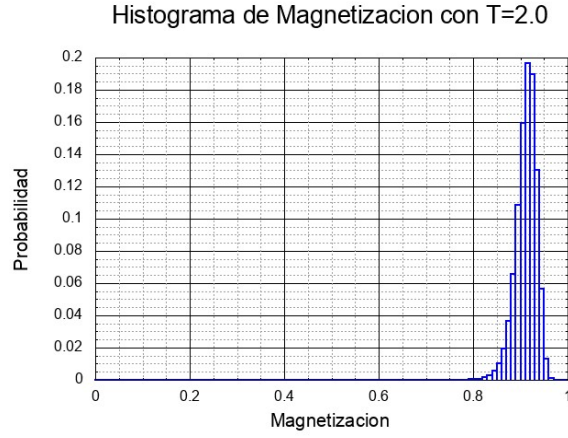
En general, observamos que los resultados se ajustan mejor a la predicción teórica mientras mayor es el tamaño del sistema, lo que nos induce a pensar que, en el límite termodinámico, estos deberían coincidir, respaldando de esta forma el marco teórico.

### 3.c Histograma

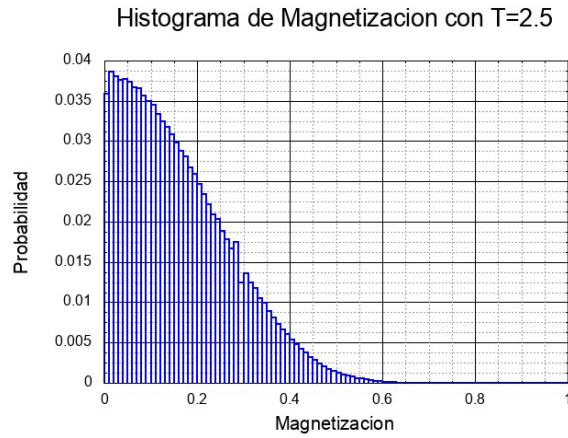
Los histogramas obtenidos para la magnetización, a temperaturas  $T_< = 2.0$  y  $T_> = 2.5$ , se muestran en las *Figuras 13* y *14* respectivamente, para el sistema  $40 \times 40$ .

Lo primero que podemos notar en estas figuras es la diferencia entre las varianzas de la magnetización para ambas temperaturas. Mientras que, para  $T_< = 2.0$ , el histograma presenta una distribución bien centralizada con poca varianza, para  $T_> = 2.5$  obtenemos una distribución mucho más desparramada, con una varianza mucho mayor. Por otro lado, ambas distribuciones presentan el perfil gaussiano que cabe esperarse de un muestreo aleatorio.





**Figura 13:** Histograma de magnetización a  $T = 2.0$ , comparando  $10^6$  mediciones tomadas cada  $10^2$  pasos Monte Carlo, después de descartar un transitorio de  $10^3$  pasos, con  $10^2$  bins de ancho  $10^{-2}$ .



**Figura 14:** Histograma de magnetización a  $T = 2.5$ , comparando  $10^6$  mediciones tomadas cada  $10^2$  pasos Monte Carlo, después de descartar un transitorio de  $10^3$  pasos, con  $10^2$  bins de ancho  $10^{-2}$ .

Podemos comprobar además que estas gráficas se condicen con los resultados obtenidos anteriormente, en las Figuras 7 y 8, en donde observamos que, para temperaturas menores a  $T_c$ , las varianzas obtenidas resultaban menores que para temperaturas mayores (recordemos que la varianza de la magnetización es directamente proporcional a la raíz cuadrada de la susceptibilidad magnética por la temperatura del sistema). Esto mismo se ve en las Figuras 3 y 4, donde la varianza se corresponde con lo errático o estable de la curva. Además, los valores para  $M$  obtenidos en todas estas gráficas coinciden para las temperaturas mencionadas, concordando también con la Figura 10.

