



SIMULACIÓN DE INTERACCIONES DE CORTO Y LARGO ALCANCE PARA
NANOESTRUCTURAS DE MANGANITAS TIPO PEROVSKITAS EMPLEANDO
EL MÉTODO MONTE CARLO

CAROLINA MÁRQUEZ NARVÁEZ

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MANIZALES
FACULTAD DE INGENIERÍA
MAESTRÍA EN INGENIERÍA
MANIZALES, COLOMBIA
2019

SIMULACIÓN DE INTERACCIONES DE CORTO Y LARGO ALCANCE PARA
NANOESTRUCTURAS DE MANGANITAS TIPO PEROVSKITAS EMPLEANDO
EL MÉTODO MONTE CARLO

CAROLINA MÁRQUEZ NARVÁEZ

Proyecto de trabajo de grado para optar al título de:
Magister en Ingeniería

Director (a):

PhD. Francy Nelly Jiménez García

PhD. Hugo Hernán Ortiz Álvarez

Universidad Autónoma de Manizales

Facultad de Ingeniería

Maestría en Ingeniería

Manizales, Colombia

2019

AGRADECIMIENTOS

Es de agradecer inmensamente a todas las personas que estuvieron acompañándome en este proceso tan importante para mi vida profesional, pues, sirvieron de apoyo para poder culminar y dar el paso tan esperado.

Inicio dando gracias a la Dra. Francly Nelly Jiménez y a al Dr. Hugo Hernán Ortiz Álvarez, por dar su voto de confianza en mí para asesorarme, por sus aportes día a día a través de su apoyo incondicional y valiosas enseñanzas, por su paciencia y comprensión pero sobre todo por el conocimiento que me brindaron, formándome como una mejor profesional.

A la Universidad Autónoma de Manizales por su apoyo en el proceso de aprendizaje de la maestría y en el desarrollo del proyecto de investigación.

A mi familia por su amor, apoyo incondicional y darme ánimo para continuar, especialmente a mi madre por sus desvelos, por su eterno empeño y compromiso en sacar adelante su niña.

A mis buenos amigos Laura, Santiago, Jorge, Reinel y Simón que buscaron siempre la manera de motivarme, ayudarme, llenándome de alegría y ganas de sacar adelante este proyecto de vida.

Pero sobre todo gracias a ti Jairo compañerito de mis días, por apoyar mi esfuerzo y comprender mi ausencia al dedicarme a estudiar.

Y a todos aquellos que contribuyeron de una u otra forma a la culminación exitosa de este proceso.

RESUMEN

Actualmente, se reconoce en los materiales magnéticos una fuente para la fabricación y mejoramiento de dispositivos tecnológicos, lo que constituye un desafío desde el punto de vista científico para el entendimiento de sus propiedades. En este sentido, el método de simulación Monte Carlo ha mostrado ser eficaz, para la simulación de propiedades de materiales. La interacción dipolar magnética juega un papel importante en el comportamiento de los materiales magnéticos, es de largo alcance y computacionalmente costosa ya que el cálculo es sobre todos los pares de momentos magnéticos de la muestra. En este trabajo se implementaron modelos que incluyen interacciones de corto y largo alcance por el método de Monte Carlo para la simulación de propiedades magnéticas de estructuras cúbica dentro de las que caben las manganitas tipo perovskita. La descripción de la interacción dipolar magnética en capas delgadas se llevó a cabo sobre celdas de simulación replicadas periódicamente, para lo que se emplearon el método de los radios de corte, que es una aproximación, y el de las sumas de Ewald que es de convergencia rápida. En este trabajo se realizaron procesos de paralelización en CPU utilizando la librería OpenMP y GPU utilizando la librería OpenACC para reducir los tiempos de cómputo en las sumas de Ewald. Se lograron reducir los tiempos en cada prototipo implementado, primero optimizando el código, después paralelizando en CPU, finalmente y paralelizando en GPU. Se encontró que con el modelo básico implementado mediante las sumas de Ewald el costo computacional es cinco veces mayor al que se alcanzó con el modelo paralelizado en GPU.

PALABRAS CLAVE: Materiales magnéticos, Manganitas tipo perovskita, Monte Carlo, Modelo de Heisenberg, Sumas de Ewald, Parelización, Radios de Corte.

TABLA DE CONTENIDO

1	INTRODUCCIÓN	11
2	PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA DE INVESTIGACIÓN Y SU JUSTIFICACIÓN	22
	2.1 <i>Descripción del área problemática</i>	22
	2.2 <i>Formulación del problema</i>	23
	2.3 <i>Justificación</i>	24
	2.4 <i>Objetivo general</i>	26
	2.5 <i>Objetivos específicos</i>	26
3	ANTECEDENTES.....	27
4	REFERENTE TEÓRICO.....	31
	4.1 <i>Condiciones de fronteras periódicas</i>	31
	4.2 <i>Sumas de Ewald</i>	31
	4.2.1 La Energía electrostática	32
	4.2.2 Interacción dipolar	35
	4.3 <i>Método de Monte Carlo</i>	39
	4.4 <i>Mecánica estadística</i>	40
	4.5 <i>Algoritmo metrópolis</i>	42
	4.6 <i>Modelos de espines</i>	43
	Modelo de Ising	43
	Modelo de Heisemberg	45
	4.7 <i>Perovskytas y Manganita</i>	47
	4.8 <i>Paralelización</i>	49
	OpenMP	50
	OpenACC.....	52
5	METODOLOGÍA	54
	5.1 <i>Prototipo 1: Cálculo de energía de estructuras tipo manganita sin tener en cuenta la Interacción Dipolar</i>	58

5.2	<i>Prototipo 2: Cálculo de energía de estructuras tipo manganita teniendo en cuenta la interacción dipolar: Radio de corte</i>	59
5.3	<i>Prototipo 3: Cálculo de energía para estructuras tipo manganita con interacción dipolar: Sumas de Ewald</i>	59
5.4	<i>Prototipo 4: Optimización de código del prototipo anterior</i>	60
5.5	<i>Prototipo 5: Paralelización del prototipo anterior</i>	61
5.6	<i>Marco experimental</i>	62
	Condiciones iniciales	62
	Equipos de cómputo utilizados	64
5.7	<i>Archivos de salida</i>	65
6	RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....	66
6.1	<i>Cálculo de los observables físicos sin incluir la interacción dipolar</i>	66
6.2	<i>Cálculo de los observables físicos incluyendo la interacción dipolar</i>	73
	6.2.1 Mediante sumas de Ewald.....	73
	6.2.2 Mediante radios de corte	80
6.3	<i>Resultados de comparación de tiempos</i>	82
7	CONCLUSIONES	93
8	TRABAJOS FUTUROS Y SOCIALIZACIÓN DE RESULTADOS	96
8.1	<i>Trabajos futuros</i>	96
8.2	<i>Socialización de resultados</i>	96
9	REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	98

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Representación del método de Ewald [17].....	33
Figura 2 Interacción dipolo-dipolo entre moléculas de ácido clorhídrico	36
Figura 3 Interacción dipolo dipolo entre moléculas de cloruro de bromo.....	36
Figura 4 Estructura cristalográfica de una manganita tipo perovskita.....	49
Figura 5 Memoria Compartida OpenMP	51
Figura 6 Paralización con OpenMP	51
Figura 7 Modelo de Ejecución OpenACC	53
Figura 8 Metodología por prototipos, Tomado de libro de Pressman (2005).....	55
Figura 9 Prototipos implementados	61
Figura 10 Energía con modelo de Ising	67
Figura 11 Magnetización con modelo de Ising.....	67
Figura 12 Susceptibilidad con modelo de Ising.....	68
Figura 13 Curva de relajación.....	69
Figura 14 Energía para diferentes pasos de Monte Carlo	69
Figura 15 Energía con Heisemberg	70
Figura 16 Magnetización con Heisemberg	70
Figura 17 Susceptibilidad con Heisemberg	71
Figura 18 Magnetización variando el J de intercambio	72
Figura 19 Susceptibilidad con diferentes tamaños de muestras	72
Figura 20 Temperatura con diferentes tamaños de muestras.....	73
Figura 21 Comparación de las curvas de relajación con y sin interacción dipolar	74

