



 $2e_1$

Universidad Nacional Autónoma de México

Escuela Nacional de Estudios Profesionales Acatlán

Simulación de Monte Carlo del Modelo de Ising en Dos Dimensiones

que para obtener el título en

Lic. Matemáticas Aplicadas y Computación

presenta

Marisol Lasa Chavarria



Tesis realizada bajo la dirección de

Dra Jacqueline Quintana Hinojosa

1997

TESIS CON FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Agradecimientos

Agradezco los valiosos comentarios del Dr. Alberto Robledo N. del Instituto de Física de la U.N.A.M

Agradezco la importante ayuda durante el desarrollo del trabajo del Químico Físico Guillermo Ramírez Galicia

Agradezco al CONACYT por la beca patrocinada a través del proyecto No. 0267P-E9506

Indice

Introduc	ción				1
Capítulo	I	Modelo de Ising	ξ		3
					-
I.1	Antec	edentes			3
1.2	Los e	stados macrscópico:	s y microscópicos o	de un sistema	6
1.3	Elest	ado de equilíbrio			6
1.4	Energ	ha libre y transicion	es de fase		8
1.5	Magn	etización de la mate	eria		9
1.6	EIMO	odelo de Ising			11
Capítulo	II	Método de Mon	te Carlo		13
		de de Mante Carde			10
11.1		tagia bésian de Mor	ata Carla		12
11.2	- ESUA Máto	de de Metrópolis	lie Carlo		16
11.5	Instr	umentación del algo	ritmo de Metrópol	lie	20
11.4	Elm	étodo de Metrópolis	s anlicado al model	lo de Ising	25
11.6	Desc	ripción del program	a para computador	ra	26
Capítulo	III	Resultados			30
ш.	1 Las	olución exacta del 1	nodelo de Ising		30
111.3	2 Sist	emas de tamaño fini	ito		31
III.:	3 Cálo	culo de la magnetiza	nción		35
III.4	4 Res	ultados			36
Capítulo	IV	Conclusiones y	Comentarios		56
Apéndice	e A				59
Apéndice	B				61
Apéndice	e C				68
Apéndice	e D				70

Apéndice E

Referencias

77 82

INTRODUCCION

Históricamente, una gran parte de las matemáticas se desarrollaron debido a la necesidad de describir cuantitativamente fenómenos naturales, en particular los de la física. Como un buen ejemplo de esto, se encuentra el cálculo integrodiferencial desarrollado por Newton¹. Por otro lado, ya que el perfil del matemático aplicado es tomar un problema del conocimiento humano y resolverlo por medio de alguna técnica matemática apropiada, se escogió un problema de la mecánica estadística, que debido a las características pedagógicas que se mencionan abajo, resultó ser una aplicación apropiada para introducirse al complejo mundo de la solución de problemas.

Así, el objetivo de este trabajo es estudiar un prototipo importante de la transición de fase que presentan los materiales ferromagnéticos y que consiste en la magnetización espontánea del sistema cuando este se enfría en ausencia de un campo magnético externo. Para ello se utiliza el modelo de Ising. Este es un sistema idealizado de momentos magnéticos atómicos o espines, que modela las propiedades magnéticas básicas de la materia. El estudio se lleva a cabo mediante una simulación numérica con el método de Monte Carlo.

El modelo de lsing resulta ser muy conveniente desde varios puntos de vista, por ejemplo:

- A pesar de ser un sistema muy simple, permite estudiar el fenómeno de transiciones de fase.
- La realización de su simulación numérica es sencilla.
- Existe la solución exacta para el sistema macroscópico en el caso de dos dimensiones.

Estas características hacen que el modelo de Ising sea un sistema muy apropiado para familiarizarse con el concepto de modelo matemático, así como con las técnicas de simulación numérica.

Paralelamente desarrollado por Leibniz.

Cabe destacar también, que además de las características pedagógicas del modelo de lsing, este se ha convertido en un modelo central en los estudios de mecánica estadística, puesto que sus propiedades no sólo corresponden a las de un magneto ideal, sino también a las de un fluido simple, una aleación, etc [1]. Así otras transiciones de fase como la condensación de un fluido o la segregación de una aleación, pueden entenderse empleando el modelo de Ising ordinario. Este modelo se ha generalizado de varias formas y sus variantes son objeto de investigaciones en la actualidad [2].

En el capítulo I se revisan, de manera breve, algunos conceptos básicos de mecánica estadística, la termodinámica así como el magnetismo de la materia, y finalmente se define el modelo de lsing. El capítulo II se dedica a hacer una revisión leve del método de Monte Carlo para resolver integrales numéricas multidimensionales y el método de Metrópolis para el caso de sistemas de la mecánica estadística. El capítulo III, esta dedicado a revisar la solución exacta del modelo de Ising, a describir los detalles de la simulación numérica efectuada así como a la presentación de gráficas que muestran los resultados. Finalmente, el capítulo IV trata de las conclusiones de este trabajo.

CAPÍTULO I

Modelo de Ising

I.1 Antecedentes

La descripción de las propiedades físicas de la materia condensada puede ser de dos formas alternativas: la macroscópica y la microscópica, estas son la termodinámica y la mecánica estadística, respectivamente. Una definición aceptable del régimen macroscópico, es cuando las escalas de tiempo y longitud involucradas en dicha descripción son mucho mayores que las que caracterizan a las moléculas. Mientras que lo microscópico involucra las escalas moleculares.

La termodinámica es una ciencia fenomenológica que aporta información sobre el comportamiento de la materia en sus estados más simples, llamados de equilibrio. La descripción de estos estados se lleva acabo en términos de sólo unas cuantas variables macroscópicas. Estas variables macroscópicas pueden ser, para el caso de un fluido, la presión p, el volumen V y la temperatura T.

La termodinámica es una disciplina tan general que puede ser aplicada a un sistema tan simple como un gas muy diluido, así como a un sistema tan complejo como una célula.

La termodinámica es una parte muy importante de la física macroscópica y la información que provee se puede clasificar como:

- Ciertas relaciones que siempre se deben de satisfacer entre las propiedades de la materia. El ejemplo más común es el de las ecuaciones de estado, que para el gas ideal es PV = nRT.
- Leyes que determinan la imposibilidad de ciertos procesos. Como ejemplo se tiene la segunda ley de la termodinámica.
- Criterios de estabilidad del estado de un sistema. Un ejemplo de esto es el de las transiciones de fase.

La contraparte microscópica de la termodinámica es la física estadística. La finalidad de esta es entender las predicciones de la termodinámica, en términos de información microscópica sobre los constituyentes de la materia. A diferencia de la termodinámica, disciplina muy general, la física estadística, utiliza como punto de partida, información detallada de los sistemas en estudio, específicamente información acerca del potencial intermolecular y con esta información la mecánica estadística puede constituir ecuaciones de estado particulares del sistema en estudio.

Los problemas de interés, en muchas disciplinas científicas, por ejemplo la física, son tan complejos que su estudio teórico se convierte en la gran mayoría de las ocasiones en una tarea muy complicada. En este sentido, el concepto de modelo resulta esencial para el estudio de problemas complejos. Un modelo se puede definir como un sistema que ha sido idealizado con el propósito de simplificarlo, de manera que puede ser estudiado teóricamente, pero es importante que al mismo tiempo preserve ciertas características fundamentales del sistema real que se quiere estudiar. El modelo queda definido al especificar la regla de interacción entre partículas, esto es definiendo el llamado potencial intermolecular $u(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_i)$ entre las partículas i y j.

En la física el empleo de modelos matemáticos es usual y en la mecánica estadística su uso es muy frecuente. Algunos modelos que ejemplifican esto, son el fluido de esferas duras y el modelo de lsing. Con el primero se puede estudiar a los fluidos densos, como los líquidos, y con el segundo a los sistemas magnéticos cristalinos.

Cuando se trata de elaborar una teoría para describir un sistema real, los resultados de esta se deben comparar con los que provienen del experimento correspondiente o bien, con los de algún modelo diseñado para dicho sistema. Mientras que cuando se quiere hacer una predicción teórica sobre el comportamiento de un modelo, la solución exacta con la que se debe hacer la comparación, la proveen las simulaciones numéricas. Esta solución es considerada la solución exacta, con excepción de errores debidos a la instrumentación en la computadora. Por ejemplo, el tamaño del sistema simulado respecto del sistema macroscópico así como los errores debidos a la precisión misma de la computadora con la que se ejecuta la simulación. Cabe mencionar que otro de los usos importantes que las simulaciones numéricas tienen, es también la modelación de sistemas reales en diversas aplicaciones, por ejemplo en las distintas ciencias naturales.

En la mecánica estadística, existen dos métodos usados para la simulación numérica de sistemas, la dinámica molecular y el método de Monte Carlo [3]. Los resultados de estos métodos son equivalentes para el cálculo del promedio de variables físicas en el equilibrio. La dinámica molecular resuelve numéricamente las ecuaciones de Newton, para las N partículas que conforman al sistema. Por lo que en este método de simulación el tiempo físico es una variable esencial. En particular, el método consiste en resolver la segunda ley de Newton, la cual es una ecuación diferencial de segundo orden que para cada partícula esta dada por

$$\mathbf{f}_{i} = \mathbf{m}_{i} \frac{\mathrm{d}^{2} \mathbf{r}_{i}}{\mathrm{d}t^{2}} \qquad i = 1, \mathbf{N} \qquad (1.1.1)$$

 \mathbf{r}_i es le vector de posición de la *i*-ésima partícula, t es el tiempo físico, y f es la fuerza entre partículas y esta determinada por el modelo en estudio, según la ecuación

$$\mathbf{f}_{i} = -\nabla \mathbf{u}(\mathbf{r}_{i}) \tag{1.1.2}$$

siendo u el potencial intermolecular.

Para resolver este sistema de ecuaciones, se requieren las condiciones iniciales dadas por el conjunto de posiciones y velocidades:

$$\mathbf{r}_{i}, \ \underline{d\mathbf{r}_{i}} \qquad i = 1, \mathbf{N} \tag{1.1.3}$$

para las partículas que forman el sistema. El método predice las posiciones y velocidades de las partículas como función del tiempo, es decir, dadas las posiciones y velocidades de las N moléculas a un tiempo t, se predicen dichas variables para un tiempo t+1. Como consecuencia, este método es apropiado cuando se desean calcular propiedades macroscópicas asociadas a estados que dependen del tiempo, como por ejemplo el coeficiente de difusión.

El método de Monte Carlo efectúa los promedios haciendo uso de elementos estocásticos. En este método, el calculo de los promedios de las variables físicas en estudio, se efectúa generando una cadena de Markov [1]. Para ello es necesaria la probabilidad de cada configuración microscópica por la que el sistema transita, y esta a su vez depende de la energía configuracional del sistema. Es en este punto en donde el potencial que define al sistema en estudio interviene en el método. A diferencia del método de dinámica molecular, que solo se aplica a sistema clásicos, el método de Monte Carlo se aplica tanto a sistemas clásicos como a cuánticos. Otra de las diferencias con respecto a dinámica molecular es que el tiempo físico no interviene en el método. En el capítulo II se hace una revisión detallada de este método.

I.2 Los Macroestados y los Microestados de un Sistema

Los sistemas macroscópicos como por ejemplo un baso de agua o bien el aire contenido en una habitación, están constituidos por un número de partículas de aproximadamente 10²³. El microestado de un sistema macroscópico a un tiempo dado, consiste en definir las posiciones y las velocidades de las partículas que lo conforman. La descripción microscópica y detallada de uno de estos sistemas equivale a definir el microestado del sistema como función del tiempo. Esta descripción no es posible en la mayoría de los casos, debido a que no es factible en general, obtener una solución analítica, aun aproximada del problema. Por otro lado, la solución numérica de un problema de tantas variables es irrealizable, pues requeriría de una computadora con una memoria exageradamente grande, así como una gran rapidez de cálculo. Por lo tanto para un sistema de tales características, la descripción a nivel microscópico se hace con herramientas estadísticas. A este enfoque se le conoce como mecánica estadística. Por otro lado, a nivel macroscópico, es posible hacer predicciones teóricas en términos de sólo unos cuantos parámetros del sistema que permitan conocer características esenciales de estos. Esta descripción se refiere a lo que se conoce como estados de equilibrio del sistema y esta es la antes mencionada termodinámica [4].

I.3 El Estado de Equilibrio

El estado de equilibrio de un sistema es un fenómeno macroscópico que se refiere a una situación en la cual no se ejerce acción externa sobre el sistema y en donde los parámetros macroscópicos que caracterizan al sistema se mantienen constantes en el tiempo. Durante el equilibrio ocurren muchos cambios a nivel molecular, los movimientos de las moléculas que constituyen al sistema son en general complicados. En otras palabras, la configuración del sistema cambia en el tiempo; es decir, a nivel microscópico, el equilibrio no es una situación estática. Otra consecuencia de esto es que el equilibrio no puede ser considerado como una propiedad instantánea del sistema. El equilibrio es un estado muy especial que microscópicamente corresponde a una colección muy particular de configuraciones, para las cuales las relaciones fundamentales termodinámicas tienen sus valores extremos, es decir alcanzan sus máximos o mínimos valores. En particular, las llamadas entropías y energía libre. Como consecuencia de esta definición que hace referencia a las propiedades macroscópicas del sistema es necesario definir un tiempo para observar dichas propiedades. El estado de equilibrio requiere un tiempo de observación infinito. Esto es obviamente el concepto idealizado, ya que en la práctica no es posible mantener a un sistema, lo suficientemente aislado como

Otra de las características importantes del estado de equilibrio es lo que se conoce como fluctuaciones, que son las desviaciones del valor promedio de las propiedades del sistema. Para describir este fenómeno, se muestran los resultados de la simulación de un gas de N partículas contenidas en un recipiente de volumen V. Este volumen se ha dividido en dos secciones con igual volumen mediante una superficie imaginaria. En un sistema macroscópico, en el estado de equilibrio, el número de partículas que viajan de izquierda a derecha, es aproximadamente igual al de las que viajan en el sentido opuesto. De manera que el número de partículas en evaluar el número de partículas en una de las secciones de la caja como función del tiempo. En las gráficas a y b se muestran los resultados del experimento para N = 4 y N = 40 respectivamente, mientras que n representa el número de partículas en una de las secciones.