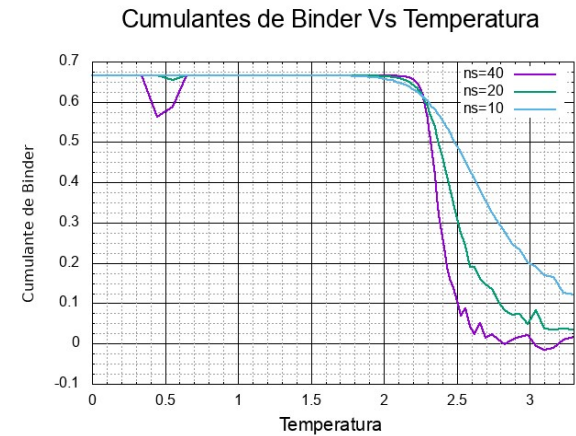
Aclaremos que, en todo momento, hemos trabajado sobre el módulo de la magnetización para facilitar las mediciones, pero es de esperarse

que los resultados obtenidos sean simétricos alrededor de  $M = 0$ . Esto se evidencia al considerar la simetría del Hamiltoniano respecto a la orientación de los spines, de modo que estados con orientaciones invertidas resultan equivalentes. De esta forma, la orientación positiva o negativa de los spines resulta arbitraria, por lo que podemos afirmar que la distribución obtenida para  $T > T_c$  está centrada en  $M = 0$ , tal como predice la teoría. Sin embargo, dado que los promedios han sido realizados sobre el módulo de la magnetización, es perfectamente justificable que éste resulte mayor a cero, tal y como sucede en las Figuras 3, 4 y 10.

Si bien trabajar con el valor real de la magnetización, y no con su módulo, nos hubiera dado una magnetización nula para  $T > T_c$ , también nos hubiera limitado a promediar sobre tiempos menores al tiempo de ergodicidad del sistema, restando precisión a las mediciones.

### 3.d Cumulantes de Binder

La curva obtenida para los cumulantes de Binder en función de la temperatura, para sistemas de los distintos tamaños trabajados, se muestran en la Figura 15.



**Figura 15:** Cumulantes de Binder en función de la temperatura. Promedio realizado sobre  $10^4$  mediciones, tomadas cada  $10^2$  pasos de Monte Carlo, después de descartar un transitorio de  $10^3$  pasos.

Igual que en las Figuras 9 a 12, notamos que existen ciertas irregularidades en los gráficos para  $T < 1$ . Una vez superadas estas fluctuaciones, los cumulantes se estabilizan en un valor constante, coincidiendo para los tres sistemas. Al aproximarnos a la temperatura crítica, las tres curvas vuelven a separarse,



cruzándose de nuevo y por última vez al alcanzar la temperatura crítica, estimada aquí en  $T = 2.27$ . Después de esto, parecería que el valor de los cumulantes decae a cero, volviéndose las curvas más erráticas y estocásticas a medida que la temperatura aumenta.

Estudiando la *Figura 15* notamos que, a medida que incrementa el tamaño del sistema, más abrupto se vuelve el salto en la curva del cumulate. Ésta se aproxima a una sigmoide, de modo que, en el límite termodinámico, debería coincidir con la función escalón centrada en  $T_c$ . De esta forma, para temperaturas superiores a  $T_c$ ,  $\langle M^4 \rangle_\infty = 3\langle M^2 \rangle_\infty^2$ . Al mismo tiempo, para temperaturas menores a  $T_c$ , la relación entre ambos valores de expectación debería ser una constante.

### 3.e Autocorrelación

Las curvas obtenidas para la autocorrelación de la energía y magnetización en función del número de pasos de Monte Carlo se muestran en las *Figuras 16* y *17* respectivamente, para el set de temperaturas descrito en (10).