Figura 22 Magnetización variando g	74
Figura 23 Energía con Diferentes g y Montecarlo 10000, tamaño 5*5*5	75
Figura 24 Magnetización con Diferentes g y Montecarlo 10000, tamaño 5*5*5.....	75
Figura 25 Susceptibilidad con Diferentes g y Montecarlo 10000, tamaño 5*5*5.....	76
Figura 26 Configuraciones magnéticas experimentales [39].....	77
Figura 27 Configuraciones magnéticas simuladas [3].....	77
Figura 28 Magnetización vs Campo Magnético	78
Figura 29 Energía vs tamaño	79
Figura 30 Magnetización vs tamaño	80
Figura 31 Tiempos de computo vs Radios de Corte	81
Figura 32 de energía de interacción dipolar vs temperatura para diferentes radios de corte	82
Figura 33 Código sin optimizar	84
Figura 34, Código optimizado	84
Figura 35, Código optimizado	85
Figura 36 Tiempo de ejecución vs tamaño de la muestra paralelizado	86
Figura 37 Tiempo de ejecución en servidores	88
Figura 38 Aceleración de los cores.....	90
Figura 39 Tiempo de ejecución vs número de cores	90
Figura 40 Variación de Cores y consumo de memoria.....	91
Figura 41 CPU Vs GPU.....	92
Figura 42 Comparación resultados con Ewald sin paralelizar y paralelizado.	92

LISTA DE TABLAS

Tabla 1 Configuración Equipos de computo	64
Tabla 2 Tiempo en horas de cómputo para diferentes radios de Corte.....	81
Tabla 3 Comparación de tiempos	86
Tabla 4 Comparación de tiempos en servidores	87
Tabla 5 Tiempo de ejecución por Core.....	89

1 INTRODUCCIÓN

La nanotecnología trata sobre las diferentes estructuras de la materia con dimensiones del orden de una millonésima parte de un metro [1]. Esta área es relativamente nueva y está dedicada al estudio de los materiales con el fin de entender los fenómenos físicos que ocurren a nivel atómico y molecular. El entendimiento de estos fenómenos permite tener el control de las propiedades de un material, las cuales posibilitan su producción y modificación de acuerdo con el interés de investigación. Los materiales magnéticos tienen propiedades de aislantes, conductores, superconductores, ferromagnéticos, ferroeléctricos y su tamaño les permite interactuar a niveles celulares, subcelulares e incluso moleculares.

Además, estos materiales son empleados en múltiples aplicaciones como componentes electrónicos inductivos, sensores, antenas flexibles, entre otros de gran utilidad, exploración y uso para la sociedad moderna. Se destaca el uso de nano partículas magnéticas en diversos campos de la industria, la tecnología, la biología, la aeronáutica, entre muchos otros. Algunos de los usos destacados son el diagnóstico médico con la resonancia magnética; esta técnica utiliza un campo magnético intenso para para obtener imágenes de alta calidad de los órganos y estructuras del cuerpo [2]. Otro uso a destacar es la utilización de nanopartículas para la producción de imanes mucho más poderosos o de materiales magnéticos blandos con menores pérdidas de energía [3], además de la aplicación en líquidos magnéticos para uso en medicamentos, pigmentos en pinturas y cerámicas.

En este trabajo se plantea la utilización de técnicas de física computacional basadas en el método Monte Carlo para reproducir y predecir, mediante simulación, los comportamientos magnéticos de nanoestructuras de manganitas tipo perovskitas, a escala atómica. En este sentido, el método de simulación Monte Carlo es una herramienta ampliamente usada para la simulación de propiedades de materiales, en el cual empleando un Hamiltoniano tipo Heisenberg se puede incluir la interacción dipolar magnética la cual juega un papel importante en el comportamiento de los materiales magnéticos. Esta interacción es de largo alcance y, por tanto, computacionalmente costosa por que el cálculo es sobre todos los pares de momentos magnéticos de toda la muestra. El problema del cálculo de estas interacciones magnéticas dista de ser sencillo dado el carácter infinito de las mismas. La descripción de la interacción dipolar magnética en capas delgadas se puede llevar a cabo sobre celdas de simulación replicadas periódicamente y emplear método de diversa índole como son los radios de corte, el método de multipolo rápido, que son aproximaciones en las cuales se trunca la suma lo que lleva a pérdida de información que podría ser importante en el modelado del compuesto, y las sumas de Ewald que es el método exacto, de convergencia rápida, pero costoso computacionalmente.

El objetivo final de este trabajo es el desarrollo modelos computacionales empleando el método Monte Carlo para la simulación de propiedades magnéticas en nanoestructuras de manganita tipo perovskita mediante el cálculo de interacciones de corto y largo alcance. El modelo analizado es de las sumas de Ewald al cual se le realizaron procesos de paralelización en CPU (unidad central de procesamiento) utilizando la librería OpenMP y

la librería OpenACC para GPU (unidad de procesamiento gráfico) en busca de optimizar los tiempos de computo. Se simularon propiedades como energía, magnetización, susceptibilidad y ciclos de histéresis de estructuras cúbicas como lo son manganitas perovskita a bajos niveles de dopaje, variando parámetros como la temperatura, el tamaño de la muestra, la constante de anisotropía, la constante de intercambio y la contribución de la interacción dipolar.

2 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA DE INVESTIGACIÓN Y SU JUSTIFICACIÓN

2.1 Descripción del área problemática

Es notorio el interés reciente por el estudio y caracterización de materiales magnéticos, entre ellos las nanoestructuras de manganitas tipo perovskita. En ellos sobresalen sus propiedades magnéticas y de transporte eléctrico, haciéndolos excelentes candidatos para potenciales aplicaciones. Dichas propiedades resultan ser sensibles a variables como la técnica con la que se producen, la temperatura, la geometría de los nanosistemas, la estequiometría de sus componentes, entre otras. Estudios experimentales encaminados a identificar el comportamiento de estos sistemas, en relación con estas variables, se ven altamente limitados por los altos costos, la disponibilidad de insumos de laboratorio, equipos para el crecimiento y la caracterización, así como por el tiempo necesario dedicado por los investigadores. Por ello, el planteamiento de modelos susceptibles de ser llevados a algoritmos computacionales resulta ser una alternativa que debe tenerse presente por las posibilidades que ofrece para un mejor entendimiento de tales nanosistemas [3].

El método de simulación Monte Carlo ha mostrado ser una herramienta eficaz en el tratamiento de problemas con las características y la escala de tamaño implícita en los fenómenos ya mencionados. En dichos sistemas a escala atómica, tanto las interacciones de corto como largo alcance deben ser tenidas en cuenta. No obstante, la

simulación de interacciones de largo alcance como la interacción dipolar magnética es computacionalmente costosa dado que el cálculo se hace sobre todos los pares de momentos magnéticos de toda la muestra. El problema del cálculo de estas interacciones magnéticas dista de ser sencillo dado el carácter infinito que pueden tomar las sumas que intervienen. Algunas aproximaciones para el cálculo de la interacción dipolar hacen uso de radios de corte, que obligan a realizar truncamientos sobre la suma total perdiéndose información que podría ser fundamental en el modelado de ciertos compuestos. Otra propuesta es utilizar sumas de Ewald, las cuales tienen una rápida convergencia y una alta precisión al momento de calcular energías. A pesar de ser más prácticas que el método de sumas directas, exigen un alto consumo de tiempo. Es importante combinar la simulación con técnicas de paralización efectivas que permitan optimizar tiempo y recurso durante la ejecución.