7



(fig. 1.3.1)

Fluctuaciones con respecto del valor promedio para un sistema de N = 4 y N = 40

Como puede verse en la fig. 1.3.1 (a), en el caso de N = 4, las desviaciones de n/N respecto al valor promedio de esta propiedad ($\frac{1}{2}$), son cercanas a 1, de manera persistente, mientras que para N = 40, fig. 1.3.1 (b), estas fluctuaciones son bastante menores. A medida que N crece, la magnitud de dichas fluctuaciones decrece de manera que en régimen cuando N $\rightarrow \infty$, las fluctuaciones tienden a cero [5].

I.4 Energía Libre y Transiciones de Fase

Existen muchos ejemplos en la vida diaria en que las transiciones de fase se hacen presentes. Por ejemplo, la ebullición de los líquidos o su cristalización. Desde un punto de vista poco riguroso, se podría decir que en una transición de fase de un sistema, existe un cambio en la estructura del sistema que ocurre a una cierta temperatura. En muchos casos, este cambio de estructura se refiere al grado de orden en el espacio de las partículas que componen al sistema. Por ejemplo, en un cristal, las moléculas que lo componen se encuentran en una estructura totalmente ordenada, es decir, tanto de posición como de orientación, mientras que en un fluido las moléculas se encuentran en posiciones y orientaciones arbitrarias. En una transición de fase de un cristal a un líquido, existe una perdida total del orden espacial de las moléculas que prevalece en el cristal. La termodinámica y la mecánica estadística proveen una definición más precisa de lo que es una transición de fase en términos de una función llamada de energía libre.

La energía libre de un sistema termodinámico, es una función definida para los estados de equilibrio y depende únicamente de los parámetros macroscópicos necesarios, para describir dichos estados. Esta función de energía libre contiene toda la información fundamental de éste y, así como otras cantidades en la física cumple con un principio variacional. Cuando la función de energía libre se extiende a un dominio más amplio que describa otros estados adicionales, esta alcanza un mínimo precisamente, en los estados de equilibrio.

I.5 Magnetismo en la Materia

Experimentalmente se ha encontrado que tanto una aguja imantada como un circuito cerrado por donde circula corriente eléctrica, llamado espira, experimentan una fuerza magnética cuando se encuentran en presencia de un imán. Esta propiedad de reaccionar ante el fenómeno magnético producido por el imán se puede cuantificar mediante una cantidad vectorial llamada momento magnético μ . Asimismo, se puede demostrar experimentalmente que existe una fuerza magnética entre dos entidades que posean un momento magnético μ , digamos entre dos espiras.

En el átomo, los electrones en sus movimientos orbitales producen corrientes eléctricas atómicas, lo cual a su vez produce momentos magnéticos dentro del átomo. Además de esto, el electrón por síi mismo posee un momento magnético intrínseco llamado *espin*. A pesar de que en todos los átomos existen contribuciones al momento magnético de estos, provenientes de los electrones que los componen, las diferentes estructuras atómicas permiten que la interacción entre las fuentes de los momentos magnéticos sean diversas. Esto tiene como resultado que el fenómeno magnético de la materia tenga diferentes expresiones. En los gases raros y en general en la mayoría de los átomos estos efectos magnéticos se cancelan entre sí, dando como resultado un momento magnético atómico nulo. Existen otros átomos para los cuales los momentos magnéticos de sus electrones no se cancelan, Contribuyendo de manera constructiva al momento magnético del átomo.

imán, los momentos magnéticos de los átomos tienden a alinearse en función del imán. A este fenómeno se le llama paramegnetismo. Otra de las formas del magnetismo de la materia es el llamado ferromagnetismo que se presenta en algunos materiales como por ejemplo en el fierro y en el níquel. En el caso de los materiales ferromagnéticos, existe una tendencia marcada de los momentos magnéticos de los átomos a alinearse entre si, a pesar del efecto de la agitación térmica que los tiende a desordenar. Es decir, existe una interacción especial entre los momentos magnéticos de los átomos que componen a este tipo de materiales, dando como resultado un efecto macroscópico de magnetización espontánea. Este fenómeno se puede describir a través de una propiedad de estos materiales que se conoce como acoplamiento de intercambio. La temperatura es la variable determinante para que se presente este fenómeno, ya que si la temperatura aumenta hasta cierto valor crítico T. dicho efecto macroscópico desaparece completamente. Es decir. en materiales ferromagnéticos que a suficientemente baja temperatura poseen una cierta magnetización cuando aumenta su temperatura, su magnetización desaparece súbita y espontáneamente. Similarmente ocurre esto en el sentido opuesto, es decir, un material ferromagnético cuya magnetización es cero a una cierta temperatura, puede magnetizarse espontáneamente si su temperatura baja hasta el valor crítico T_{c} . Desde el punto de vista microscópico se puede decir que al aumentar la temperatura del material, el acoplamiento entre los átomos desaparece subitamente. Esta propiedad no radica exclusivamente en las propiedades de los átomos, sino en la forma muy particular de interacción entre ellos. Un material ferromagnético a temperatura $T > T_c$ se vuelve paramagnético.

Para estudiar estos fenómenos es necesario recurrir a la física cuántica. Sin embargo es posible describir ciertos aspecto del magnetismo desde el punto de vista de la física clásica.

En resumen, existe una competencia entre estas dos tendencias, de manera que a suficientemente bajas temperaturas el efecto que domina es el de alineamiento de los momentos magnéticos, mientras que a medida que la temperatura aumenta, cuando esta alcanza un valor crítico, se observa una transición súbita al estado de desorden. En los materiales ferromagnéticos, existe una interacción especial entre los átomos que los componen, dando como resultado un efecto macroscópico de magnetización espontánea, a pesar de no estar en el campo producido por un imán [6,7].

I.6 El Modelo de Ising

El modelo de lsing es uno de los modelos más utilizados en mecánica estadística, debido a la combinación de su sencillez y del hecho de que no es un sistema trivial como lo sería el gas ideal¹. Este modelo puede usarse para estudiar fenómenos muy complejos como las transiciones de fase. Otra de las ventajas que ofrece, es que en dos dimensiones su solución exacta se conoce [8]. Esto es muy valioso pues permite verificar otros métodos de cálculo, en particular, los de simulación numérica para sistemas similares. El modelo de Ising hace una abstracción de las propiedades magnéticas de la materia, en particular del ferromagnetismo. El modelo de Ising consiste en definir partículas con momento magnético intrínseco que se localizan en una red cristalina. Como se menciono antes, el momento magnético μ , es un vector cuya magnitud se denotará por μ . La dirección del momento magnético se supone como fija y es elegida arbitrariamente de manera que las partículas puedan estar localizadas con sus momentos magnéticos alineados en el sentido positivo o negativo. En estas condiciones, habiendo fijado la magnitud μ como la dirección de μ , la variable que resta es el sentido que puede ser positivo o negativo. Esta variable se denotará por s_i y se llamará variable de spin.

En un sistema real los momentos magnéticos interaccionan entre si con una magnitud que decrece a medida que la distancia entre ellos es mayor, pero en el modelo de lsing la interacción se limita a los vecinos más cercanos. Más explícitamente, como se puede ver en la (fig. 1.1.1), si suponemos a las partículas localizadas en cada punto de una malla cristalina simple, los vecinos de cualquier partícula, digamos la *i*-ésima, se pueden agrupar según la cercanía a dicha partícula en distintos grupos de vecinos. El conjunto de los vecinos más cercanos se encuentran a una distancia L de la partícula *i*, siendo el número de ellos igual a 4. El conjunto de los siguientes vecinos distan $\sqrt{2}$ L de dicha partícula. Esto tiene como consecuencia que en el modelo de lsing, cada partícula del sistema interactue sólo con sus cuatro vecinos más cercanos.

les un sistema de partículas en donde el potencial intermolecular es nulo

De ahora en adelante, se llamará magneto a una partícula que posea un momento magnético intrínseco. La energía de un sistema de N espines de Ising, que no se encuentran bajo la influencia de un imán esta dada por

$$\mathbf{E} = -\mathbf{J} \sum_{i\neq j}^{N} \mathbf{s}_{i} \mathbf{s}_{j}$$
(1.1.4)

donde s es la variable de spin y J la constante de acoplamiento entre magnetos.



(fig. 1.1.1) Red cristalina en dos dimensiones

CAPITULO II

Método de Monte Carlo

II.1 Método de Monte Carlo

Cuando se quiere calcular la integral de una función de muchas variables, en general es necesario hacer la evaluación por medio de métodos numéricos. El método de Monte Carlo es una manera eficiente de resolver este tipo de integrales, su nombre surge de su carácter de alcatoriedad y de los famosos casinos de Mónaco. Un ejemplo en el cual el método de Monte Carlo resulta muy adecuado se da a continuación, Muchos problemas en física involucran promedios sobre muchas variables. Supóngase que se conoce la posición y velocidad de 10 partículas que interactúan entre si. En tres dimensiones cada partícula tiene tres componentes de velocidad y tres de posición, por lo que la energía en tal caso, es una función de 60 variables. Por lo tanto un cálculo del promedio de energía por partícula involucra la solución de una integral N=60 dimensional. Para cierta elección de la función la integración podría ser hecha analíticamente, sin embargo, hay muchas funciones comunes de las cuales su función es intratable y que deben ser evaluadas numéricamente. Así, una manera conveniente de calcular este tipo de integrales es utilizando el método de Monte Carlo [9]. El código del programa para resolver integrales multidimensionales por medio de Monte Carlo se presenta en el apéndice A.

El objetivo de este capítulo es estudiar el método de Monte Carlo y particularmente, el de Metrópolis [1,10], con el propósito de evaluar los promedios definidos en la Mecúnica Estadística.

En la sección II.3 se describen brevemente algunos detalles formales del método de Metrópolis que es un caso especial del método de Monte Carlo; en la sección II.4 y II.5, se revisan algunos aspectos generales para llevar a la práctica el algoritmo del método de Metrópolis y en la sección II.6, se explica de manera genérica el programa de computadora que se elaboró para simular el modelo de Ising en dos dimensiones por medio de Metrópolis.

II.2 Estrategia básica de Monte Carlo

El método de Monte Carlo puede aplicarse de dos formas[9]:

Sea A el área de un rectángulo de altura H y ancho (b-a), y sea f(x) tal que, a $\le x \le b$ y f(x) \le H (ver fig. 2.2.1). Se eligen al azar y de manera uniforme n números x_i y n números y_i de manera que se formen n pares de números aleatorios (x_i,y_i) con i=1,...,n; tales que cumplan con las siguientes condiciones a $\le x_i \le b$ y $0 \le y_i \le H$.

Para cada punto x_i se evalúa la función $f(x_i)$, la fracción n_s de puntos (x_i,y_i) que satisfacen la condición $y_i \leq f(x_i)$ entre el total de puntos n por el área del rectángulo, es una estimación de la integral de f(x). Por lo tanto, el cálculo de la integral, que se denota con Fn, en el método de éxito-falla es dado por

$$Fn = A(n_s/n)$$
 (2.2.1)

donde n_s es el número de puntos (x_i, y_i) bajo la curva o que satisfacen la condición $y_i \leq f(x_i)$, n es el total de puntos y A es el área del rectángulo. Debe notarse que n no deberá confundirse con el número de intervalos usados en los métodos numéricos convencionales (trapezoide, rectangular y simpson). Cabe mencionar que el total de números aleatorios que se necesitan para este método son 2n.



El otro procedimiento de Monte Carlo se basa en el teorema de cálculo, el cual condiciona que la integración de una función esta determinada por el valor promedio del integrando f(x) en el intervalo $a \le x \le b$.

Para integrales uni-dimensionales, la estimación de la integral Fn en el método de muestra-media es dada por

Fn = (b-a)
$$\langle f \rangle$$
 = (b-a) (1/n) $\sum_{i=1}^{n} f(x_i)$ (2.2.2)

14

aquí, el promedio de f, es evaluado considerando n valores x_i de la abcisa, donde x_i son números aleatorios distribuidos uniformemente en el intervalo a $\leq x_i \leq b$.

La evaluación de integrales con métodos numéricos clásicos, como por ejemplo, la regla de Trapecio o Simpson, se hace de la siguiente forma

$$Fn = \sum_{i=1}^{n} f(x_i) \Delta x \qquad (2.2.3)$$

en donde ;

$$\Delta x = (b-a)/n$$
 y $x_n = x_0 + n\Delta x$

En este tipo de métodos se define una malla en el dominio de la función, en donde cada punto x_i de la malla es usado para evaluar la función $f(x_i)$. Para muchos casos el paso de la malla es constante¹ y esta definido por

$$\Delta x = x_{i+1} - x_i \tag{2.2.4}$$

Ver (fig. 2.2.2). Es decir, el conjunto de puntos { x_i }_{i=1} de la malla, es elegido de antemano. Por el contrario, en el método de Monte Carlo los puntos x_i se eligen al azar, es decir, sólo se evalúa la función $f(x_i)$ en una muestra representativa del dominio, elegida de manera aleatoria. Por lo tanto, la forma de (2.2.2) y (2.2.3) son equivalentes excepto en que los n puntos son elegidos con igual espacio en (2.2.3) y con espacios aleatorios en (2.2.2). Para integrales de pocas dimensiones (2.2.3), es más exacto, pero para integrales de muchas dimensiones (2.2.2) es más adecuado.

A excepción de funciones que requieren ser tratadas con una malla de paso variable.



Suponiendo que el dominio de la función a integrar está en R₂.

II.3 Método de Metrópolis

Una aplicación del método de Monte Carlo para resolver problemas físicos, es el llamado algoritmo de Metrópolis. Este permite calcular promedios de variables dinámicas por medio de una discretización del espacio sobre el que se esta trabajando. La discretización se logra al elegir una sucesión de puntos en el espacio en cuestión, conocida como cadena de Markov. Una de las características más importantes de Metrópolis, es que dicha cadena esta formada por aquellos puntos elegidos del espacio sobre el que se esta trabajando que estén correlacionados y por lo tanto que puedan elegirse de manera que tengan una probabilidad significativa. Entonces, para el cálculo del promedio de una función sólo se toman en cuenta los valores evaluados en aquellos puntos que forman parte de la cadena de Markov [1,10].