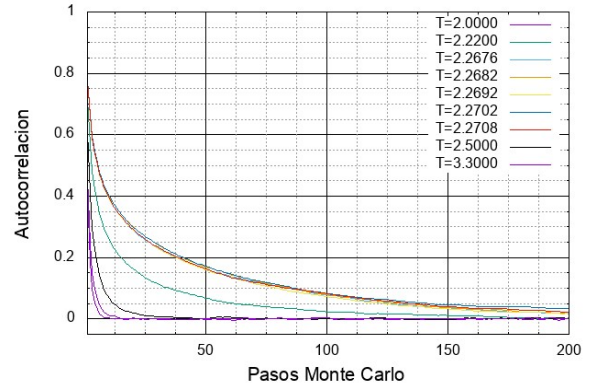
En ambas figuras, observamos que la autocorrelación parte de valores cercanos a 1 y decae al aumentar los pasos Monte Carlo, realizando pequeñas oscilaciones estocásticas alrededor de un valor que va exponencialmente a cero, tal y como cabe esperarse. También notamos que los sistemas con temperaturas más próximas a  $T_c$  tienen una mayor autocorrelación que aquellos con temperaturas alejadas de esta. Una vez más, esto es un indicio de que algún fenómeno crítico está sucediendo alrededor de dicha temperatura.

Notamos además que la autocorrelación en la energía resulta menor que la obtenida para la magnetización. Esto podría estar relacionado con las varianzas de dichas cantidades, y nos indica que la magnetización tiene una relación mucho más fuerte con sus valores a tiempos anteriores que la energía.

Los tiempos de correlación encontrados oscilan entre apenas un paso Monte Carlo para las temperaturas más lejanas a  $T_c$ , tanto para la energía como para la magnetización, hasta los 78 pasos para la magnetización a  $T = T_c$ .

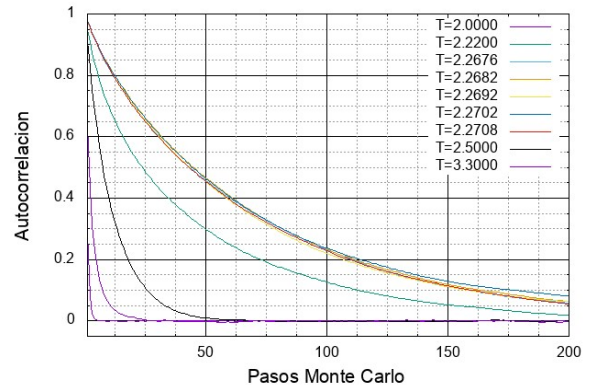
Las curvas obtenidas para estimas los tiempos de correlación se incluyen en el link drive adjunto a la entrega de este informe.

Autocorrelacion en la Energia



**Figura 16:** Autocorrelación en la energía en función de los pasos de Monte Carlo para sistemas a distintas temperaturas. Promedio realizado sobre  $10^6$  realizaciones independientes.

Autocorrelacion en la Magnetizacion



**Figura 17:** Autocorrelación en la magnetización en función de los pasos de Monte Carlo para sistemas a distintas temperaturas. Promedio realizado sobre  $10^6$  realizaciones independientes.

## 4. Apéndice

### 4.1 Sobre los errores

A partir de las *Ecuaciones 5* y *6*, y considerando las normalizaciones introducidas al principio de la *Sección 2*, podemos deducir las siguientes fórmulas para los errores en la energía  $E_E$  y la magnetización  $E_M$ :

$$E_E = \frac{1}{\sqrt{N-1}} \sqrt{\frac{T^2}{V} c_v} \quad (12)$$

$$E_M = \frac{1}{\sqrt{N-1}} \sqrt{\frac{T}{V} \chi} \quad (13)$$

Aquí,  $N$  es el número de mediciones realizadas.