2.2 Formulación del problema

La descripción de la interacción dipolar magnética se lleva a cabo sobre celdas de simulación replicadas periódicamente, para su cálculo se han propuesto métodos diversos que incluyen sumas directas, el método de multipolo rápido y las sumas Ewald. Cada uno de estos métodos presenta ventajas y desventajas, así por ejemplo el método de las sumas directas puede aplicarse a sistemas de pocas partículas, para sistemas de tamaños mayores es necesario definir radios de corte; donde el orden de cálculos necesarios para sistemas de N partículas es de $O(N^N)$ y su resultado no es tan preciso. El método de multipolo rápido permite calcular la interacción dipolar para sistemas finitos, pero de mayor tamaño;

el número de operaciones para un sistema de N partículas es del orden de $N(\log N)$. Por último, las sumas de Ewald permiten calcular la interacción dipolar en sistemas infinitos mediante la imposición de condiciones periódicas; el número de operaciones para un sistema de N partículas es del orden de $N(\log N)$.

De acuerdo con lo expuesto anteriormente, Surge entonces la pregunta de investigación:

¿Cómo simular propiedades magnéticas en nanoestructuras de manganita tipo perovskita teniendo en cuenta las interacciones de corto y largo alcance?

2.3 Justificación

Actualmente, se reconoce en los materiales magnéticos una fuente de crecimiento científico y social que permite ayudar a una mejor calidad de vida, puesto que sus aplicaciones repercuten en el ser humano en ámbitos tan importantes como lo son el medio ambiente, la tecnología y la biomedicina. Ciertas características asociadas a su comportamiento magnético que permiten llevar a cabo tareas como la destrucción de tumores mediante hipertermia al aprovechar la capacidad que poseen las partículas para producir calor en respuesta a la aplicación de campos magnéticos externos. El núcleo magnético de las nanopartículas magnéticas también permite que puedan ser guiadas y focalizadas hacia zonas de interés específicas. Una vez situadas en la zona de interés, las nanopartículas magnéticas son capaces de liberar de forma localizada fármacos o medicamentos terapéuticos con los que previamente han sido cargadas [4], evitando los efectos secundarios que puedan tener estos fármacos en el organismo, al ser administrados de forma generalizada.

Las nanopartículas magnéticas también pueden ser utilizadas en la resolución de problemas de contaminación y uso de fuentes de energía como el aprovechamiento de la energía renovable, la reducción del consumo de esta y de los efectos sobre el ambiente en procesos industriales [5]

Debido a sus aplicaciones, el conocimiento de los materiales ferromagnéticos se constituye en un desafío desde el punto de vista científico el cual puede llevarse a cabo, reduciendo costos y tiempo en experimentación, a través del modelamiento y simulación de sus propiedades. Tales modelos permiten el análisis de la variación en las propiedades del material cuando se hacen modificaciones en algunos de los parámetros de crecimiento, lo cual redundará en un mejor conocimiento del material y sus potencialidades.

El presente proyecto busca ahondar en el conocimiento que se tiene sobre el planteamiento de modelos y la simulación (Monte Carlo) para el estudio de propiedades asociadas al ferromagnetismo. Para ello se emplean modelos como las sumas de Ewald que aunque ampliamente estudiada, aún es susceptible de ser optimizada a través de códigos de programación más eficientes.

La metodología que se plantea en este proyecto permite realizar la investigación con un paso a paso que hace la toma de decisiones mejor y más segura, pues se propone realizar 5 prototipos en los cuales se pueda verificar el correcto funcionamiento de la simulación al finalizar cada iteración y poder comparar los resultados con la literatura para avanzar en un proceso de construcción exitoso.

2.4 Objetivo general

Desarrollar modelos computacionales empleando el método Monte Carlo para la simulación de propiedades magnéticas en nanoestructuras de manganita tipo perovskita mediante el cálculo de interacciones de corto y largo alcance.

2.5 Objetivos específicos

1. Implementar modelos computacionales para el cálculo de la interacción dipolar magnética en nanoestructuras de manganitas tipo perovskitas.
2. Definir un modelo tipo Heisenberg que permita el cálculo de propiedades magnéticas teniendo en cuenta interacciones de corto y largo alcance.
3. Simular mediante el método de Monte Carlo propiedades magnéticas de nanoestructuras de manganitas como magnetización, susceptibilidad y curvas de histéresis.

3 ANTECEDENTES

En la actualidad es notable el interés de la comunidad científica en materiales magnéticos como son las manganitas tipo perovskita debido a su comportamiento y sus diversas aplicaciones. Estas características los hacen atractivos para ser usados en la industria, la biomedicina, el medio ambiente, y el diseño de dispositivos tecnológicos de última generación, los cuales permiten avanzar en el desarrollo tecnológico. Es por tanto importante aportar al estudio teórico y experimental de las propiedades de estos materiales de una manera más rápida por medio de la simulación de sus propiedades, cuyos resultados se pueden contrastar con los resultados experimentales reportados por la literatura.

Los materiales magnéticos con estructura manganita tipo perovskitas se vienen estudiando desde 1950 cuando Jonker y Van Santen reportaron por primera vez la cristalización en estructura perovskita de los compuestos policristalinos $(La;Ca)MnO_3$, $(La;Sr)MnO_3$ y $(La;Ba)MnO_3$ y realizaron la identificación de efectos ferromagnéticos como la magnetorresistencia (MR) [6]. Con estos primeros avances, en 1951 Zener habló sobre como la conducción eléctrica en estos compuestos, como el acoplamiento ferromagnético, surge de un proceso de doble intercambio, y se desarrolla una relación cuantitativa entre la conductividad eléctrica y la temperatura ferromagnética de Curie escribiendo así las ideas de lo que hoy se conoce como doble intercambio [7]. En 1955 Wollan y Koehler realizaron un estudio de las propiedades magnéticas de $La_{1-x}Ca_xMnO_3$,

y reportaron propiedades ferromagnéticas y antiferromagnéticas que dependen relativamente del contenido iónico del manganeso trivalente y tetravalente [8]. En los años 90s se volvió a retomar el estudio de estos materiales reportando en un campo magnético aplicado la obtención de grandes proporciones de magnetorresistencia (MR) > 2200% para varias películas depositadas in situ a 180 K y $H = 6$ T [9].

Para el estudio teórico de estos materiales es muy importante tener información experimental que permita conocer su comportamiento físico, pero es también importante, adaptar modelos físicos a los fenómenos observados, que puedan ser representados por modelos matemáticos, los cuales pueden ser modelados y simulados computacionalmente de manera confiable. El método Montecarlo permite calcular mediante un muestreo aleatorio observables físicos que al corroborarse con los resultados reportados desde la parte experimental resultan coherentes y fiables. Este método permite obtener resultados confiables de manera rápida y más económica, además de facilitar la variación de parámetros como temperatura, tamaño, estequiometría y geometría en el material.

Cabe resaltar que es un tema de actualidad en el cual algunos científicos colombianos han aportado resultados relevantes e importantes. Por ejemplo Restrepo-Parra en [10] realizó simulaciones Monte Carlo, obteniendo resultados como la no influencia del periodo de la red en las propiedades eléctricas y la importancia de la relación dFM/dAFM en dichas propiedades de transporte eléctrico. Estudió, igualmente, el fenómeno de exchange bias y su dependencia con respecto al espesor de la capa FM, el número de capas, la temperatura de enfriamiento y el campo de enfriamiento, construyendo un modelo que presenta la dependencia de HEB con respecto al conjunto de parámetros.