En Mecánica Estadística el cálculo del promedio de una variable dinámica f(x) de un sistema en equilibrio, se expresa de la siguiente forma

$$\langle f(x) \rangle = -\frac{\int_{\Omega} f(x) p(x) dx}{\int_{\Omega} p(x) dx}$$
 (2.3.1)

en donde X = $(r_1, r_2, ..., r_N)$ representa la configuración de un sistema de N partículas y $r_i = (x_i, y_i, z_i)$, representa las coordenadas de la i-ésima partícula o su localización en el espacio de tres dimensiones. Ω representa el espacio

configuracional o sea, el conjunto de todas las X y p(x) es la probabilidad de ocurrencia de X.

En particular, al tratarse de un sistema a temperatura T en el conjunto canónico [4]

$$p(X) = \exp(-U(X)/kt)$$
 (2.3.2)

en donde U es la energía configuracional del sistema, que suponiendo aditividad por pares, queda definida por

$$U(X) = \sum_{i < j} u(r_{i,j})$$
 (2.3.3)

 $u_{i,j}$ es la interacción que existe entre las partículas i, j y k es la constante de Boltzmann.

Como puede verse de la ecuación (2.3.1), el cálculo del promedio $\langle f \rangle$ implica una integración sobre el espacio configuracional Ω . Esta integral en general, debe resolverse numéricamente, debido a que la energía configuracional U(X) es en general no integrable analíticamente. Por otro lado, es fácil convencerse que aun para un sistema de pocas partículas (N=10), la integral de la ecuación (2.3.1) esta definida en un espacio configuracional de 30 dimensiones, suponiendo que se está trabajando en tres dimensiones.

El método de integración numérico más adecuado para integrales multidimensionales es el de Monte Carlo. Este consiste en elegir puntos de manera aleatoria en el espacio configuracional para evaluar el integrando en cuestión. Por lo tanto, la correlación entre puntos sucesivos de la serie que resulta de la discretización de la integral, es nula. Esta forma de muestreo puede no ser muy eficiente, ya que muchos de estos puntos que se han tomado de manera totalmente aleatoria, pueden tener una probabilidad insignificante. Metrópolis et. al. [1,10], modificó este tipo de muestreo utilizando lo que se conoce como cadena de Markov. Brevemente, éste consiste en elegir los puntos sucesivos que contribuyan al cálculo del promedio, de nanera que estén correlacionados. Esta correlación permite elegir puntos que tengan probabilidad significativa y por lo tanto, efectuar un muestreo más eficiente que el del tradicional método de Monte Carlo. Así con Metrópolis, se genera una sucesión finita y con cierto carácter de aleatoriedad de puntos {X(t)} en el espacio configuracional. Esta secuencia es la llamada cadena de Markov.

Más explícitamente, el método de Metrópolis aproxima el promedio de $\langle f(x) \rangle$, como

$$\langle f(X) \rangle \approx {\binom{1}{m}} \sum_{i=1}^{m} f[X(t)] \equiv \overline{f}$$
 (2.3.4)

en donde m representa el número de puntos en la cadena de Markov y X(t) la configuración del sistema como función del parámetro t. Este es un parámetro discreto que etiqueta en forma secuencial a los puntos de la cadena de Markov. Es posible demostrar [10] que los promedios en la ecuación (2.3.4) coinciden con (2.3.1) cuando se toma el límite $m \rightarrow \infty$

$$\langle f(X) \rangle = \lim_{m \to \infty} {}^{(1)}_{m} \sum_{t=1}^{m} f[X(t)]$$
 (2.3.5)

Como puede verse de la ecuación (2.3.4), no es necesario calcular la constante de normalización involucrada en el promedio. Esta constante es llamada la función de partición en Mecánica Estadística. Aquí el promedio de \overline{f} es evaluado considerando m valores x_i, elegidos al azar del espacio de configuración. A medida que la cadena de Markov es más larga, (es decir, que más puntos forman parte de ella) las cantidades que se calculan se aproximan más al promedio de variables físicas que se desean culcular.

Por último, cabe destacar que Monte Carlo evalúa integrales de acuerdo a (2.2.2), sin tomar en cuenta la probabilidad de los puntos que se suman para calcular el promedio que nos de la estimación de la integral, sin embargo, se puede observar que para integrar (2.3.1) se necesita precisamente la probabilidad de cada punto, ya que aparece explícitamente en el integrando. En este caso al discretizar la suma, parece más adecuado elegir una secuencia de puntos tomando en cuenta sus probabilidades y que estas sean significativas, entonces con este criterio Metrópolis evalúa la integral (2.2.2) por medio de (2.3.4), esta expresión pesa anticipadamente cada configuración y le asigna su probabilidad intrínsecamente.

Las reglas por las cuales se genera la cadena de Markov, se basan en el siguiente criterio. Supóngase que al tiempo t el punto en la cadena de Markov es X_i . Para generar el sucesor X_{i+1} se crea un paso de prueba o un nuevo punto

 X_p . Un paso prueba es un punto tal que, si cumple con ciertas condiciones podrá ser el sucesor del punto X_i en la cadena de Markov. X_p es aceptado si la probabilidad de X_p es mayor que la probabilidad del punto X_i . Es decir si

$$p(X_p) > p(X_i)$$
 (2.3.6)

o equivalentemente si

$$r \equiv p(X_p) / p(X_i) > 1$$
 (2.3.7)

Es decir si r > 1, el paso de prueba es el sucesor X_{i+1} en la cadena. De esta manera, el método de Metrópolis genera los puntos de la cadena cuyas probabilidades sean significativas.

Este criterio de aceptación de puntos de la cadena de Markov, puede traducirse en términos de propiedades del conjunto canónico de la siguiente forma

$$r \equiv \frac{\exp(-U(X_p)/kt)}{\exp(-U(X_i)/kt)} =$$

$$= \exp(-(U(X_p) - U(X_i))/kt) = (2.3.7)$$

$$= \exp(-\Delta U/kt)$$
Por lo que $r > 1 \iff \Delta U < 0$

Por lo tanto, el criterio de aceptación se puede expresar en términos de la diferencia $\Delta U = U(X_p) - U(X_i)$. Si $\Delta U < 0$ se toma X_p como sucesor de X_i en la cadena de Markov. Si la condición anterior no se satisface, se calcula otro número aleatorio uniforme ξ y se aceptará el paso prueba si e $^{-\Delta U/kt} > \xi$. En caso de que el paso prueba no se aceptado, el siguiente punto X_{i+1} , en la cadena de Markov se toma como X_i , es decir, $X_i = X_{i+1}$. Este criterio se ilustra en el diagrama (2.3.1)





Criterio de aceptación del algoritmo de Metropólis.

II.4. Instrumentación del Algoritmo de Metrópolis

En primer lugar hablaremos acerca del tamaño del sistema que se utiliza para realizar la simulación. Para esto es conveniente notar que aunque en la actualidad existen máquinas muy potentes y con una gran capacidad de memoria, es imposible simular un sistema tomando en cuenta que el número de partículas en un sistema real, es del orden de 10^{23} . Por ello, las simulaciones se hacen generalmente con un sistema reducido de aproximadamente 10^3 o 10^4 partículas. Sin embargo éste sistema es una pequeñisima fracción del sistema que se desea simular. Un sistema de tales dimensiones se vería afectado de manera importante por su frontera. Para evitar que el sistema se vea influido por el medio que le rodea y para reducir los errores que surjan con motivo de usar un sistema reducido, se hace uso de las condiciones periódicas a la frontera. Ver fig. (2.4.1). Las condiciones periódicas a la frontera consisten en llenar el espacio infinito que rodea el sistema bajo estudio, con réplicas idénticas de él. Una réplica consiste en un sistema imagen que tiene el mismo número de partículas N, el mismo volumen V y la misma configuración X. Las condiciones periódicas a la frontera afectan el cálculo de la energía configuracional, como se vera a continuación [3].

$ \downarrow $	\downarrow	\uparrow	\downarrow	\downarrow	\downarrow	\uparrow	\downarrow	\downarrow	\downarrow	\uparrow	\downarrow
\uparrow	\downarrow	\downarrow	\uparrow	\uparrow	\downarrow	\downarrow	\uparrow	\uparrow	\downarrow	\downarrow	\uparrow
\downarrow	\uparrow	\uparrow	\downarrow	\downarrow	\uparrow	\uparrow	\downarrow	\downarrow	\uparrow	\uparrow	\downarrow
\uparrow	$\overline{\uparrow}$	\leftarrow	\uparrow	\uparrow	\uparrow	\rightarrow	\uparrow	\uparrow	\uparrow	\leftarrow	\uparrow
\downarrow	\rightarrow	\uparrow	\leftarrow	\checkmark	\downarrow	\uparrow	\downarrow	\downarrow	\downarrow	\uparrow	\downarrow
\uparrow	\rightarrow	J.	\uparrow	\uparrow	\downarrow	\checkmark	\uparrow	1	1	\downarrow	\uparrow
$\overline{\downarrow}$	\uparrow	\uparrow		\rightarrow	$\overline{\uparrow}$	$ \uparrow$	$\overline{\mathbf{v}}$		$\uparrow \uparrow$	\uparrow	\downarrow
\uparrow	\uparrow	1	\uparrow	\uparrow	\uparrow	\checkmark	\uparrow	\uparrow	T	1	\uparrow
\downarrow	\downarrow	\uparrow	\downarrow	\downarrow	\downarrow	\uparrow	\downarrow		$ \downarrow$	\uparrow	\downarrow
\uparrow	\downarrow	1	\uparrow	\uparrow	1	\downarrow	T	T	1	$\overline{\downarrow}$	\uparrow
V	\uparrow	\uparrow	1	J.	\uparrow	\uparrow	1	\downarrow	\uparrow	$ \uparrow$	\downarrow
\uparrow	\uparrow	\downarrow	\uparrow	\uparrow	\uparrow	\downarrow	T	T	1	\downarrow	\uparrow

(fig.2.4.1)

Condiciones periódicas a la frontera para el modelo de Ising en dos dimensiones. La caja central representa el sistema original y las cajas que le rodean son réplicas de éste.

La energía U de un sistema de N partículas, si se toma el criterio de aditividad por pares resulta

$$U = \sum_{i < i}^{N} u(r_{i,j})$$
(2.4.1)

en donde u es la energía de interacción entre pares, $r_{i,j}$ es la distancia entre las partículas i,j; por lo que es necesario calcular la interacción entre cada par de partículas en el sistema. De acuerdo con la periodicidad introducida por las condiciones periódicas a la frontera, existe un número infinito de interacciones $u(r_{i,j})$, es decir, suponiendo que la partícula i está en la celda original, existe un

número infinito de imágenes de j provenientes de todos los sistemas réplicas. Esto tiene como resultado que la energía de U, (ecuación (2.4.1)) contenga un número infinito de términos, de los cuales, sólo unos cuantos contribuyen significativamente a U. Esto es debido a que todo potencial intermolecular realista tiende a cero cuando $r_{i,i} \rightarrow \infty$.

Este problema se puede resolver introduciendo una convención llamada de la "imagen más cercana". Esta consiste en considerar para el cálculo de la energía, sólo la imagen de j más cercana a i. Con esta convención el número infinito de términos en la ecuación (2.4.1), resulta ser ahora N(N-1)/2, siendo estas las interacciones por pares de un sistema de N partículas; excluyendo las auto-interacciones u($r_{i,i}$) y teniendo en cuenta que u($r_{i,j}$)=u($r_{i,i}$).

Ya que se ha convenido el tamaño del sistema que se va a simular, el paso inicial del algoritmo debe contemplar la creación del primer punto de la cadena de Markov o bien la primera configuración del sistema a la cual denotaremos como configuración X₀. Esta es elegida arbitrariamente¹ pero debe de estar acorde con el sistema bajo estudio, que en este caso es el modelo de Ising. La parte que tiene que ver con la localización de los sitios de los spines corresponde a una red cristalina en donde los sitios están regularmente espaciados, mientras que la parte orientacional de dicha configuración se puede elegir de dos formas. En este programa, se puede optar entre una fase ordenada, es decir, todos los spines con dirección hacia arriba o bien, una fase desordenada, en donde la orientación de los spines se asigna aleatoriamente. Es necesario hacer notar que los números al azar que son generados por una computadora son en realidad pseudo-aleatorios.(ver apéndice B). Esto es debido a que la sucesión de números generados así tienen una cierta correlación, es decir, la sucesión tiene un periodo. Por lo cual es muy importante asegurarse de estar utilizando la longitud total de la sucesión.

Debido a que la configuración inicial que se generó se encuentra en un estado, que no necesariamente corresponde al estado termodinámico que se quiere estudiar, es necesario dejar evolucionar la simulación para alcanzar el estado que se desea simular. Esto implica que se debe generar un número de puntos de la cadena de Markov que en general puede ser grande con el fin de tener información estadística que sea relevante en distintas regiones del espacio configuracional.

En principio, la configuración inicial puede elegirse arbitrariamente, sin embargo por razones prácticas unas selecciones pueden resultar mejor que otras.

Por lo anterior, para la ejecución del programa se puede necesitar un tiempo grande, lo cual requiere por razones prácticas, que la ejecución pueda ser llevada a cabo en varias sesiones, por lo tanto se debe contar con la posibilidad de detener la simulación en un momento dado y reiniciarla sin que se pierda la continuidad de la misma. Así es que al final de cada corrida, se debe guardar en un archivo la última configuración X_i y algunos parámetros necesarios para continuar con el proceso. De esta manera en el código existe la opción de generar una configuración inicial o seguir con un proceso ya iniciado.

El paso siguiente en el algoritmo es calcular la energía de la configuración inicial X_0 o bien de la configuración X_i con la que se ha reiniciado el programa.

Una vez que se ha calculado la energía de la configuración Xi (ya sea X₀ o bien, la continuación de una corrida), se requiere generar una nueva configuración a la que llamaremos de prueba con el fin de ir formando la cadena de Markov. Para esto se elige de manera aleatoria un spin S_k de la configuración en cuestión y se cambia su dirección, generando así la configuración de prueba a la que llamaremos X_p. Para generar X_p se dejan los n-l spines con la misma dirección que tienen en la configuración anterior X_i y sólo se cambia la dirección del spin S_k que se eligió al azar. Es decir, la nueva configuración de prueba será

$$X_{p} = \{(r_{1}, S_{1}), (r_{2}, S_{2}), \dots, (r_{k}, S_{k}), \dots, (r_{n-1}, S_{n-1}), (r_{n}, S_{n})\}$$
(2.4.3)

en donde $r_i = (x_i, y_i)$ es la posición en el espacio bidimensional de la i-ésima partícula y S_i representa su dirección (-1 ó +1). Para esta configuración $S'_k = -S_k$.