De estas ecuaciones podemos estimar los errores cometidos anteriormente. Para la *Sección* 3.a, suponiendo el peor escenario posible, el error cometido para las energías queda acotado superiormente por el valor  $E_{Emax}$  expresado a continuación, mientras que el error para la magnetización es acotado a su vez por  $E_{Mmax}$ .

$$E_{Emax} = 4.37 \cdot 10^{-3}$$

$$E_{Mmax} = 1.24 \cdot 10^{-2}$$

Por su parte, para la *Sección* 3.b obtenemos:

$$E_{Emax} = 4.55 \cdot 10^{-4}$$

$$E_{Mmax} = 1.01 \cdot 10^{-3}$$

Dado que estos errores son, como mucho, dos órdenes de magnitud menores al tamaño de los gráficos mostrados, y considerando que las fluctuaciones mismas que presentan las curvas dan una buena idea de cuál es la precisión de las mediciones, se decidió no incluirlos en las figuras.

Si consideramos que en todas las simulaciones hemos empleado parámetros similares, sumado al hecho de que todas las figuras la densidad de puntos evaluados es muy alta, mostrando mediciones para cada paso Monte Carlo o valores muy próximos de  $T$ , y notando además que las fluctuaciones estocásticas que presentan las curvas ya dan de por sí una buena idea de cuál es la precisión de las mismas, concluimos: El error de cada medición, o bien es demasiado pequeño para ser apreciable en los gráficos, o bien los saturaría mostrando valores que son deducibles de las fluctuaciones estocásticas de las mismas curvas.

Por este motivo se decidió no incluir barras de error o curvas de errores en los gráficos de este informe

#### 4.II Sobre la medición de la magnetización

Como dijimos anteriormente, y como puede apreciarse en la *Ecuación* 4, en todo momento trabajamos sobre el módulo de la magnetización, no sobre su valor real. Esta decisión nos permitió promediar sobre un gran número de pasos Monte Carlo, logrando curvas sumamente suaves y precisas para temperaturas menores a  $T_c$ .

Si bien perdimos los resultados para  $M < 0$ , estos pueden recuperarse considerando las

simetrías que hemos impuesto alrededor de  $M = 0$ , tanto en el Hamiltoniano como en los programas numéricos. Al mismo tiempo, los histogramas para  $T > T_c$  muestran que, asumiendo la simetría mencionada, las distribuciones de la magnetización se centran en  $M = 0$ , como debe ser.

Concluimos que, sin perder generalidad, conseguimos una mayor precisión de esta forma.

## 5. Conclusiones

En general, destacamos que todos los observables de los sistemas presentan comportamientos estocásticos, dada la naturaleza estadística de los mismos. Estas fluctuaciones pueden minimizarse al aumentar el número de muestras, convergiendo a curvas suaves que podrían ser descritas analíticamente.

Observamos que, partiendo de la condición inicial  $T \rightarrow 0$ , los sistemas con temperaturas mas cercanas a  $T_c$  tardan mas en termalizar que el resto, mientras que partiendo de un estado inicial aleatorio son los estados a menor temperatura los que tardan más en alcanzar el equilibrio.

Los resultados evidencian la existencia de eventos críticos al alcanzar  $T_c = 2.2692$ , que se expresan como puntos de inflexión y máxima pendiente en las curvas de energía, magnetización y cumulantes de Binder, máximos en los valores del calor específico y la susceptibilidad magnética y mayores tiempos de autocorrelación. Estos comportamientos se vuelven más evidentes al aumentar el número de spines del sistema, sugiriendo que en el límite termodinámico los resultados numéricos deberían coincidir con los analíticos.

Se comprobó además que los exponentes críticos describen correctamente el comportamiento de los sistemas al aproximarse a  $T_c$ , mejorando esta aproximación al aumentar el tamaño del sistema. También se observaron comportamientos no predichos por la teoría para  $T < 1$ , que podrían indicar una hipersensibilidad a las fluctuaciones del sistema o posibles transiciones de fase.

## Bibliografía

[1] W. Janke, Statistical Analysis of Simulations: Data Correlations and Error Estimation, John von Neumann Institute for Computing (2002)