Por otro lado es importante hablar de la importancia del método de Monte Carlo a la hora de realizar simulaciones, ya que se constituye en una poderosa manera de resolver eficientemente problemas de fenómenos físicos de alta complejidad y cuya solución analítica es compleja [11]. Cabe también resaltar el trabajo de Ortiz [3], quien realizó simulaciones computacionales, empleando el método de Monte Carlo con el fin de estudiar propiedades asociadas al ferromagnetismo y la ferroelectricidad en bicapas multiferroicas constituidas por materiales tipo perovskita, donde para la interacción dipolar se calcula por el método de multipolo rápido. También se han realizado simulaciones de propiedades físicas de materiales magnéticos nanogranulares, con parámetros ajustados al rango experimental con condiciones de contorno periódicas y también con un radio de corte definido [12]. Los trabajos anteriores tienen en común que el cálculo de las propiedades se realiza a través de técnicas similares, manteniendo como límite un radio de corte; mientras lo que se propone en este proyecto es obtener el comportamiento del material de estudio simulado mediante sumas de Ewald, las cuales permiten calcular interacciones de largo alcance en sistemas periódicos mediante la utilización de series infinitas de rápida convergencia.

No se encuentran muchos ejemplos de simulación de materiales magnéticos con sumas de Ewald ya que son computacionalmente costosos; para obtener resultados prudentes se deben realizar procesos de paralización en su respectivo lenguaje de programación. Algunos referentes del uso de sumas de Ewald son la tesis descrita en [13], en la cual se expresa que el uso de un radio de corte no resulta apropiado cuando las fuerzas entre las partículas son de muy largo alcance, como sucede con las interacciones

electrostáticas. Por esta razón es importante la implementación de sumas infinitas como lo son las sumas de Ewald, para calcular la interacción de cada partícula no sólo con las partículas de la propia celda sino de las vecinas lo que puede resultar en una contribución importante. De otra parte, [14] realizó un estudio de transiciones de fase en sistemas nucleares finitos e infinitos; para la simulación de sistemas finitos realizó colisiones de Iones Pesados en el rango de energías en el que se observa Multifragmentación con aproximación de Thomas-Fermi. Para los sistemas infinitos realizó simulaciones de dinámica molecular bajo condiciones periódicas de contorno a temperatura y densidad fijas bajo la técnica de sumas de Ewald.

Alguno de las investigaciones encontradas de simulación con Ewald es la del análisis de Gorn y Berkov donde muestran el comparativo de los métodos simples de Ewald, Ewald basado en mayas y multipolo rápido para la evaluación del campo dipolar de largo alcance en sistemas desordenados. Obteniendo como resultados altamente costosos y logrando una reducción mediante el método de Ewald mejorado.[15], otra investigación importante es este tema ha sido la comparación de 3 métodos de Ewald, la versión Original, la modifica y la versión modifica en tercera dimensión en sistemas de condiciones periódicas, variando el termino de la suma correspondiente a la parte reciproca. Donde se concluye que la versión modifica es eficiente siempre y cuando se trabaje con sistemas unidimensionales, puesto en sistemas tridimensionales es realmente ineficiente debido a su alto costo computacional.[16]

4 REFERENTE TEÓRICO

4.1 Condiciones de fronteras periódicas

Las condiciones de frontera periódicas equivalen a considerar una red infinita, donde una red de tamaño $n*n*n$ se replica hacia todos los lados infinitamente. La forma de la celda a la que se aplican estas condiciones de contorno determina el tipo de red, mientras que el contenido de esa celda define la celdilla unidad de la red [17]. Las moléculas pueden entrar y salir de cada caja a través de cada uno de los cuatro bordes. En un ejemplo tridimensional, las moléculas serían libres de cruzar cualquiera de las seis caras del cubo.

4.2 Sumas de Ewald

Las sumas de Ewald fueron propuestas por Paul Ewald en 1921 [17], físico, químico, matemático, quien realizó su doctorado en la Universidad Ludwig Maximilians de Munich, en el instituto de física teórica [18]. La ventaja de estas sumas es la rápida convergencia [17] de la energía en comparación con la de una suma directa. Gracias a su alta precisión y velocidad razonable cuando se computan interacciones de largo alcance se ha convertido en el método estándar para calcular tales interacciones en sistemas periódicos [19], derivándose de este gran cantidad de métodos. Este método es aplicado a todo tipo de redes de cargas eléctricamente neutras, permitiendo así la eficiencia de los cálculos de las sumas de red usadas en física del estado sólido, lo cual parece apropiado para las simulaciones de un cristal y puede ser la mejor opción para la simulación de sistemas moleculares orgánicos.

Dichas sumas son una técnica bien establecida para la evaluación de las interacciones electrostáticas requeridas para muchas simulaciones por computadora [20]. Las sumas de Ewald son un método para calcular interacciones de largo alcance en sistemas periódicos, son un caso especial de las sumas de Poisson que reemplazan la suma de energías de interacción en el espacio real con una suma equivalente en el espacio de Fourier [21].

4.2.1 La Energía electrostática

La energía electrostática para un sistema con N partículas en tres dimensiones viene dada por:

$$E = \frac{1}{2} \sum_v \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{q_i q_j}{|\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{v}|}$$

Ecuación 1

Donde $q_i q_j$ son las cargas de las partículas i y j. El vector de red \mathbf{v} tiene la forma:

$$\mathbf{v} = v_1 \mathbf{a} + v_2 \mathbf{b} + v_3 \mathbf{c}$$

Donde cada v es un número entero que genera el índice de la celda, reflejando la forma de la caja básica y teniendo en cuenta que la celda origen donde el valor es cero se omite de la sumatoria.

Existen varias formas para realizar las sumas, pero la tradicional y más utilizada es sumar las celdas de acuerdo con la proximidad a la celda central, las celdas se van sumando en secuencia en primer lugar aquellas en las que $|\mathbf{v}| = 0$, es decir, $\mathbf{v} = (0; 0; 0)$;

la segunda capa incluirá todas las celdas que se encuentren a una distancia L , es decir, aquellas con vectores de celda: $\mathbf{v} = (\pm a, 0, 0)$; $(0, \pm b, 0)$; $(0, 0, \pm c)$ y así sucesivamente construyendo el sistema periodico como se muestra en la Figura 1.

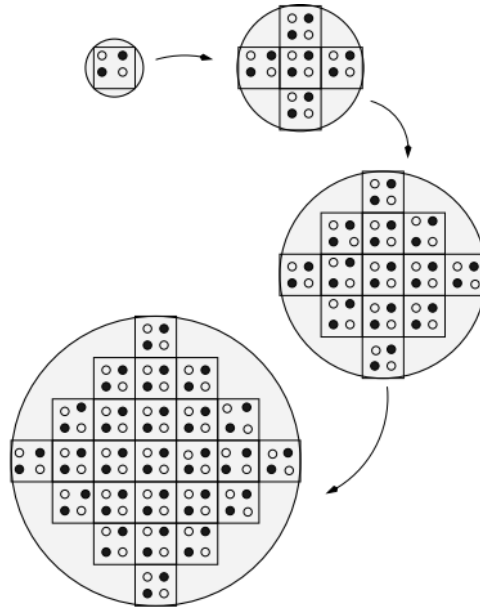


Figura 1. Representación del método de Ewald [17]

Como se había expresando anteriormente, las sumas de Ewald se basan en la división de la energía potencial de interacción, tienen como característica principal transformar una serie lenta y condicionalmente convergente en la suma de dos series rápidamente convergentes más un término constante [19], dichas sumas están descritas por una suma en el espacio recíproco, una en el espacio real y un término constante (ver ecuacion 2).

$$E_{Ewald} = E^r + E^m + E^0$$

Ecuación 2 Representación de las sumas de Ewald

La parte real esta caracterizada por las traslaciones de la distribucion periodica de las cargas y se representa de la siguiente manera:

$$E^r = \frac{1}{2} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \left(\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{q_i q_j}{|r_{ij} + n|} \operatorname{erfc}(\alpha^2 |r_{ij} + n|) \right)$$

Ecuación 3

donde N es el tamaño de la muestra; i y j son las posiciones; \mathbf{r}_{ij} es el vector que va de la posicion de carga q_i a la posicion de la carga q_j ; y $r_{ij} + n$ da la posición con respecto al centro de la distribución.