De acuerdo con lo anterior, la diferencia entre $U(X_i)$ y $U(X_p)$ depende solamente de S_k. Esto es, al cambiar la orientación de S_k, cambia también la relación que mantiene con las demás partículas del sistema, mientras que la interacción por pares de las n-1 partículas distintas de S_k, sigue siendo la misma en ambas configuraciones. Así, la energía de la configuración en cuestión se expresa como

$$U(X_p) = U(X_i) + U(S'_k) - U(S_k)$$
(2.4.4)

en donde $U(S_k)$ es la energía entre el k-ésimo spin y los n-1 spines restantes dados en la configuración X_i ; $U(S_k)$ es la energía correspondiente que se calcula del spin S_k en la configuración X_p y $U(X_i)$ es la energía total de la configuración X_i . Para la elección del spin S_k se utilizó una función que genera números pseudo-aleatorios, la cual se encarga de elegir por medio de números distribuidos uniformemente en el intervalo [0,1] dicho spin S_k .



(Diagrama.2.4.2)



Como ya se mencionó, en el método de Metrópolis el criterio de aceptación de puntos esta basado en la razón r de probabilidades entre la configuración de prueba X_p y la configuración actual X_i . De acuerdo con el diagrama (2.4.2), dicha razón se compara con un número aleatorio ξ entre cero y uno. Si $r > \xi$ entonces se acepta la configuración de prueba X_p y en caso contrario se rechaza X_p . Sin embargo, al aplicarse el método de Metrópolis al conjunto

canónico, parece que existen dos caminos distintos para aceptar a X_p , lo cual puede ser confuso. Para explicar lo anterior, es necesario recordar que la probabilidad de cada configuración en el conjunto canónico depende de su energía es decir, $p(x) = e^{U(x)Kt}$, por lo tanto para eficiencia computacional es posible evitar el cálculo del exponencial cada vez que se prueba una configuración tomando como criterio de aceptación la diferencia de las energías $\Delta U = U(X_p) - U(X_i)$, correspondiente a las configuraciones $X_i y X_p$, así para que r > 1, ΔU , deberá ser mayor a cero. Cuando la condición anterior no se satisfaga, se compara e^{$\Delta U/kI$} contra un número aleatorio entre cero y uno. De esta forma se satisface completamente el criterio de aceptación impuesto en el método de Metrópolis.

II.5 El Método de Metrópolis Aplicado a el Modelo de Ising

La energía del modelo de Ising en dos dimensiones, se calcula de la siguiente forma

$$U(X) = -J/T \sum' S_{\alpha} S_{\beta} \qquad (2.5.1)$$

en donde α y β son etiquetas generales de sitio para cada variable de spin, J y T son parámetros de entrada y ' denota que la suma se hará sobre parejas de spines que sean vecinos más cercanos.

Para el caso que aquí se estudia (modelo de Ising en dos dimensiones), si suponemos que k es la etiqueta para la posición i, j en la malla cristalina y tomando en cuenta a (2.4.4) y (2.4.5), se tiene que

$$\Delta U = U(S'_{i,j}) - U(S_{i,j})$$

$$= S'_{i,j} * (S_{i,j-1} + S_{i,j+1} + S_{i-1,j} + S_{i+1,j})$$

$$- S_{i,j} * (S_{i,j-1} + S_{i,j+1} + S_{i-1,j} + S_{i+1,j})$$

$$= -2 S_{i,j} * (S_{i,j-1} + S_{i,j+1} + S_{i-1,j} + S_{i+1,j})$$
(2.5.2)

Esto es si se ha supuesto que el campo externo es cero.

Aceptar la configuración X_p significa que esta nueva configuración será el paso X_{i+1} en la cadena de Markov, es decir, se efectúa la asignación $X_{i+1} \leftarrow X_p$. Más explícitamente, la orientación del spin S^*_k substituirá a la orientación del spin S_k . Asimismo, el valor de la energía debe ser actualizado es decir, $U_{i+1} = U_p$. Si por el contrario, la configuración es rechazada, el nuevo paso X_{i+1} en la cadena será el paso anterior X_i , es decir, $X_{i+1} \leftarrow X_i$, y su energía debe ser actualizada también en la forma $U_{i+1} = U_i$. Para aplicar el algoritmo de Metropólis a un fluido ver apéndice C.

II.6 Descripción del Programa para Computadora

En esta sección se encuentran los detalles del programa para computadora, elaborado para esta tesis y que se basa en el método de Metrópolis, que simula el modelo de Ising en dos dimensiones. En el apéndice D, se muestra el diagrama de flujo de dicho algoritmo.

Como ya se explicó anteriormente, la simulación tendrá que realizarse en varias sesiones, por lo que el programa tiene la opción de continuar con un proceso o iniciar uno nuevo, así, la parte inicial del programa consiste en leer un archivo que contiene los parámetros necesarios para determinar si la ejecución se inicia con la configuración inicial X_0 o es continuación de una ejecución anterior que parte de la configuración X_i. Si se quiere reiniciar una sesión, se lee de un archivo adicional, la última configuración que se guardó a la que llamaremos X_i y el último número al azar para asegurar que la sucesión de números aleatorios sea lo más grande posible. Por otro lado, si se va a iniciar un nuevo proceso, se crea una configuración inicial que llamaremos X_0 y se da un número semilla a partir del cual se inicia el proceso de generar números aleatorios. Para crear X_0 , tomamos como base una red cristalina cúbica simple en donde cada sitio es ocupado por un spin, esta red consiste de n=Nx X Ny spines y en el programa dicha red cristalina se representa por medio de un arreglo bidimensional al que llamaremos A, el cual tiene Nx renglones y Ny columnas (ver fig. 2.6.2). Dicho arreglo contiene en cada posición a(i,j) la dirección de cada spin que se representa por un +1 o un -1, donde (i,j) determina la localización de cada spin en el arreglo. El programa tiene dos opciones para designar las direcciones de los spines en X_0 , en una de ellas todos los spines toman el valor de +1 es decir, que el conjunto de n spines están direccionados hacia arriba, tal configuración corresponde a la fase ordenada. La otra forma consiste en que los spines tengan una dirección de +1 o -1 aleatoriamente es decir, que se encuentren en una fase desordenada.

0.0	0.1	0.2	0.Ny	0.Ny+1
1.0	1,1	1.2	1.Ny	1.Ny+1
	2,1	2,2	2.Ny	2.Ny+1
Nx.O	Nx,1	Nx,2	Nx,Ny	Nx,Ny+1
Nx+1.0	Nx+1,1	Nx+1,2	Nx+1,Ny	Nx+1.Ny+1

(fig. 2.6.2)

Arreglo de tamaño NaNNa con condiciones periódicas a la frontera

Las condiciones periódicas se satisfacen de la siguiente manera en el programa: se añadieron al arreglo original dos renglones y dos columnas adicionales, es decir, si el arreglo original tiene de 1,...Nx renglones y 1,...Ny columnas, los renglones adicionales serán el 0 y el Nx+1. Las posiciones del renglón 0 están ocupados por los spines del renglón Nx y las posiciones del renglón Nx+1 están ocupadas por los spines del renglón 1. Esto se cumple de igual forma para las columnas, estas serán la columna 0 y la columna Ny+1. Así, el arreglo tendrá Nx+2 renglones y Ny+2 columnas (ver fig. 2.6.2). Estos renglones y columnas extras se utilizan para el cálculo de la energía configuracional ya que se afectado por las condiciones periódicas a la frontera, por ejemplo: el vecino inferior del spin Sij cuando i=Nx será aquél con i=1 y el vecino a la izquierda de Sij cuando j=1 será aquél con j=Ny. En donde i,j son los índices para las dos direcciones espaciales.

Ya que se tiene la configuración a partir de la cual se empieza la simulación, el siguiente paso es calcular la energía de la configuración en cuestión, que en este caso puede ser X_0 o X_i . Esta energía se calcula para cada spin, tomando en cuenta sólo a sus vecinos más cercanos. Por ejemplo el spin que ocupa en el arreglo el sitio (i.j) interactua sólo con 4 spines: (i ± 1 ,j) y (i.j

 \pm 1). Para tener la configuración de prueba X_p se elige un spin, que denotamos por S_k, de manera aleatoria y uniforme, la elección se hace tomando al azar una columna y un renglón que nos den la posición de S_k, al renglón le llamaremos m y a la columna n, así el spin con el que obtendremos la nueva configuración estará localizado en la posición (n,m) del arreglo A.

Una vez que se ha seleccionado al k-ésimo spin, lo siguiente es cambiar su dirección y el nuevo valor de la variable S_k en la configuración de prueba X_p será S'_k es decir, $S'_k = -S_k$.

Ahora que ya se tiene la configuración de prueba X_p , se calcula su energía $U(X_p)$ con el fin de compararla con la energía de la configuración actual $U(X_i)$. Para esto, se hace la diferencia entre ambas energías: $\Delta U = U1 - U0$, en donde U1 es una variable que almacena la energía de X_p y U0 almacena la energía de la configuración X_i . Si esta diferencia es menor a cero aceptamos a X_p , si es mayor a cero se calcula otro número aleatorio ξ y se compara con la exponencial de -du. Si e^{-du/kt} > ξ aceptamos a X_p , de lo contrario se rechaza. Cuando rechazamos una configuración, se busca una nueva configuración a prueba a partir de X_i .

Aceptar a la configuración X_p , significa que la posición en el arreglo que se refiere al k-ésimo spin con dirección S_k se substituye por la dirección S'_k , y la energía también se actualiza.

Si aun no se ha completado el número total de corridas se repite el proceso eligiendo una nueva configuración a prueba a partir de la configuración actual X_i . Si ya se cumplieron el total de corridas se guarda en un archivo la última configuración X_i y en otro archivo los parámetros necesarios para inicializar un proceso en cualquier otro momento.

Como parte final se visualiza la configuración actual en la pantalla. La visualización de la simulación del modelo de Ising, se hizo utilizando gráficos de pascal. Esta visualización representa por medio de cuadros a cada spin y cada cuadro tiene la misma posición en la pantalla que cada spin en el arreglo A, es decir, el ij-ésimo cuadro representa al ij-ésimo spin en al arreglo A, dentro del programa. Ya que cada spin puede tener dirección positiva (\uparrow o I) o negativa (\downarrow o -1), un cuadro de color rojo nos indica que el spin al que representa tiene dirección positiva es decir, que la posición correspondiente a

este spin en la matriz A vale 1 y un cuadro de color azul indica que el spin que representa tiene dirección negativa o que vale -1. Ver (fig. 2.6.3)



(fig. 2.6.3)

Más explícitamente, primero se dibujan cuadros del mismo tamaño de lado L=b, el número de cuadros es igual al número de spines en el arreglo. Para esto se propone una posición inicial (x,y) y (xl,yl) en la pantalla que son los vértices superior izquierdo e inferior derecho del cuadro inicial (para dibujar un cuadro sólo es necesario dar estos dos puntos) y a partir de estas posiciones se dibujan los siguientes cuadros hasta llenar el primer renglón de spines, lo que significa que las posiciones aumentan a razón de x=x+b y y=y+b, y xl=xl+b y yl=yl+b. En seguida se inicializa nuevamente la siguiente columna es decir, la posición del vértice superior izquierdo del primer cuadro para el j-esimo renglón será (x,y), en donde x equivale a la primera columna y y al renglón respectivo. Ahora, se vuelve a llenar el siguiente renglón con los colores rojo (1) o azul (-1) para la dirección de cada spin, de manera que todos los spines en el arreglo queden representados.

Los espines se representan por medio de flechas En la visualización son representados por medio de cuadros de colores.

CAPITULO III

Resultados

III.1 La Solución Exacta del Modelo de Ising

La solución exacta del modelo de lsing en dos dimensiones, corresponde a un sistema macroscópico en donde el número de grados de libertad es de aproximadamente 10^{23} . La obtención de la solución de este modelo requirió varios años de trabajo. Onsager [8], en 1944 obtuvo la expresión para la energía libre y cinco años más tarde, la expresión para la magnetización. Posteriormente, se han efectuado varios intentos por diferentes investigadores para encontrar la solución exacta de este sistema, utilizando métodos alternativos al de Onsager [11].

El termino más relevante de la expresión de la magnetización como función del la temperatura, proveniente de la solución exacta tiene la forma [11]

$$M^{E}(t) \sim (t)^{\beta}$$
 (3.1.1)

en donde $\beta = 1/8$, $t \equiv ((T - T_c)/T_c)$, T es la temperatura del sistema, y $T_c = 2/(\ln(\sqrt{2}+1)) = 2.2692$ es la llamada temperatura crítica o de Curie. La gráfica de esta función aparece en la fig. (3.1.1).

Como se puede ver de esta figura, la solución exacta $M^{E}(T)$, para un sistema macroscópico ($N \rightarrow \infty$), tiene varias características muy peculiares, como por ejemplo, que existe un valor de la temperatura, T_{e} , tal que la magnetización cumple con

$$M^{E}(T) = \begin{cases} \neq 0 & T < Tc \\ & & (3.1.2) \\ 0 & T \ge Tc \end{cases}$$

La magnetización tiende a cero continuamente y en forma abrupta alcanza este valor. Cabe mencionar, que este comportamiento sólo se presenta para sistemas macroscópicos.



(fig. 3.1.1)

Comportamiento cualitativo de la magnetización para sistemas finitos e infinitos [13].

III.2 Sistemas de Tamaño Finito

En una simulación numérica, los sistemas tienen necesariamente un número de grados de libertad del orden¹ de N << 10^{23} . En este tipo de sistemas finitos, la función de la magnetización M(T) correspondiente, muestra discrepancias importantes con respecto a la solución del sistema macroscópico, M^E(1). Es decir, aunque la magnetización del sistema, M(T), tiende a cero continuamente, no existe un valor bien definido de la temperatura que cumpla con las características de T_c, dadas por la ecuación (3.1.2). Es decir, el cambio en M(T) no es abrupto sino suave. En la figura (3.1.1), se muestra esquemáticamente la diferencia entra la magnetización de un sistema finito y la solución exacta correspondiente a un sistema macroscópico.

La corrección que sufre la magnetización por el efecto del tamaño del sistema se expresa en la siguiente ecuación

¹ Se llama límite termodinámico, el régimen correspondiente al de un sistema cuyo número de grados de libertad es del orden de 10²³, es decir, para sistemas macroscópicos.
$< M >_{T,N} - (-at)^{\beta} N^{\beta/2\nu}$

donde v = 1 v a es un factor de escala [12]. Este comportamiento tiene como consecuencia que en la práctica, la determinación de la temperatura de transición no sea simple. En general, el estudio del fenómeno de las transiciones de fase mediante simulaciones numéricas es una tarea que no es trivial. Esto se debe al hecho de que trabajar con sistemas de tamaño finito produce cambios que pueden ser importantes, entre los resultados de la simulación y los correspondientes al sistema macroscópico. Por ello es necesario hacer un análisis cuidadoso de los resultados obtenidos de la simulación. Es posible determinar, de manera aproximada, el valor de la temperatura crítica del sistema macroscópico, utilizando los resultados obtenidos a partir de sistemas de tamaño finito. Esto consiste en simular varios sistemas con diferentes números de partículas y extrapolar el valor de T_e cuando N $\rightarrow \infty$. Otro ejemplo de esta situación, para el mismo tipo de sistemas aquí estudiado, además de la determinación de la temperatura crítica, es que cuando se simula un sistema finito, el sistema cambie espontáneamente la dirección de la magnetización. Es decir, si originalmente su magnetización era de m_0 , después de algún tiempo, la magnetización cambie a -m₀ o viceversa. Lo cual tendría como efecto que al promediar durante el tiempo total de observación, el valor de la magnetización resultará igual a cero.

En la figura (3.2.1), [13] se describe esquemáticamente el comportamiento de la distribución de probabilidad, de la magnetización para un sistema de tamaño finito en ausencia de campo magnético externo, en su evolución cuando la temperatura avanza de T < T_e a T > T_e . Para temperaturas mayores a la temperatura crítica, $T > T_c$, en donde el sistema es paramagnético, la distribución es una gaussiana, el valor más probable corresponde a cuando la magnetización es igual a cero. Es decir, en estas condiciones de temperatura y en ausencia de un campo externo, el sistema no presenta magnetización espontánea equivalentemente, para magnetizar al sistema se requiere un campo externo. Para $T = T_e$, la distribución presenta indicios de la aparición de dos valores más probables, sin embargo, existe un intervalo amplio de la magnetización $-M_0 < x < M_0$, para el que la probabilidad P(x) es comparable en todo intervalo. Esto indica que a la temperatura crítica la distribución no es estrecha, en otras palabras, no se pueden identificar valores máximos predominantes de probabilidad de la magnetización. En este caso, las fluctuaciones del sistema manifestadas en la magnetización son considerables. En la práctica esto tiene complicaciones, como por ejemplo, que la

determinación de la magnetización a la temperatura crítica o en una vecindad de esta no sea sencilla debido a fluctuaciones. Para $T < T_c$, la distribución se convierte en bimodal, los valores más probables corresponden - M_{esp} y M_{esp} , y el mínimo corresponde a cuando la magnetización sea igual a cero. En este caso, el punto relevante para este trabajo es que si bien el mínimo de la función se alcanza para M = 0 [4], la probabilidad P(M=0) no es cero, sino

$$P(M) \sim exp(-N^{1/2}) > 0$$
 (3.2.2)

Esto tiene como consecuencia, que se establezca un tunel entre los máximos de la función cuya probabilidad es mayor que cero, que permita al sistema transitar de un estado con magnetización M_{esp} a otro cuya magnetización es - M_{esp} y viceversa.

Para sistemas macroscópicos, esta transición tiene una probabilidad que tiende a cero cuando $N \rightarrow \infty$, según puede verse en la ecuación (3.2.2). Lo cual implica que el fenómeno descrito antes no es observable en la práctica. En la figura (3.2.2), se muestra cualitativamente la diferencia entre la magnetización del sistema macroscópico y del sistema finito, respectivamente.



Comportamiento cualitativo de un material ferromagnético en ausencia de un campo externo. En la figura a, se muestra la magnetización para temperaturas mayores a Te. En este caso, la probabilidad de que M=0 es alta, es decir el material tiene un comportamiento paramagnético. Para cuando la temperatura es igual a Te (fig. b) o en la vecindad en donde se observa la transición de fáse, se observa un intervalo muy amplio de posibles valores para la magnetización y de esta forma su probabilidad de ocurrencia tiende a ser semejante. Por último, en el caso da temperaturas menores a Te; se espera que la magnetización tome los valores de -M a +M con una probabilidad da, y la probabilidad de que M = 0 se reduce notablemente, aunque no es precisamente cero ya que es un sistema finito, lo que significa que el sistema pueda transitar de -M a M a el inversamente.







Comportamiento cualitativo de la magnetización y su probabilidad para un sistema macroscópico (a) y para un sistema finito (b), en temperaturas menores a la temperatura crítica

III.3 Cálculo de la Magnetización

En esta sección se revisa el cálculo de propiedades de interés que en este caso es la magnetización. Para cada configuración en la cadena de Markov, se calcula la magnetización que se define como

$$M_{j} = \sum_{i=1}^{N} \mu s_{i}^{(j)}$$
(3.3.1)

en donde μ es el momento magnético, si^(j) representa a la i-ésima variable de spin en la configuración j y Mj es la magnetización para la j-ésima configuración en la secuencia de la cadena de Markov. Por lo tanto, el promedio de la magnetización (M) se calcula sumando cada Mj y dividiendo la suma entre el total de configuraciones, lo anterior se expresa como sigue

$$\langle \mathsf{M} \rangle = \sum_{j} M_{j} / m^{*}$$
(3.3.2)

en donde j es un índice que corre sobre todas las configuraciones m^{*} de la cadena, designadas para el cálculo de los promedios, y en ausencia de un campo magnético externo a $\langle M \rangle$ se le conoce como magnetización espontánea.

A fin de determinar la longitud de la cadena de Markov, es decir el número de configuraciones m^{*} que se tomaran en cuenta para el calculo de $\langle M \rangle$, este se propone de manera que en promedio se elija m₀ veces cada partícula s_i. Lo que significa que la cadena tendrá m^{*} = m₀N estados y de esta forma se espera tomar una muestra representativa sobre todo el espacio configuracional. Por otra parte y como se menciono anteriormente, la configuración inicial que se eligió de manera arbitraria para formar la cadena de Markov, puede no corresponder a una configuración en equilibrio para un estado termodinámico que se pretende simular, por lo que es necesario dejar evolucionar la simulación para que este estado inicial no influya en el calculo de propiedades físicas. Esto significa que se va a generar un número m₁ adecuado de configuraciones, las cuales se desceharan y a partir de la última configuración se inicia el calculo del promedio $\langle M \rangle$. Siendo en este caso

$$\langle M \rangle = 1/(m_F - m_I) \sum_{j=m_I}^{m_F} M_j$$

(3.3.3)

donde me es la última configuración en la cadena de Markov

Para comprobar que se ha llegado al equilibrio y por lo tanto, que la configuración inicial X_0 no va a afectar el valor promedio de equilibrio, se comparan los promedios parciales de la propiedad física de interés con el promedio total sobre la cadena de Markov de m puntos. Es decir, los m puntos en la cadena se dividen en s subintervalos de longitud m₀ y sobre cada uno de estos subintervalos, se calcula la propiedad de interés. De tal manera que los s promedios parciales que resulten puedan representarse en una gráfica y observar su tendencia con respecto al promedio total, que se representa por medio de una recta horizontal, cuando el sistema esta en equilibrio sólo se observaran fluctuaciones de los promedios parciales sin ninguna tendencia conceciente, alrededor de la recta horizontal. A esta gráfica se le conoce como carta de control.

Otra forma equivalente de verificar esto, es comparando la evolución en el tiempo de una de las propiedades de interés partiendo de dos configuraciones diferentes X_0 . Cuando se ha llegado al equilibrio, el valor del promedio es independiente de la configuración inicial X_0 .

III.4 Resultados

En esta sección se presentan y analizan los resultados obtenidos de la simulación realizada para esta tesis. Los resultados que aquí se muestran, se calcularon con un programa en lenguaje FORTRAN 77, elaborado para este trabajo y con el cual se generaron todos los resultados que aquí se presentan. En este caso, se utilizó el generador de números pseudo-aleatorios intrínseco de la máquina en donde se ejecutó la simulación. En el apéndice D, se encuentra el código FORTRAN con el que se realizó la simulación. El programa antes descrito se escribió también en lenguaje PASCAL, y se muestra en el apéndice E. En este caso, la rutina utilizada para la generación de los números fue tomada de la referencia [14] y aparece explícitamente en el código.

Para realizar dicha simulación se ejecuto el programa tomando diferentes números de partículas, estos son

$$N = 100$$

 $N = 225$
 $N = 400$
 $N = 625$

Para cada tamaño de N se simularon diferentes temperaturas, desde T = 0.5 hasta T = 3.5, el intervalo se dividió de tal manera, que quedaron 11 temperaturas para el cálculo de $\langle M \rangle$.

Por experiencia se sabe que en general, al simular un sistema, resulta más difícil ordenar un sistema que desordenarlo. Por ejemplo, si se inicia la simulación a partir de una configuración desordenada y desde una temperatura baja, en el proceso de ordenamiento se corre el riesgo de que el sistema caiga en un estado metaestable, de modo que no se sabe cuánto tiempo tardará el sistema para salir de dicho estado, y en el caso de una simulación, lo anterior puede resultar muy poco eficiente. Así, la táctica que se eligió para evitar este tipo de problemas fue la siguiente. Para cada número de partículas, se inició la simulación a partir de ambas, una configuración desordenada y una ordenada, y desde la temperatura más alta. Las diferentes temperaturas se tomaron de manera decreciente, desde 3.5 hasta 0.5. Para cada temperatura se generaron m_1 configuraciones que no se tomaron en cuenta para el cálculo de $\langle M \rangle$ es decir se eliminaron, y a partir de la última configuración se hizo el cálculo del promedio con los m estados o configuraciones siguientes. Cada vez que se eligió una nueva temperatura, se tomó la última configuración que resulto de la temperatura anterior y de esta forma se ahorró tiempo de equibración para llegar al equilibrio.

En las figuras (3.4.1)-(3.4.4) aparecen las gráficas de los valores instantáneos de la magnetización como función del número de configuraciones generadas. Estas gráficas corresponden a un sistema de N = 225 partículas para las temperaturas T = 3.5, 2.5, 2.0 y 1.5. Esta serie de simulaciones se obtuvieron tomando como paso inicial una configuración totalmente desordenada, para la temperatura más alta utilizada, que es igual a T = 3.5. Aquí se puede ver la evolución en el tiempo de la magnetización del sistema desde el inicio de la simulación hasta la última configuración producida, lo cual equivale a un total de 270 000 configuraciones. De estas,

las primeras 90 000 fueron descartadas por involucrar el tiempo que tarda el sistema en desechar el efecto producido por la configuración inicial, siendo este el periodo de equilibración. Los dos siguientes intervalos de 90 000 cada uno, se utilizaron, el primero para evaluar el promedio de la magnetización y el segundo para su verificación. Los promedios que se presentan en este trabajo se calcularon tomando las últimas 90 000 configuraciones. El resultado final es que el sistema se ordena con magnetización igual a -1, es decir los spines se orientan hacia abajo. Cabe mencionar que la transición de fase hubiera podido ocurrir de tal forma que, el sistema se hubiera podido ordenar en sus spines hacia arriba de forma totalmente equivalente.

En las figuras (3.4.5)-(3.4.8), se muestra otra serie de resultados obtenidos en condiciones similares a las de la serie antes descrita, pero habiendo partido de una configuración totalmente ordenada para la temperatura de 3.5. Al comparar las gráficas correspondientes a la misma temperatura, de cada una de las dos series, digamos, para T = 3.5, las figuras $(3.4.1) \ge (3.4.5)$ para T = 2.5. las figuras (3.4.2) y (3.4.6), y así sucesivamente, se puede observar que el resultado del valor absoluto de la magnetización es independiente de la configuración inicial elegida. En este caso, es importante destacar que a pesar de que se partió de una configuración ordenada, con una magnetización de +1. en las gráficas se puede observar que el sistema parte de tener una magnetización de igual a 1 (ver fig. 3.4.5 para T = 3.5) y rápidamente se desordena alcanzando su magnetización un valor que fluctúa alrededor de cero. Cuando la temperatura es T = 2.5 (ver fig. 3.4.6) se observa que el sistema, tiene fluctuaciones importantes y los resultados parecen apuntar a que el sistema se está ordenando con sus spines hacia abajo, es decir, que el promedio de la magnetización es menor que cero. Al decrecer en temperatura y alejarse de la temperatura crítica, fig. 3.4.7 para T = 2, se observa un cambio súbito en el orden del sistema. Es decir, la magnetización del sistema cambia de valores negativos a valores cercanos a +1. Esta es una consecuencia de trabajar con sistemas finitos, los cuales tienen un comportamiento tal, que pueden pasar de una magnetización positiva a una magnetización negativa y contrariamente. El comportamiento anterior se analiza en la sección III.2.

Una característica importante a notar es la dependencia de las fluctuaciones con la temperatura. Es bien sabido que para los resultados cuyas temperaturas son cercanas a la crítica, las fluctuaciones son importantes [4]. Esto tiene como consecuencia que las fluctuaciones de los resultados para T = 1.5 sean menores que las correspondientes a T = 2.0. Ver figuras (3.4.3) y (3.4.4) de la primera serie o bien, (3.4.7) y (3.4.8) de la segunda serie.

En las figuras (3.4.9)-(3.4.12) se encuentran los resultados de la magnetización versus la temperatura¹, obtenidos de la simulación, para distintos números de partículas: N = 100, 225, 400, 625 respectivamente. Como se puede ver de estas gráficas la diferencia principal se encuentra en la región crítica.

En la figura (3.4.13) se compara el comportamiento en la región crítica, entre la solución exacta por un lado y el diagrama de fases como función del número de partículas, obtenido de la simulación, por el otro lado. Como se puede apreciar, a mayor número de partículas en el sistema, más abrupto es el decrecimiento de la magnetización. Cabe recordar que la expresión para la magnetización exacta expresada en la ecuación, describe el comportamiento de la región crítica.

lo cual se conoce como diagrama de fase





М

(Fig. 3.4.1)



Se grafica la magnetización en función de las configuraciones para un sistema de N=225 partículas y para la temperatura de T = 2.5, partiendo de la última configuración que se generó para la temperatura anterior.