$\operatorname{erf}(\mathbf{x})$ es la función de error complementario, la cual tiende a cero cuando x se incrementa, lo cual es escogido para que sea suficientemente grande y pueda ser rápidamente convergente, gracias al corto rango de esta función.

La notación $\sum_{n \in \mathbb{Z}}^1$ significa que el término donde $i = j$ se ha omitido cuando $n = 0$, en palabras mas comunes, cada partícula interactúa con todas las demás partículas y todas las imágenes de sí mismo; pero no interactúa con sí misma.

Donde α es un parámetro de ajuste cuyos valores son arbitrarios y $r_{ij} + n$ es el vector de posición que define la ubicación de las cargas y de sus replicas periódicas.

La parte recíproca forma también una red periódica de cargas, la cual está expresada de acuerdo con la ecuación 4.

$$E^m = \frac{2\pi}{L^3} \sum_{k \neq 0} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j e^{\frac{-k^2}{4\alpha^2}} \cos(\mathbf{k}_i \mathbf{r}_{ij})$$

Ecuación 4

Para esta ecuación L es el volumen de la celda que se va a simular y \mathbf{k} es un vector del espacio recíproco.

Para completar las sumas de Ewald se tiene un termino constante, que corrige las interacciones con sus imágenes introducidas de forma artificial en el espacio recíproco. Este término esta dado mediante la ecuación 5.

$$E^0 = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \sum_{i=1}^N q_i^2$$

Ecuación 5

De acuerdo a lo explicado anteriormente se tiene como resultado final para la energía mediante las sumas de Ewal una expresión como la que se muestra en la ecuación 6.

$$\begin{aligned} \text{Ewald} = & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n} \in \mathbf{Z}} \left(\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{q_i q_j}{|\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{n}|} \operatorname{erfc}(\alpha^2 |\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{n}|) \right) & (6) \\ & + \frac{2\pi}{L^3} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i q_j e^{\frac{-k^2}{4\alpha^2}} \cos(\mathbf{k}_i \mathbf{r}_{ij}) + \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \sum_{i=1}^N q_i^2 \end{aligned}$$

Ecuación 6

Una descripción más detallada de estos resultados puede encontrarse en [22].

4.2.2 4.2.2 Interacción dipolar

Interacción dipolo – dipolo: La interacción dipolo-dipolo es la observada entre un dipolo positivo de una molécula polar con el dipolo negativo de otra. En los enlaces covalentes polares, el átomo con mayor electronegatividad atrae los electrones hacia sí,

formándose un dipolo negativo en torno al mismo. En el átomo con menor electronegatividad, el dipolo formado es de carga positiva, ya que cede parcialmente sus electrones. Las atracciones electrostáticas entre dipolos de carga contraria, de diferentes moléculas son las llamadas interacciones dipolo-dipolo.



Figura 2 Interacción dipolo-dipolo entre moléculas de ácido clorhídrico

En la Figura 2 se observa un ejemplo de este tipo de interacción, entre moléculas de ácido clorhídrico, otro ejemplo puede ser el de las moléculas de cloruro de bromo. Las interacciones dipolo-dipolo se representan con líneas punteadas en la Figura 3.

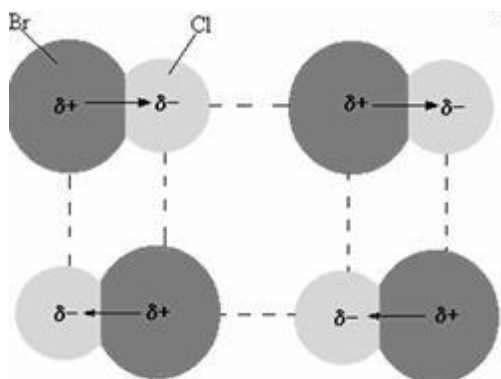


Figura 3 Interacción dipolo dipolo entre moléculas de cloruro de bromo

La fuerza de este tipo de interacción es bastante débil, de un promedio de 4 kJ por mol, en comparación con la energía de enlaces covalentes o iónicos.

Existen varios tipos de interacción dipolo-dipolo:

Interacción Dipolo permanente: Es el que ocurre entre dos moléculas cuyos enlaces son covalentes polares, es decir, que forman dipolos por diferencia de electronegatividad entre sus átomos.

Interacción dipolo inducido: Se produce cuando en moléculas no polares, el dipolo es inducido, por ejemplo mediante un campo eléctrico. También existen interacciones entre un dipolo permanente y un dipolo inducido. Los iones también son capaces de interactuar con dipolos de moléculas, ya sean estos permanentes o inducidos. La interacción dipolo-dipolo puede suceder entre dos partes de la misma molécula, si ésta es lo suficientemente grande. En un líquido, por ejemplo, las moléculas están muy cercanas entre sí, unidas por fuerzas intermoleculares, por ejemplo interacciones dipolo-dipolo. Cuanto mayor es la fuerza intermolecular que las une, mayor será el punto de ebullición del líquido, dado que se necesitará más energía para romper dichos enlaces. Esto es lo que sucede con las moléculas de agua, que están unidas por un tipo especial de interacción dipolo, el puente de hidrógeno. En el puente de hidrógeno de esta molécula el dipolo positivo del átomo de hidrogeno interactúa con el par libre de electrones del átomo de oxígeno. Estos enlaces dan mayor cohesión a las moléculas y es la razón por la cual el punto de ebullición del agua es mucho más alto del esperado para su peso molecular. La interacción dipolo-dipolo existe independientemente de otras fuerzas intermoleculares, como las fuerzas de dispersión de London, donde los movimientos de las moléculas causan dipolos temporarios que ejercen fuerzas de atracción electrostática temporarias [23].

Para una interacción dipolo a dipolo se usan, en forma similar a su contraparte electrostática, tres contribuciones de las Sumas de Ewald. La expresión de la energía para la interacción dipolo - dipolo queda expresada en la ecuación 7.

$$\begin{aligned}
 Ewald = & \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left(\sum_{|n|=0}^{\infty} (\mu_i * \mu_j) \beta(r_{ij} + n) - (\mu_i * r_{ij})(\mu_j * r_{ij}) C(r_{ij} + n) \right. \\
 & + \sum_{k \neq 0} \left(\frac{1}{\pi L^3} \right) (\mu_i * K) (\mu_j * K) \left(\frac{4\pi^2}{K^2} \right) \exp\left(-\frac{K^2}{4K^2}\right) \cos(K \\
 & \left. * r_{ij} \right) - \sum_{i=1}^N 2K^3 \mu_i^2 / 3\pi^{1/2} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left(\frac{4\pi}{3L^3} \right) \mu_i * \mu_j
 \end{aligned}$$

Ecuación 7

Donde μ_i y μ_j son dos dipolos (sean momentos eléctricos o magnéticos), \mathbf{r}_{ij} es el vector que va de la posición de los dipolo μ_i a la posición del dipolo μ_j , \mathbf{N} es el tamaño de muestra y \mathbf{L} es el volumen de la celda y los componentes B y C están dados por

$$B(\mathbf{r}) = \frac{\text{erfc}(\alpha r) + \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}}\right) \alpha r \exp(-\alpha^2 r^2)}{r^3}$$

Ecuación 8

$$C(\mathbf{r}) = \frac{3\text{erfc}(\alpha r) + \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}}\right) \alpha r (3 + 2 \alpha^2 r^2) \exp(-\alpha^2 r^2)}{r^5}$$

Ecuación 9

$\text{erf}(x)$ es la función de error complementario la cual tiende a cero cuando x se incrementa, su valor es elegido de tal manera que sea lo suficientemente grande para que la suma pueda ser rápidamente convergente gracias al corto rango de esta función.

Los valores de α se obtiene de acuerdo al peso de la parte real y recíproca y han sido establecidos en otros trabajos alrededor de 2.0 [16]

Como se observa las sumas de Ewald de interacciones dipolo-dipolo son más complejas que las sumas para las interacciones de carga-carga.