М

Se grafica la magnetización en función de las configuraciones para un sistema de N=225 partículas y para la temperatura de T = 2.0, partiendo de la última configuración que se genero para la temperatura anterior.





Se gráfica la magnetización en función de las configuraciones para un sistema de N=225 partículas y para la temperatura de T = 1.5, partiendo de la última configuración que se generó para la temperatura anterior.



(Fig. 3.4.4)



Se grafica la magnetización en función de las configuraciones para un sistema de N=225 partículas y para la temperatura de T = 2.5, partiendo de la última configuración que se generó para la temperatura anterior.



М

Se grafica la magnetización en función de las configuraciones para un sistema de N=225 partículas y para la temperatura de T=2.0, partiendo de la última configuración que se generó para la temperatura anterior.



М

Número de Configuraciones

Se grafica la magnetización en función de las configuraciones para un sistema de N=225 partículas y para la temperatura de T=1.5, partiendo de la última configuración que se generó para la temperatura anterior.

ł



(Fig. 3.4.8)

Se grafica el promedio de la magnetización en función de la temperatura, partiendo de una configuración desordenada y de la temperatura más alta que es de T=3.5, para un sistema con un número de partículas de N=100



Se grafica el promedio de la magnetización en función de la temperatura, partiendo de una configuración desordenada y de la temperatura más alta que es de T=3.5, para un sistema con un número de partículas de N=225



Se grafica el promedio de la magnetización en función de la temperatura, partiendo de una configuración desordenada y de la temperatura más alta que es de T=3.5, para un sistema con un número de partículas de N = 400



Se grafica el promedio de la magnetización en función de la temperatura, partiendo de una configuración desordenada y de la temperatura más alta que es de T=3.5, para un sistema con un número de partículas de N=625



Temperatura

.



Capítulo IV

Conclusiones y Comentarios

El primer objetivo de esta tesis ha sido el estudio del método de Monte Carlo para el cálculo de integrales multidimensionales, así como su aplicación para resolver problemas de la física estadística, como lo es el algoritmo de Metrópolis. Esto se logró al elaborar códigos en lenguaje FORTRAN 77 y PASCAL con los cuales se han instrumentado y probado los métodos de estudio.

El segundo objetivo fue la realización de una simulación numérica así, como la familiarización con el concepto de modelo matemático en la física actual teórica. Esto se alcanzó al estudiar el prototipo de transición de fase orden-desorden del llamado modelo de lsing que es uno de los modelos más importantes y que posee más aplicaciones en la física estadística.

Como resultado de todo esto se estudiaron los efectos inevitables de la instrumentación de una simulación en una computadora. Esto es, por ejemplo, la influencia del empleo de sistemas de tamaño finito y la dependencia de los resultados como función del número de partículas que componen al sistema. Así mismo, el uso de los números pseudo-aleatorios para reemplazar a los números aleatorios involucrados en métodos tipo Monte Carlo. Lo anterior se conoce como errores sistemáticos, es decir, son las posibles desviaciones en los resultados de un experimento, causadas por lo general, debido a lo defectuoso de la técnica, a las cualidades del observador, a la imperfección de los instrumentos utilizados en el experimento, etc. En este trabajo nos enfrentamos a los siguientes posibles errores sistemáticos:

1) Adoptar para la simulación un sistema reducido de aproximadamente 10^3 grados de libertad. Como ya se mencionó anteriormente, no es posible trabajar con un sistema que tenga un número de partículas realista (10^{23} grados de libertad), por lo que deberá elegirse un tamaño realista y adecuado para obtener buenos resultados. Así es que de acuerdo a los recursos con que se cuenta, se debe tomar el número de partículas que se acerque lo más posible al del sistema real.

- 2) El uso de números generados por medio de una función determinista. Los números pseudo-aleatorios son aquellos que se generan en base a una función determinista y que además satisfacen pruebas estadísticas de independencia. Estos números que en general son periódicos no son en realidad aleatorios, por lo que su uso podría afectar el cálculo del promedio de variables físicas, sin embargo para saber si los números darán resultados aceptables, podemos generar varias muestras las cuales deberán de distribuirse de cierta manera y si los resultados están de acuerdo con lo que se espera, podemos enforces confiar en estos números.
- 3) El tamaño de la muestra, es decir el largo de la cadena de Markov. Aunque teóricamente puede demostrarse que las cantidades que se calculan con (2.3.4) coinciden con el promedio de (2.3.1) cuando m→∞, en la práctica se debe comprobar si sucede efectivamente lo mismo tomando una cadena que tenga un número grande de estados o configuraciones. Esto se puede hacer comparando los resultados con los sistemas para los que previamente se haya encontrado su solución por otro método que no sea la simulación.

En resumen, se considera un resultado bastante satisfactorio haber efectuado todas las acciones requeridas, para instrumentar le método de simulación de Monte Carlo (Metrópolis), de un modo no trivial de la mecánica estadística tomando en cuenta lo siguiente

No se adoptaron elementos elaborados previamente por otros autores.

Se obtuvieron los resultados correctos comparados con la solución exacta.

Lo anterior involucró el entendimiento y el empleo práctico de:

1. El algoritmo de Metrópolis

- a) Números aleatorios y pseudo-aleatorios
- b) Cadena de Markov
- c) Programación del código
- 2. Modelo de Ising
 - a) Definición
 - b) Energía configuracional

- c) Límite termodinámico
- d) Efectos de tamaño finito
- e) Fluctuaciones de la magnetizaciónf) Programación del modelo

APÉNDICE A

Programa para computadora en lenguaje PASCAL, que evalúa integrales numéricas con el método de Monte Carlo

PROGRAM METODOS; uses ert; type arregio = array [1..20] of real: var x.a.b.tamint arregio. area.H.yi.xi.fxi.Fn.suma : real: integera op.j.n1 i.ns.n real: Function evalua(x : arregio) : real: beein evalua:=x[1]*x[1]+x[2]*x[2]: end; procedure metodol; begin cirser: for j:=1 to n1 do begin gotoxy(32,2);write('Intervalo para x'.j); goloxy(2.5);write(* :40); gotoxy(2.5);write('limite interior = '); readIn(a(j)): gotoxy(2.7);write(' ':40); gotoxy(2.7):write('l;mile superior = '); readin(b[j]); end; gotoxy(2.9);write('valor de H = '); readin(H); gotoxy(2.11);write('Numero de tiradas n='); readin(n). area:=1; for j:=1 to n1 do begin tamint(j):=b[j]-a[j]: area:=area*tamint[j]: end: area:=area*H: ns:=0;i:=0; repeat yi:=H*random: for j:=1 to n1 do s[j]:=a[j]+tamint[j]*random; fxi:=evalua(x); if yi <= fxi then nst=ns+1; i:=i+1; until(i = n); Fn:=area*(ns/n); gotoxy(2,15);write('El resultado de la integral es Fn = ',Fn:4:2); readin; end: procedure metodo2; begin cirser; for j:=1 to n1 do begin gotoxy(32.2);write('Intervalo para x'j); gotoxy(2.5);write('l;mite inferior = ');

```
readInta[j]);
gotoxy(2,7);write('1;mite superior = ');
readIn(b[j]);
  end;
 gotoxy(2.9):write('Numero de tiradas n= ');
 readln(n);
 for j:=1 to n1 do
  tamint[j]:=b[j]-a[j];
 area:=1;
 for j =1 to n1 do
   begin
     tamint[j]=b[j]-a[j];
     area:=atea*tamint[j];
   end,
 suma;=0;
 i:=0;
 repeat
    for j=1 to n1 do
     x[j]:=a[j]+tanúnt[j]*random;
fxr:=evaluatx);
     suma:=suma+fxi;
     i:=i+1;
 until (i = n);
 Fn:=area*(1/n)*suma:
 gotoxy(2.15);write('El resultado de la integral es Fn = ',Fn:4:2);
 readin;
end;
```

(***** PROGRAMA PRINCIPAL *****)

```
begin

randomize;

repeat

closer;

gotosy(36.5);write('M E N U');

gotosy(26.7);write('D); M1;dod de ",sito-falla");

gotosy(26.7);write('D); M1;dod de "muestra-media");

gotosy(26.1);write('D); S. Salida');

gotosy(35.14);write('Opcien: ');readht(op);

n1;=2;

case op of

1:metodo1;

2:metodo2;

end;

until (op = 3);

end.
```

APÉNDICE B

Números aleatorios

Los números que se escogen de manera aleatoria son muy utilizados en diferentes clases de aplicaciones. Sin embargo, parece difícil dar una definición exacta de lo que es un número aleatorio, una posible definición es la siguiente: "La selección de un elemento de un colectivo es al azar cuando cada elemento del colectivo tiene igual probabilidad de ser escogido" [15]. Si bien lo anterior es correcto, en un experimento real, cómo podemos asegurar que cada elemento, tiene la misma probabilidad de ocurrencia que los demás y que por lo tanto la secuencia ha sido elegida aleatoriamente. Se puede pensar que utilizando un método casual aseguramos que la secuencia de números sea realmente alcatoria, por ejemplo, para generar números alcatorios se puede utilizar un directorio telefónico, abrirlo al azar y tomar el primer número en donde la vista se detenga, tomar las primeras tres cifras del número, cerrar nuevamente el directorio y repetir el proceso anterior hasta completar el total de números que se quieran generar. Del método anterior se observa que pueden darse posibles errores es decir, si la guía esta usada habrá algunas páginas que se abran con mayor facilidad que otras, de modo que se dará la tendencia de tomar los números de una misma sección, también existe la posibilidad de que la elección no sea completamente imparcial ya que algunos números podrán llamar más la atención que otros. Entonces, la única garantía de aleatoriedad en los números se da aplicando las pruebas estadísticas de aleatoriedad (este tema será tratado más adelante). Tomando en cuenta lo anterior, nos referiremos a una secuencia de números con un posible comportamiento aleatorio, independientes entre si y con una distribución específica, así, podemos entender aunque de una manera vaga, que los números elegidos al azar no deben estar correlacionados unos con otros (¿Cómo se puede asegurar que dos números son o no independientes?, el grado de independencia entre dos números es una idea que tiene que ver con su aplicación en particular. Cada aplicación tiene sus propias exigencias, por lo tanto no se puede dar una regla general que las satisfaga) y deberán tener una probabilidad especifica de caer en un valor determinado de un intervalo. Cuando se hace referencia a la distribución uniforme, significa que todos los números tienen la misma probabilidad de ocurrencia en un intervalo [a,b] dado. Generalmente se toma el intervalo [0,1].

Hay muchas maneras de generar números aleatorios. Por ejemplo, se pueden lanzar un par de dados, en este caso la secuencia de números será aleatoria si los dados no están predispuestos a caer en una determinada cara. Lanzar una ficha a un cuadro subdividido en diez regiones del mismo tamaño, aunque en este caso, para evitar que la ficha salga del área del rectángulo, se dará la tendencia de lanzar la ficha al centro del mismo y los números en esta región tendrán mayor probabilidad que aquellos en las extremos. En una urna se colocan fichas de igual forma, las fichas están enumeradas y se van sacando una a una reponiéndose una vez que se haya observado su número. Si las fichas no son idénticas, entonces algunas tendrán mayor probabilidad de ser elegidas que otras. En los métodos antes descritos se obtendrán resultados sesgados, debido a que aparentemente se eligió una forma adecuada para generar secuencias de números aleatorios. En este caso, hay algunos métodos que son mejores que otros y una manera segura de comprobarlo, es sometiendo los resultados a pruebas estadísticas.

En algunas aplicaciones se han utilizado tablas de números aleatorios generados previamente, que para el caso de aplicaciones manuales han dado buenos resultados, sin embargo su uso en computadoras es reducido va que tienen ciertos inconvenientes. Es decir, la tabla puede ser demasiado corta o extensa y el tiempo de captura será largo y tedioso ocupando espacio en la memoria que puede ser útil posteriormente. La acepción anterior y otros métodos (las máquinas generadoras de números aleatorios como ERNIE) condujeron al desarrollo de expresiones aritméticas para computadoras para la generación de números aleatorios. John Von Neumann en 1946, propuso el método de los cuadrados medios, que consiste en tomar un número de n dígitos elevarlo al cuadrado, agregar ceros a la izquierda del número hasta completar 2n dígitos, extraer los n dígitos medios (que será el número aleatorio buscado) y repetir tantas veces, como números se quieran generar. De aquí surgió una objeción, cómo se puede llamar a una secuencia de números, aleatoria, cuando cada número que se genera depende del anterior. Si se generan números aleatorios de acuerdo a una función determinista, en realidad no son aleatorios aunque parezcan serlo, en este caso les llamaremos "pseudoaleatorios" si además satisfacen ciertas pruebas estadísticas de independencia. Si se ha seleccionada cuidadosamente un buen método determinístico generador de números "pseudo-aleatorios" y estos son usados para alguna aplicación, se pueden obtener buenos resultados.

El problema de utilizar el método de los cuadrados-medios es que tiende a degenerar, es decir en algún momento, en la secuencia se repite indefinidamente un mismo número. También el método es lento y en algunos casos su periodo puede ser corto. Por lo tanto, una característica importante de los métodos es que no degeneren en algún valor.

En una secuencia de números pseudo-alcatorios se busca que el periodo sea lo suficientemente largo para cubrir las necesidades de cualquier aplicación. Sin embargo, un periodo infinito nos es una condición suficiente para decir que los números son alcatorios, ya que dentro de una secuencia infinita no periódica se pueden dar patrones de repetición que tal vez a simple vista no resultan obvios. Por ejemplo, en la secuencia infinita de decimales del número racional π , se puede pensar que tenemos una secuencia aceptable de números alcatorios, sin embargo se han observado algunos patrones de repetición. Abajo se puede ver, que el 26 se repite en medio de un cierrto patrón de repetición [16]



Por lo anterior, no debemos confiar de nuestro criterio intuitivo para decidir si una secuencia es aleatoria o no. Entonces, cómo podemos saber que una secuencia de números con aparente comportamiento aleatorio, es en realidad aleatoria.

Pruebas Estadísticas de aleatoriedad. [14,16].

Existen algunas pruebas que pueden utilizarse para comprobar la aleatoriedad en un conjunto de números generados por medio de una función determinista, sin embargo el número de pruebas a las que se somete una secuencia, depende de la exigencia de aleatoriedad que cada aplicación en particular requiere, con respecto a la independencia entre los números. Por ejemplo, si la secuencia indica ser aleatoria después de N

pruebas, no se puede asegurar que en realidad lo sea, ya que quizás la secuencia no satisfaga la prueba N+1 [16].

Prueba Ji-cuadrada

Una de las pruebas más utilizadas es la ji-cuadrada, para esta prueba el intervalo de posibles resultados, se divide en k subintervalos o clases de igual longitud. Las clases serán mutuamente excluyentes y colectivamente exalustivas. Es necesario que el número n de observaciones sea grande es decir, que el valor esperado np (donde p es la probabilidad de cada clase) en cada clase, sea por lo menos de cinco observaciones, sin embargo se sugiere elegir n lo más grande posible para obtener una prueba más poderosa. En cada subintervalo se compara la frecuencia observaciones son una muestra de una distribución uniforme. Por lo tanto, consideramos la suma del cuadrado de las diferencias

$$V = (Fe_1 - Fo_1)^2 + (Fe_2 - Fo_2)^2 + \dots + (Fe_k - Fo_k)^2 \quad (1)$$

Sin embargo, en este caso V esta asignando igual peso a todas las clases, cuando algunas de ellas tendrán una probabilidad más alta de ocurrencia que otras. Por lo tanto, si V es un estadístico justo (1) se puede escribir como

$$V = (Fe_1 - Fo_1)^2 + (Fe_2 - Fo_2)^2 + \dots + (Fe_k - Fo_k)^2$$

$$Fe_1 \qquad Fe_2 \qquad Fe_k$$

$$V = \sum_{i=1}^k (Fe_i - Fo_i)^2 / Fe_i \qquad (3)$$

en donde

Fe_i es la frecuencia esperada de la clase i, Fe_i = $np_i y p_i$ es la probabilidad de

la i-ésima clase.

Foi es la frecuencia observada en la clase i.

k es el total de clases.

n es el número de observaciones que se suponen independientes.

Si tomamos en cuenta que

$$\sum_{i=1}^{k} Fo_{i} = n \qquad y \qquad \sum_{i=1}^{k} p_{i} = 1$$
(4)

y desarrollando los binomios, V queda como

$$V = 1/n \sum_{i=1}^{k} (Fo_i^2 / p_i) - n$$
 (5)

Por último, se compara el valor de estadístico V con el valor en tablas de una variable ji cuadrada con v = k-1 grados de libertad con un nivel de confianza 1- α o un nivel de significación α . Si el estadístico V es menor que el valor en tablas, no se puede rechazar la hipótesis de que los números siguen un comportamiento aleatorio y se distribuyen de manera uniforme.

Prueba Kolmogorov-Smirnov

La prueba Kolmogorov-Smirnov es usada para comprobar la hipótesis de que una muestra de tamaño n se comporta de acuerdo a una función especifica continua F. Esta prueba utiliza la función de distribución acumulada F(x), que se define como

$$F(x) = p(X \le x) \tag{6}$$

es decir, la probabilidad de que $X \leq x$.

Cuando se trabaja en el intervalo [0,1], es decir cuando $0 \le x \le 1$, la probabilidad de que $X \le x$ es precisamente, x. A la probabilidad definida en (6) se le llama función de distribución acumulada y para esta prueba F(x) deberá ser continua.

Ahora, si se generan n valores independientes x_i , entonces se puede construir la función de distribución empírica, que se define como

$$F_n(x) = i/n \tag{7}$$

en donde i es el lugar que ocupa en la secuencia el número x_i , si los números se ordenan de manera ascendente. La prueba de Kolmogorov-Smirnov se basa en la diferencia que hay entre F(x) y $F_n(x)$, es decir si $F_n(x)$ varia demasiado de la distribución acumulada hipotética F(x), podemos decir que el generador de números aleatorios no aproxima los n datos a la función específica F(x).

Entonces para hacer la prueba, tomamos los siguientes estadísticos

$$D_{n}^{+} = \max (F_{n}(x) - F(x))$$

$$i$$

$$D_{n}^{-} = \max (F(x) - F_{n}(x))$$
(8)

en donde, D_n^+ mide la máxima desviación cuando $F_n(x)$ es mayor a F(x) y D_n^+ mide la máxima desviación cuando $F_n(x)$ es menor a F(x).

En seguida se expresa el algoritmo para aplicar la prueba de K-S:

1) Generar n números aleatorios uniformes.

2) Ordenarlos de manera ascendente, es decir

 $x_1 \leq x_2 \leq x_3 \leq \ldots \leq x_n.$

y calcular $F_n(x_i)$ para cada valor x_i que se supone independiente, como esta definida en (7).

3) Calcular el estadístico D de la siguiente forma

$$D_n^+ = \max_{1 \le i \le n} (i/n - F(x_i))$$

$$D_{n} = \max_{1 \le i \le n} (F(x_{i}) - (i-1)/n)$$
(9)

 $D_n = \max (D_n^* - D_n^*)$

4) Comparar el estadístico D_n con el valor critico d_{α} , para una muestra con n mayor o igual a 20, en donde d_{α} se da por

$$d_{.05} = 1.36 / (n)^{-5}$$

$d_{.01} = 1.63 / (n)^{..5}$

con un nivel de significancia de .05 y .01 respectivamente. 5) Si el estadístico D_n es menor al valor crítico d_{α} , no se puede rechazar la hipótesis de que los números se generaron a partir de una distribución uniforme.

(10)

APENDICE C

El método de Metrópolis aplicado a un fluido

Cuando se emplea el método de Metrópolis, para simular sistemas en donde las partículas tienen una posición bien definida sobre una latiz regular, como en el modelo de Ising, las diferentes configuraciones que se generan para formar la cadena de Markov, dependen sólo del sentido de cada una de estas partículas, ya que su posición es fija. Es decir, si tenemos un sistema de N partículas, en donde cada partícula tiene una posición (i,j) en una latiz cuadrada y un sentido S_i, para generar una configuración de prueba, se elige una partícula y únicamente se le cambia el sentido.

Sin embargo, cuando se simula un fluido, las N partículas que lo componen se podrán desplazar a través de todo el volumen en donde esta contenido el líquido. Esto quiere decir, que cada configuración depende de la posición que cada partícula ocupa en el espacio físico. Así, para proponer una configuración de prueba, supóngase que se tiene un punto X_n (configuración actual) en la cadena de Markov. Para generar X_{n+1} se crea un paso prueba o un nuevo punto X_p. Un paso prueba es un punto tal que, si cumple con ciertas condiciones podrá ser el sucesor del último punto X_n en la cadena de Markov. Entonces, X_p se puede escoger de un conjunto de Z estados vecinos de X_n. X_p se genera dejando N-1 partículas con las mismas coordenadas correspondientes a la configuración actual X_n, las coordenadas de la k-ésima partícula restante r_k = (x_k,y_k,z_k) elegida al azar, son elegidas también al azar dentro de un cubo cuyos lados miden D (el tamaño que deberá tener D se explica más adelante), en donde D/2 representa el máximo desplazamiento en cada un de los ejes: x, y o z de la partícula r'_k = (x'_k,y'_k,z'_k), en donde

$$x'_{k} = x' + (D/2) * \xi_{1}$$

 $y'_{k} = y' + (D/2) * \xi_{2}$
 $z'_{k} = z' + (D/2) * \xi_{3}$

son las coordenadas de la k-ésima partículaen la configuración de prueba X_p . Y

$\xi_i \in [-1,1]$

Los desplazamientos de cada coordenada son a partir de r_k y el centro del cubo es r_k .

Con una terna de números aleatorios distribuidos uniformemente en el intervalo [-1,1], se podrán escoger las coordenadas de la partícula r'_k para generar el paso prueba. El valor de k se elige también de manera uniforme y aleatoria por medio de un cuearto número aleatorio. Así, la elección del paso prueba es al azar y uniforme.

Una pregunta que resulta importante es de qué tamaño tendrá que ser D. Si se elige una D muy grande, entonces p(Xp) será mucho más chica que p(Xn) y la mayoria de pasos prueba serán rechazados llevándonos a una ineficiente muestra. Por otra parte, si D es pequeño la mayoría de los pasos prueba serán aceptados, pero la caminata aleatoria no se moverá muy lejos lo que dará como consecuencia obtener una muestra de mala caliadad. Una buena regla para conseguir un tamaño D eficiente, es tomarlo a fin de que alrededor del 50% de los pasos prueba sean aceptados. Por lo tanto, D se calculará de acuerdo a ensayos prueba-error.

Para aplicar condiciones periódicas a la frontera, se llena con réplicas idénticas el espacio alrededor de la caja original, tal como se muestra en la figura 1.

30	30 10	°∕>
\$ 20	$\rightarrow \frac{1}{2}$	20 20
~ `	3 8	30
20 20	$\frac{1}{2}$	20 20
3	30	°C

(fig. 2)

Condiciones periódicas a la frontera de un sistema bidimensional. Las moléculas son orientables y forman parte de un fluido. El cuadro central representa la celda original y cada uno de los demás cuadros son réplicas de ésta.
APÉNDICE D

Programa en lenguaje FORTRAN 77 para simular el modelo de Ising.

implicit none real hamilt.enernya.enerant.du.t real promagne.rn1.u1.u0.j1.s1.tot1 integer tot.gen.r.c.nl.switch.n.m.tipo integer recha.acept.magtot.magpar.tres integer temp1.temtot.r.t.seed integer a(0/25.0:25) common fleet/ n1.11.seed.switch.tot.tipo common/ mat/ a common/dat/m.n common/ dit/ du common/ vo/ c.r common/ener/utrul common/energ/energal commont acet acent common/ re/ recha commune and termined a 11 CONSTANTE DE ACOPLAMIENTO SWITCH. DUCIDE SI SE GENERA UNA CONF. INICIAL O SE REINICIA UN PROCESO č TOT / TOTAL DE CONFIGURACIONES À GENERAR EN LA CADENA С N1 : NUMERO DE PARTICULAS 00000 SEED SEMILLA PARA GENERAR NUMEROS ALEATORIOS TIPO DECIDE DE QUE TIPO DE CONFIGURACIÓN SE INICIA LA SIMULACIÓN, IJ.TEMPLTRES CONTADORES A - MATRIZ QUE GUARDA EN EL (LD-ELEMENTO, LA VARIABLE DE SPIN (S) ĉ --DE LA PARTICULA LOCALIZADA EN EL (LD-ESIMO LUGAR DE LA LATIZ ē R.C.: NUMERO DE RENGLONES Y COLUMNAS RESPECTIVAMENTE, EN LA MATRIZ A С HAMILT . NOMBRE DE LA FUNCION QUE CALCULA LA ENERGIA DEL MODELO č ENERANT, ENERNVA: ENERGIA DEL ÉSPIN QUE SE ELIGIO AL AZAR CON ċ RESPECTO A SUS VECINOS MAS CERCANOS, EN LA CONFL ACTUAL, ENERGIA ĉ DEL SPIN RESPECTO A SUS VI CINOS MAS CERCANOS, EN LA CONFL DE PRUEBA ē ULUO, ENERGIA DE LA CONF- DE PRUEBA Y ACTUAL ē DU : GUARDA LA DIFURENCIA DE ENERGIAS ē RECHA ACEPT TOTAL DE CONFL RI CHAZADAS Y ACEPTADAS č MAGPAR MAGNETIZACION TOTAL PARA CADA CONFIGURACION č MAGTOT - SUMA DE LA MAGNETIZACIÓN SOBRE TODA LA CADENA C SU: NORMALIZA LA MAGNETIZACION UN UL INTERVALO (0,1) ******* RUTINA PRINCIPAL catt tectur1 c LSTE PROG. SOLO CONTEMPLA NUMERO DE PART. QUE TENGAN CUADRADO ENACTO open(10.file = 'resulda') write(10,*) Tai semilla es "seed rn1=n1c=sqrt(rn1) r≠c if (switch eq.0) then at (tipo eq.1) then call continuer, seed) call guarda3(c.r) endit iftipo eq 21 then call contin2(c.r) call guarda3 endit else call lectur2(c.r) endif open(11.file = 'temp') read(11.*) tentot do 42 temp1=1.tentot call lectur3(c.r)

ē

read(11.*)(set)mO do 20 i=1,r do 10 j=1.e u0=u0+hamilt(i,j) continue 10 20 continue u0=1*j1*u0 write(10,*) 'La semilla es ',seed do 40 tres=1.3 recha=0 acept=0 magtot=0 do 30 gen=1.tot call selenva(c.r.t.j1.seed) enernva= hamilt(n.m) ul=u0 - j1 * (enernva- enerant) du≖u1-u0 call prucha(seed.t) magpar=0 do 27 i=1.r do 26 j=1.c magpar=magpar+a(i,j) 26 continue 27 continue nuglot=magtot+magpar 30 continue tot l=tot promagne=(1/tot1)*magtot simpromagne/rn1 write(10,*) 'temperatura = '.t write($(0, ^{*})$ 'temperatura = .t write($(0, ^{*})$ 'el prom de la magn es = ',promagne write($(0, ^{*})$ 'si = ',si write($(0, ^{*})$ 'la magne total es = ',magtot write($(0, ^{*})$ 'el numero de conf acep es ',acept write(10,*) el numero de conf recha es 'recha 40 continue call guarda3(c.r) 42 continue elose(10) close(11) call guarda2(c.r) мар end c subroutine lectur1 implicit none real if integer n iswitch.tot.tipo.seed common/lect/ n1.j1.seed.switch.tot.tipo open(12,file = 'paramet') read(12,*) n1.j1.seed.switch.tot.tipo close(12) return end C ******* LECTURA DEL ARCHIVO DE CONFIGURACIÓN ***** subroutine lectur2(c.r) implicit none integer i.j.r.c integer at0:25.0:25) real ut open(8,file = 'config') read(8.*) u0 do 60 i=0.r+1 do 50 1=0,c+1 read(8.*) a(i.j) 50 continue 60 continue

close(8) return end subroutine lectur3(c.r) implicit none integer i.j.r.c integer a(0:25.0:25) common /mat/ a open(9,file = 'config1') do 80 i=0.r+1 do 70 j=0.c+1 read(9,*) a(i.j) 70 continue 80 continue close(9) return end CREA NUEVA CONFIGURACION **** С subroutine confin1(c.r.seed) implicit none integer i.j.r.c.seed integer a(0:25.0:25) common/ mat/ a real ran,ayuda a(0,0)=1a(0,c+1)=1a(r+1,0)=1a(r+1.c+1)=1 do 1(0) i=1.r do 90 j=1.c ayuda=2*ran(seed)-1 if (ayuda.gt.O) then a(i,j)=1 else a(i.j)=-1 endif 90 continue 100 continue do 110 i=1.r a(i.0)=a(i.c) a(i,c+1)=a(i,1) a(0,i)=a(r,i)a(r+1,i)=a(1,i) 110 continue return end subroutine confin2(c.r) implicit none integer i.j.r.c integer a(0:25.0:25) common/ mat/ a do 160 i=0.r+1 do 150 j=0.c+1 a(i,j)=1150 160 continue continue return end TOMANDO EN CUENTA SOLO A LOS VECINOS MAS CERCANOS PARA EL (L) SPIN ç function hamilt(i.j) implicit none real hamilt integer a(0:25.0:25) integer i.j common /mat/ a hamilt=a(i,j)*(a(i,j-1)+a(i,j+1)+a(i-1,j)+a(i+1,j)) return