4.3 Método de Monte Carlo

Los primeros análisis tipo Monte Carlo datan de finales del siglo XIX [24], en el laboratorio de los Alamos, mientras Stan Ulam y John Von Neumann investigaban el movimiento aleatorio de los neutrones. Estos análisis mostraron un gran desarrollo con la era de la computación y el uso de datos simulados, constituyéndose en la actualidad en una importante herramienta para el desarrollo de teorías y métodos matemáticos. Esta técnica se ha venido aplicando en diferentes ámbitos, y se ha convertido en el método más importante para solucionar problemas físicos estadísticos, cuyo objetivo es generar un conjunto representativo de configuraciones aleatorias para acceder a cantidades termodinámicas del sistema en el que se está interesado, pasando de un estado a otro por medio de una cadena de Markov a través del espacio de configuraciones, sin la necesidad de resolver el sistema analíticamente o realizar una enumeración exacta [25].

Un proceso de Markov es el mecanismo por el cual dado un estado μ se genera un nuevo estado ν del sistema. Esta transición se hace de una forma aleatoria, y la probabilidad de generar el estado ν a partir del estado μ está dada por la probabilidad de transición $P(\mu \rightarrow \nu)$, la cual debe estar normalizada [10].

$$\sum_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu) = 1$$

Ecuación 10

Puede decirse entonces que este método es un proceso estocástico numérico, es decir, una secuencia de estados cuya evolución viene determinada por sucesos aleatorios. En el método de Monte Carlo se simula directamente el proceso en estudio, creando un modelo del sistema y haciéndolo pasar sobre una gran cantidad de estados posibles que se calculan estadísticamente. Esto se hace de acuerdo a una cierta distribución probabilística que calcula los valores esperados de los observables físicos deseados. La estimación nunca se realizará dentro de los límites dados con certeza, pero solo, si el número de pruebas es grande, con gran probabilidad. (Afirmación de Metrópolis y Ulam en 1949)[26].

4.4 Mecánica estadística

Al estudiar sistemas compuestos por un número muy grande de componentes atómicos, la física deja de lado la propuesta de analizar detalladamente trayectorias o estados cuánticos, y busca un método estadístico basado en probabilidades que prevalece sobre los conceptos de órbitas exactamente prescriptas. La mecánica estadística del

equilibrio clásica o cuántica conduce a predicciones teóricas acerca del equilibrio térmico de un sistema físico sobre la base de cuatro etapas conceptuales [27].

- La especificación o enumeración de los estados microscópicos del sistema.
- Un conjunto hipotético de sistemas repetidos [28].
- El postulado de igual probabilidad de los microestados de un sistema aislado.
- Las técnicas para el cálculo de las probabilidades y los promedios de las variables dinámicas del sistema.

La mecánica estadística provee una explicación de la termodinámica clásica a partir de la teoría atómica, y permite el cálculo de los potenciales termodinámicos y de otras propiedades de un cuerpo. La mecánica estadística se ocupa también de procesos fuera de equilibrio.

Para un sistema que mantiene fijo el número de partículas y la temperatura se demostró que la probabilidad de encontrar al sistema en un estado particular E_i , [28] está dada por:

$$P_{i=} = \frac{e^{\left(\frac{-E_i}{K_B T}\right)}}{Z}. \quad (14)$$

Ecuación 11

Donde E_i , es la energía del estado i , K_B es la constante de Boltzmann y Z es la función de partición, que se define como

$$Z = \sum_i e^{(-E_i/K_B T)}. \quad (15)$$

Ecuación 12

Para un sistema en equilibrio, el valor de un observable A , puede calcularse mediante

$$\langle A \rangle = \sum_i A_i P_i. \quad (16)$$

Ecuación 13

Por otro lado, el valor esperado de la energía interna (E_{int}), del sistema es:

$$E_{int} = \sum_i E_i P_i = \frac{1}{Z} \sum_i E_i e^{-E_i/K_B T}$$

Ecuación 14

4.5 Algoritmo metrópolis

El algoritmo metrópolis aplica el muestreo por importancia, ya que las muestras se toman siguiendo una distribución de probabilidad no uniforme. Este algoritmo es un método de cadenas de Markov [29] para simular distribuciones multivariadas, es utilizado principalmente para simular observables de distribuciones difíciles de manejar [26] y se describe de la siguiente manera:

El algoritmo Metrópoli se describe mediante los siguientes pasos

1. Se establece una configuración inicial del sistema.
2. Se visita un sitio de red y se intenta una movida o inversión del espín.
3. Se calcula el cambio en la energía ΔE por dicha inversión
4. Si ΔE es menor o igual a cero se acepta dicha inversión y se va al paso 2.
5. Si ΔE es positivo se calcula $W = \exp(-\Delta E/k_B T)$
6. Se genera un número aleatorio r en el intervalo $[0,1]$.

7. Si $r \leq W$ se acepta la nueva configuración; en otro caso se mantiene la configuración inicial.
8. Se va al paso 2 hasta completar la visita completa de los espines del sistema.
9. Se calculan los observables deseados.
10. Se repiten los pasos 2 a 8 para coleccionar un número suficiente de configuraciones.
11. Se calculan los promedios sobre el ensamble

4.6 Modelos de espines

4.6.1 Modelo de Ising

Es un modelo magnético y fue propuesto por el físico Alemán Ernest Ising para explicar la transición de fase que existe en los materiales magnéticos al variar la temperatura, inicialmente fue desarrollado para una sola dimensión. El sistema que estudiaba Ernest no tenía transiciones de fase, por esta razón concluyó inicialmente que para ninguna otra dimensión existían, pero más adelante en 1944, Lars Onsager, hizo el análisis para dos dimensiones, encontrando una solución más acertada para las propiedades térmicas de una red $L \times L$, con condiciones de frontera periódicas. En este análisis se observó una transición de fase de segundo orden con divergencias en el calor específico, la susceptibilidad y la longitud de correlación [30].

El modelo de Ising en dos dimensiones está conformado por una matriz de $L \times L$ espines S_i que pueden tomar solo dos valores $+1$ ó -1 . Cada espín interactúa con cuatro vecinos que están inmediatamente a su alrededor en la matriz, el superior, inferior, a la izquierda y a su derecha. Además, para simular que la matriz es infinita, a los espines que se encuentran en los extremos de la matriz se les asocia como vecinos los espines del otro

extremo de la matriz, duplicando así la matriz LxL infinitamente y llenando el espacio bidimensional con conjuntos de puntos LxL idénticos.

El número de posibles configuraciones del sistema es 2^{L*L} [31], cada una de las cuales tiene una energía, la cual se puede determinar por el Hamiltoniano con un campo magnético h , tomando la siguiente forma:

$$H = -J \sum_{(i,j)} s_i - \vec{H} \sum_{(i)} s_i$$

Ecuación 15

En esta ecuación **i** y **j** representan las diferentes posiciones de los espines dentro de la red de iones, **J** es el parámetro de acoplamiento entre los espines, para este trabajo es constante, aunque para para cada espín podría ser variable.

$J_{ij} = -J$; de esta manera si el sistema es FM $J > 0$, si es AFM $J < 0$, no hay magnetización si $J = 0$ [30].

Y por último se tiene el parámetro H, el cual es un campo escalar externo, que en el Hamiltoniano ayudará a que los espines se alineen con él, significando esto que los espines tomen el mismo signo que el campo ya que de este modo se minimiza la energía, La contribución energética de este término, tenderá a minimizarse cuando los momentos magnéticos se alinean con la dirección del campo.

Este modelo tiene una función de partición que permite el cálculo de variables físicas, como la magnetización, la susceptibilidad o el calor específico mostrando

claramente transiciones de fase muy propias de los materiales FM. A temperaturas elevadas, todos los clústeres con espines paralelos son muy pequeños, en tanto que a bajas temperaturas hay un gran clúster de espines paralelos ($J>0$) o antiparalelos ($J<0$). El fundamento esencial de este modelo, y de muchos otros modelos magnéticos, es que el magnetismo de un material en bloque, está hecho por la combinación de momentos de dipolos magnéticos de muchos espines atómicos presentes en el material [32] [10].