70

end ***** ******* SELECCIONA PARTICULA --EL SPIN OUE SE ELIGE ESTA EN EL LUGAR (N.M) DE LA LATIZ, SE CALCULA C -SU ENERGIA CON RESPECTO A SUS 4 VECINOS Y SE CAMBIA SU SENTIDO subroutine selenva(c.r.t.j1.seed) implicit none integer a(0:25.0:25) integer n.m.c.r.seed real enerant, hamilt.t.j1,ran common/mat/ a common/dat/m.n common/enera/enerant n=int(r*ran(seed))+1 m=int(e*ran(seed))+1 enerant=hamilt(n.m) a(n,m) = -1 a(n,m)return end с ĉ SE ACTUALIZA LA ENERGIA. LOS RENGLONES Y COLUMNAS DE LA č -MATRIZ A, CON RESPECTO A LA CONFIGURACION DE PRUEBA QUE SE ACEPTO subroutine acepta(c.r) implicit none integer n.m.r.c.acept integer a(0:25.0:25) real u0.u1 common/ mat/ a common/ dat/ m.n common/ ener/ u0.u1 common/ ace/ acept ut)=u1 acept=acept+1 if (n.ca.1) then a(t+1,m)=a(n,m)else if (n eq.r) then a(0.m)=a(n.m) endif endif if (m.eq.1) then a(n.c+1)=u(n.m) ehe if (m.eq.c) then a(n.0)=a(n.m)endif endif return end С subroutine prueba(seed.t) implicit none integer a(0:25.0:25) integer n.m.c.r.seed.recha real du.p.p1.semilla.ran,t common/ mai/ a common/ dat/ m.n common/ dif/ du common/ yo/ c.r common/ re/ recha if (du.lt.0) then call acepta(c,r) else pl=du/t p=exp(-p1) semilla=ran(seed) if (p.h.semilla) then recha=recha+1 a(n.m)=-1*a(n.m)

endif endif return end RESPALDA DATOS c subroutine guarda2(c.r) implicit none integer a(0:25.0:25) integer i.j.r.c real uO.u l common/ mat/ a common/ ener/ p0.u1 common/ ener/ (0.01 open(8,file * 'config') write(8,*) (0 do 200 i=0,r+) do 190 j=0,r+1 write(8,*) (ai,j) continue 190 200 continue close(8) return end subroutine guarda3(c.r) implicit none integer a(0:25,0:25) integer i.j.r.e common/ mat/ a open(9,file = 'config1') do 220 i=0.r+1 do 210 j=0.c+1 write(9,*) a(i,j) 210 220 continue continue close(9) return

else call acepta(c,r)

72





APÉNDICE E

Programa para computadora en lenguaje PASCAL que simula el modelo de Ising

Uses crt.graph; Type arregio = array[0..25.0..25] of integer: Var e.r.i.j.tres.magpar.nf.switch.tipo.n.m integer: enernya.enerant.du.t.promagne.u1.u0,u00.i1.si real: archpar.yo.archcon.tu.resudat.temp.temp1.arcon15.tu15.resulda1 : text; semilla.tot.gen.magtot.acept.recha longint: arregio; (** LJ,TRES,GEN son contadores **) (** A arreglo que guarda en la (1.j) posición el sentido magnetico del spin**) (** C.R numero de columnas y renglones en el arreglo A **) (** MAGPAR guarda la magnetizacien para cada configuracion **) (** MAGTOT guarda la configuración total para toda la cadena **) (** PROMAGNE es el promedio de la magnetización **) (** ACEPT, RECHA total de configuraciones aceptadas y rechazadas**) (** N1 numero de particulas en el sistema **) (** J1 constante de acoplamiento **) (** T tesmperatura **) (** SWITCH dice si se crea una configuración o se reinicia un proceso **) (** TOT total de estados a generar en la cadena **) (** TIPO senala como se genera la primera configuración **) (** N.M guardan el renglon y la columna de la particula que se eligio **) (** ENERNVA, ENERANT energia de la part, en la conf. Np y en la conf. Xi **) (** U0, U1 energia de la confi actual y la cont de prueba **) (** DU diferencia entre U0 y U1 **) (** SI normaliza el promedio de la magnetización en un intervalo (0,1) **) (** LEE LOS PARAMETROS PARA INICIALIZAR LA CORRIDA **) Procedure lectura_parametros. begin assign(archpar/yo/mac).reset(archpar); readIntarchpar.n1). readintarehpar.(1). readin(archpar.semilla). readIntarchpar.switch). readintarchpar.tot); readintarchpar.upos. close(archpar). end; (** LEE LA ULTIMA CONFIGURACION PARA REINICIALIZAR UN PROCESO **) Procedure lee_configuracion: beein assign(archeon,'tu-mae');reset(archeon); readIntarcheon.u0); for i:=0 to r+1 do for j:=0 to c+1 do readIntarchcon.A[1.j]); close(archcon); end: Procedure lee_configuracion15: hegin assign(arcon15,'tu15_mac');reset(arcon15); for i:=0 to r+1 do for j:=0 to c+1 do readin(arcon15,A[i,j]); close(arcon15); end.

(** OUE CALCULA NUMEROS ALEATORIOS, SE CREO CON EL METODO CONGRUENCIAL function ui(seed:longint):real; var m : longint; CORM a=65539; begin nt=2147483647; seed maged "at if (seed < 0) then seed:#seed+m+1: ui:=seed/misemilla:=seed; end; (** SE GENERA CONFIGURACION DESORDENADA, A EN (LJ) GUARDA LA VARIABLE DE SPIN **) (** IJ REPRESENTA LA POSICION QUE EL SPIN OCUPA EN LA LATIZ ORIGINAL **) (** SE AVADIERON DOS COLUMINAS Y DOS REINGLONES, PARA APLICAR CONDICIONES **) (** PERIODICAS A LA FRONTERA **) Procedure crea_configuracion1; var ayuda : real; begin A[0,0] = [:A[0,c+1]:= [:A[r+1,0]:= 1;A[r+1,c+1]:= 1;for i:=1 to r do for j =1 to e do begin avnda:=2*ui(semilla)-1; if (avada>0) then Altijial cise A[i,j]:=-1; end: for i:=1 to r do begin A[i,0] = A[i,c];;A[i,c+1] = A[i,1];A[0,i] = A[r,i];A[r+1,i] = A[1,i];end: end (** SE GENERA CONFIGURACION ORDENADA +1 **) procedure crea_configuracion2; begin for i:=0 to r+1 do for j:=0 to c+1 do A[i,j]:=1; end; (** FUNCION QUE CALCULA LA ENERGIA CONFIGURACIONAL **) (** ENERGIA DEL (LJ)-ESIMO SPIN CON RESPECTO A SUS VECINOS MAS CERCANOS**) function hamilt(u.v:integer).real; begin hamilt=Alu.yl*(Alu.y-1]+Alu.y+1]+Alu-1.yl+Alu+1.yb; end (** SE ELIGE PART, PARA GENERAR LA CONFIGURACION DE PRUEBA Y SE CALCULA SU **) (** ENERGIA, ESTA PARTICULA TIENE COORDENADAS (N,M) EN LA LATIZ ORIGINAL **) Procedure elige_particula: begin n:=trunc(r=ui(semilla))+1:m:=trunc(c=ui(semilla))+1: eperant:=hamilt(n.m). A[n,m]:=-1*A[n.m]; end; (** SE ACTUALIZAN LOS RENGLONES Y/O COLUMNAS DE LA MATRIZ A SI SE ACEPTA LA **) (** CONFIGURACION DE PRUEBA SE ACTUALIZA LA ENERGIA **) Procedure acepta: begin u0:=u1; acept=acept+1; if (n=1) then A(r+1,m):=A[n,m]eise begin if (n=r) then

```
A[0.m]:=A[n.m];
   end;
  if (m=1) then
   A[n,c+1]:=A[n,m]
  cise
   begin
     if (m=c) then
       A[n.0]:=A[n.m]:
   end;
end:
(** SE PRUEBA LA CONFIGURACION NP PARA SABER SI SE ACEPTA O NO **)
procedure prueba_configuracion:
Var
p.p1.aleato : real;
begin
if (du < 0) then
   acepta
  else
   begin
     pl:=du/t;
      p:=exp(-p1);
      aleato:=ui(semilla);
      if (p < aleato) then
       begin
         recha:=recha+1;
         A[n.m]:=-1*A[n.m];
       end
     cise
       acepta:
   end:
end:
(** SE GUARADA LA ULTIMA CONFIGURACION Y PARAMETROS **)
Procedure respatda_datos1.
begin
 assign(archeon,"TU.MAC'),rewrite(archeon);
   writeln(archcon.u0:2:4);
for i:=0 to r+1 do
     for j =0 to c+1 do
       writeIn(archeon.Ali.jl);
  close(archeon).
end,
Procedure respaida_datos15,
begin
  assigntarcon15.TU15.MAC').rewrite(arcon15);
    for i:=0 to r+1 do
      for j:=0 to c+1 do
        writeIntarcon15.A[i,j]);
  closetarcon15);
end.
(** GRAFICA PARA LA VISUALIZACION **)
Procedure checa:
Var
 error : integer:
begin
  error:=graphresult;
  if (error < 0) then
    begin
      write('Error en la inicializacion de los graficos:');
      halt(1):
    end:
end;
Procedure init_graf;
Var
 driver,modo : integer;
begin
driver:=detect;
  modo:#1;
  initgraph(driver.modo."\lp\bgi');
```

checa; end; Procedure grafica_figura; Var i.j : integer; x.y.x1.y1.A1.B : integer: begin B:=20;A1:=20; x:=10;y:=0; x1:=x+A1;y1:=y+B; for i:=1 to r do begin x = 100; x 1 = x + A1;for x=1 to c do begin rectangle(x,y,x1,y1); if (A[i,j] = 1) then begin setfillstyle(9,5);floodfill(x+1,y+1,white); end clac begin setfillstyle(9.9);floodfill(x+1.y+1.white); end: x:=x+A1:x1:=x1+A1; end; y:=y+B;y1:=y1+B; end: Delay(10000); end; (*** BEGIN PRINCIPAL ***) begin elrser: lectura_parametros; assign(resudat,'resulda2.400').rewrite(resudat); writeln(resudat,'la semilla es '.semilla); r:=trunc(sqrt(n1));c:=r; (**init_graf:**) if (switch = 0) then begin if (tipo = 1) then if (ipo = 1) then crea_configuration1; respaida_datos15; if (ipo = 2) then crea_configuracion2: respalda_datos15: end else lee_configuration: (**grafica_figura;**) assign(temp,'temp1.400');reset(temp); while not EoF (temp) do begin lee_configuracion15; readin(temp.t); 10:=0. for i:=1 to r do for j:=1 to e do u0:=u0+hamilt(i,j); u0:=-1*j1*u0; writeln(resudat,'semilla = '.semilla); for tres:=1 to 1 do begin recha:=0; acept:=0. magtot:=0; for gen:=1 to tot do begin

ESTA TESIS NO DEBE Valir de la Biblioteca

elige_particula: enernya:=hamilt(n.m); ul:=u0-j1*(encrava-enerant); du:=u1-u0; prueba_configuracion; magpar:#0; for i:=1 to r do for j:=1 to c do for j:=1 to c do magpar:=nugpar+A[i.j], magtoi:=magtoi+magpar, (**grafica_figura.**) end: end: promagne == 1/(o)) = magtot(x):=promagne/b1, write(intersudat, temperatura = (z, 2, 3); write(intersudat, tet promagnetizacion es = ',promagnet2:4); write(intersudat, 'magtot = ', s), 3/4; write(intersudat, 'magtot = ', s), a(i); write(intersudat, 'magtot = ', s), a(i); writeIn(resudat,'el n£mero de configuraciones aceptadas = '.acept); writeIn(resudat,'e) n£mero de configuraciones rechazadas = ',recha); end: respalda_datos15; end; (**closegraph:**) close(temp);close(resudat);

respalda_datos1;

end

Referencias

1) Monte Carlo Methods in Statistical Mechanics Binder (Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York 1979)

2) Binder, D.P Landau, A.M. Ferrenberg Phys. Rev. Lett. 74, 298

3) Computer Simulation of Liquids M.P Allen D.J Tildesley Clerendon Press-Oxford, 1986

4) Introduction to Statistical Mechanics David Chandler (Oxford University Press, New york 1987)

5) Statistical Physics Reif Mc Graw-Hill, book company

6) Física David Halliday Robert Resnick C.E.C.S.A México, 1982

7) Física Fundamental
 Jay Orear
 Editorial Limusa - Wiley, S.A
 México, 1969

8) L. Onsager Phys. Rev. 65, 117, (1944)

9) Computational Physics Koonin (The Benjamin/ Cummings Publishing Company, Inc. 1985)

80

10) Statistical ThermodynanicsArnold MunsterEditorial Springer VerlagBerlin, 1969

11) Exactly Solved Models in Statistical Mehanics Baxter F.R.S Academic Press

12) Phase Transitions in Reduced geometry Binder Annu. Rev. Phys. Chem. 43, 33-59

13) Monte Carlo Simulation in Statistical Physics Binder, D.W. Heermann Springer-Verlag, Berlin

14) Modelos y Simulación MariCarmen Gonzáles Videgaray Tesis Económicas Profesionales México, 1993

15) Introducción a la Estadística Matemática Undy YuleM G. KendallEditorial AguilarMadrid, 1959

16) The Art of Programing, Vol. 2 Knuth, D. E. Addison Wesley, Reading Mass