4.6.2 Modelo de Heisenberg

El modelo de Heisenberg fue introducido en 1928 y discutido con algún detalle como un modelo para ferromagnetismo en el libro de Van Vleck de 1932 [33]. El formalismo matemático para la solución del modelo de Heisenberg fue desarrollado a través del modelo de Potts [3]. Este modelo, junto con el método de Monte Carlo, permiten simular la energía de un sistema cuando éste pasa a través de una serie de estados asociados a cierta probabilidad, hasta alcanzar el equilibrio termodinámico [3]. Después de alcanzar este estado, se proceden a calcular los promedios de los observables de interés, que para el caso de estudio puede ser, energía, magnetización, susceptibilidad magnética o el calor específico.

El modelo de Heisenberg involucra vectores de giro clásicos \mathbf{S}_i unitarios, que interactúan a través de un Hamiltoniano dado por los siguientes términos:

$$\mathbf{H}_{FM} = \mathbf{H}_{exch} + \mathbf{H}_{dip} + \mathbf{H}_{anis} + \mathbf{H}_{field}$$

Ecuación 16

Donde el primer término representa la energía de intercambio, que es un efecto cuántico que surge del traslape de las funciones de onda vecinas entre los átomos del material, representada así:

$$H_{exch} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i * \vec{S}_j$$

Ecuación 17

El segundo término representa la interacción dipolar. En este trabajo se utilizarán las sumas de Ewald descritas anteriormente en la ecuación (7), en su forma dipolo-dipolo para la interacción dipolar.

El tercer término representa la anisotropía, que se puede describir como otra contribución a la energía que depende de la dirección de la magnetización respecto a los ejes cristalográficos del material.

$$H_{anis} = k \sum_i (S_j^z)^2$$

Ecuación 18

Donde K es la constante de anisotropía que depende de la temperatura y S es la componente es z del momento magnético S_i .

Y por último se tiene el término de campo externo,

$$H_{field} = h \sum_i S_j^z \quad (13)$$

Ecuación 19

donde h es el campo magnético y S es la componente z del momento magnético S_i .

Este hamiltoniano describe muchos sistemas magnéticos físicamente interesantes, en los cuales se puede estudiar la energía, la magnetización, la susceptibilidad, las curvas de histéresis, entre otros.

4.7 Perovskitas y Manganita

Las perovskitas son óxidos mixtos con estequiometría ABO_3 . Una de las características distintivas de las perovskitas respecto de otras familias de óxidos es la gran variedad de sustituciones que puede aceptar su estructura cristalográfica. El Ba, el K y los lantánidos son ejemplos de los aproximadamente 25 elementos que pueden ocupar la posición A. Por otra parte, se conocen casi 50 elementos de la tabla periódica capaces de ocupar el sitio B. En la Figura 4 se muestra la estructura cúbica ideal (grupo espacial $Pm\bar{3}m$) de un óxido con estructura de perovskita.

Las manganitas son compuestos con estructura cúbica tipo perovskita. Según Jonker y Van Santen, el término manganita inicialmente se aplicaba solo a los compuestos que contuvieran iones de manganeso tetravalentes Mn^{4+} ; sin embargo, por facilidad, ellos aclararon que se podría utilizar el término manganita para compuestos que contengan manganeso trivalente o tetravalente indiscriminadamente. Los sitios A son iones que pueden ser metales de tierras raras y/o tierras alcalinas, tales como Ca^{2+} , Sr^{2+} , Ba^{2+} y La^{3+} entre otros, los sitios B son los iones de Mn^{3+} y Mn^{4+} y los sitios O son los iones O^{2-} .

El $La_{1-x}Sr_xMnO_3$ (*LSMO*) es uno de los compuestos pertenecientes a la familia de las manganitas más estudiados. Una de las razones para esta popularidad es su conocido efecto de MR, con mayores temperaturas críticas que en otras manganitas y la posibilidad de analizar el compuesto para todo el rango de concentraciones de Sr. En el compuesto $La_{1-x}Sr_xMnO_3$ el manganeso se encuentra en forma trivalente y tetravalente $Mn^{3+_{1-x}}$, Mn^{4+_x} .

En general, dependiendo del nivel de dopaje x en las manganitas, se tendrá una mayor o menor presencia de átomos de manganeso $Mn^{3+_{1-x}}$ o Mn^{4+_x} , favoreciendo uno u otro tipo de interacción, esto es, de largo o corto alcance. Por ejemplo, en un extremo del dopaje podemos tener el compuesto $CaMnO_3$, con presencia de Mn^{4+} , donde la interacción dominante es la dipolar [34]. Al ir aumentando la sustitución de estos iones por iones Mn^{3+} , este tipo de interacción va disminuyendo prácticamente hasta desaparecer, dando lugar a fenómenos de corto alcance como el del doble intercambio entre estos dos iones, y al dominio de comportamientos de tipo FM o AF. Por lo anterior cualquier modelo que pretenda estudiar esta familia de compuestos debe tener en cuenta ambos tipos de interacción.

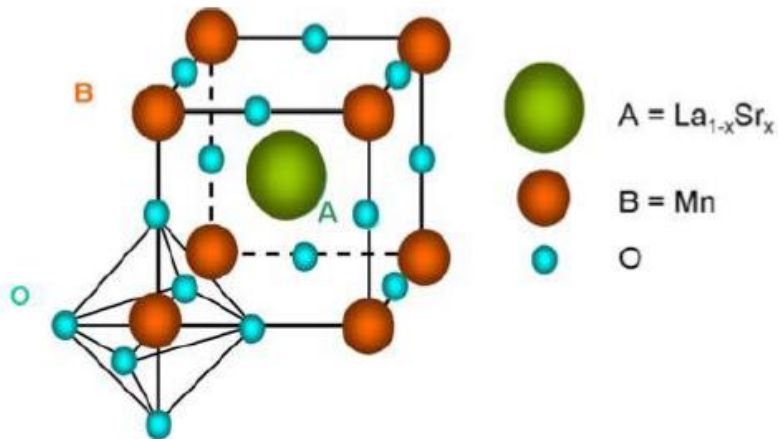


Figura 4 Estructura cristalográfica de una manganita tipo perovskita

4.8 Paralelización

La programación paralela tiene sus inicios en los años 50, con el objetivo de construir una máquina con capacidad de procesamiento 100 veces mayor de cualquier otra disponible. Lo que se buscaba era una máquina para disminuir el tiempo total de ejecución de aplicaciones, conseguir resolver problemas más complejos, de grandes dimensiones, y proporcionar concurrencia, o sea, permitir la ejecución simultánea de tareas y esta sigue siendo la razón por la que se busca realizar paralelización en los programas.

La paralelización de algoritmos se usa fundamentalmente para aumentar la velocidad del recorrido secuencial de las tareas programadas y así obtener resultados de manera más rápida, en otras palabras, paralelizar es una función que realiza el procesador para ejecutar varias tareas al mismo tiempo sin afectar los resultados [35]

En la actualidad hay dos grandes arquitecturas que permiten implementar un problema de forma paralela: CPU y GPU. La CPU puede incluir algunos cientos de

núcleos, mientras que en GPU puede tener miles de núcleos, lo anterior no significa que la GPU tenga mejor desempeño que la CPU ya que un solo núcleo de CPU es muy superior a uno de GPU, pero la GPU está optimizada para gestionar la memoria de forma paralela, teniendo en cuenta el consumo de memoria ram, pues esta memoria es menor para cada núcleo GPU que para el de CPU.

Existen varias librerías las cuales ayudan a la hora de paralelizar:

4.8.1 OpenMP

OpenMP (Open Multi-Processing) es una interfaz de programa de aplicación API (Application Program Interface) que posibilita la programación paralela en entornos multiprocesador con memoria compartida [36] y la concurrencia en varios lenguajes de programación que, para el caso, es muy usada en Fortran ayudando a una paralelización optimizada. OpenMP es un modelo de programación portable y escalable de un manejo simple y flexible para el desarrollo de aplicaciones paralelas, debido a su escalabilidad se puede correr en computadores de escritorio hasta computadores con altos desempeños como supercomputadoras.

Lo que busca OpenMP es dividir una tarea muy pesada en varios hilos con menor peso, para luego recolectar sus resultados al final y unirlos en un solo resultado. OpenMP está diseñado para máquinas multiprocesador/núcleo, memoria compartida como se puede observar en la Figura 5.

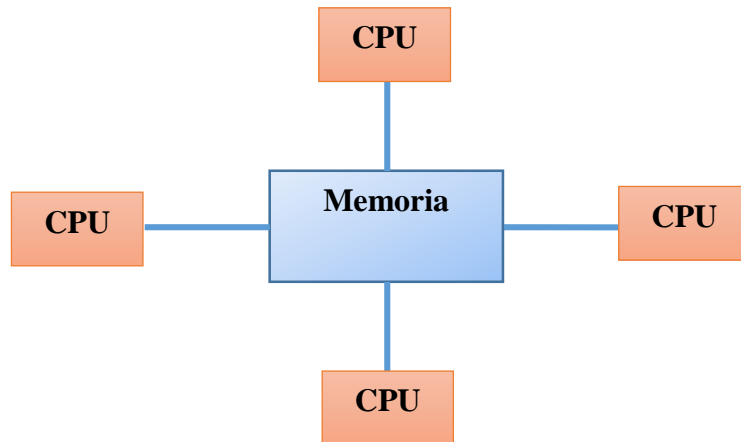


Figura 5 Memoria Compartida OpenMP

Los programas basados OpenMP logran paralelismo exclusivamente a través del uso de hilos, teniendo en cuenta que un hilo es la unidad de procesamiento más pequeña que puede programar un sistema operativo. La idea de una subrutina que se puede programar para ejecutarse de forma autónoma podría ayudar a explicar qué es un hilo. Los hilos existen dentro de los recursos de un solo proceso. Sin el proceso, dejan de existir, la paralelización en OpenMP se puede apreciar en la Figura 6.

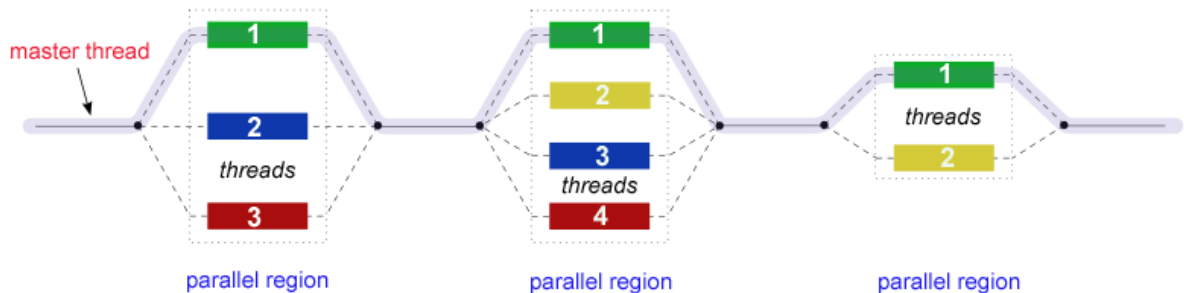


Figura 6 Paralización con OpenMP

4.8.2 OpenACC

OpenACC es un modelo de programación paralelo portátil relativamente nuevo, data de 2011, el cual permite a los programadores de Fortran, C y (hasta cierto punto) C++ aprovechar el poder de los sistemas de arquitecturas y plataformas de hardware HPC (High performance Computing) heterogéneas, con un esfuerzo de programación significativamente menor que el requerido con un modelo de bajo nivel. Este modelo de programación está diseñado para el usuario, para científicos e ingenieros interesados en mejorar el tiempo de procesamiento de sus códigos [37].

OpenACC permite a los programadores usar directivas de compilación simples para identificar qué áreas de código a acelerar, sin necesidad de modificar el código subyacente. Al identificar los segmentos de código paralelos, las directivas de OpenACC permiten al compilador hacer el trabajo de mapear el cálculo en el acelerador; este también permite que el código sea ejecutado por un acelerador conectado, como una GPU. Por lo tanto, OpenACC permite la programación híbrida de CPU + GPU e intenta obtener lo mejor del mundo secuencial y paralelo. Además, utiliza la CPU para optimizar la porción

secuencial del código y usa el acelerador para ejecutar la porción paralela del código, como se puede apreciar en la Figura 7.

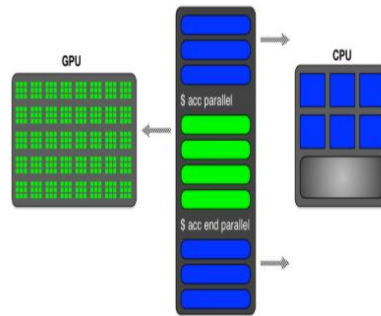


Figura 7 Modelo de Ejecución OpenACC

5 METODOLOGÍA

Para realizar la simulación se utilizó una metodología incremental basada en la creación de prototipos evolutivos, los cuales se van refinando a medida que se analizan los resultados. Esta metodología se encarga del desarrollo de diseños para que sean analizados e implementados y pasar a uno mejorado a medida que se realizan nuevas especificaciones. Esta metodología es de gran utilidad en proyectos en los cuales se desea refinar los requerimientos a medida que se va realizando el desarrollo, pues como se dijo anteriormente aprovecha la retroalimentación obtenida del prototipo anterior para generar nuevos diseños de prototipos con una mejor calidad y eliminando así errores observados.

Este tipo de metodología se inicia con la definición de los objetivos globales para el software, luego se identifican los requisitos conocidos y las áreas del esquema en donde es necesario realizar más énfasis, para así tener una visión más amplia y clara de lo que se desea construir. El modelo es básicamente prueba y error ya que si no se obtienen los resultados esperados significa que la prueba falló por lo cual se debe corregir el error que se tenga hasta obtener los resultados y quedé satisfecho. Además cada prototipo debe ser construido en poco tiempo, usando los algoritmos adecuados y a partir de estos, finalmente se puede obtener una versión final con un desarrollo claro, organizado y refinado.

Cada iteración genera un prototipo cada vez más evolucionado, y cada uno es guardado por si en determinado momento se desea volver a él, de esta manera cuando se requieran los prototipos se pueden volver a utilizar una y otra vez, pues el código fuente

es reutilizable. Este paradigma de programación se compone de las siguientes etapas, las cuales se muestran en la Figura 8.



Figura 8 Metodología por prototipos, Tomado de libro de Pressman (2005)
A continuación se describen cada una de las etapas del ciclo de vida elegido que forman parte de la metodología.

- 1. Recolección y refinamiento de requisitos:** Se realiza un análisis de las necesidades para determinar las características y funcionalidades del software a desarrollar, determinando la factibilidad y especificando todo lo que debe hacer el sistema sin entrar en detalles técnicos.
- 2. Diseño rápido:** En esta etapa se describe la estructura interna del software, se define lenguaje de programación, se desarrollan diagramas de flujo de las actividades y alcances, verificando la estructura de control, el tamaño, los algoritmos básicos.

3. **Construcción del prototipo:** Se programan los requisitos especificados haciendo uso de las estructuras de datos diseñadas en la fase anterior en forma legible para la máquina, desarrollando así un prototipo.
4. **Evaluación del prototipo:** Consiste en lograr un funcionamiento adecuado del producto incluyendo objetivos definidos en las fases anteriores. La evaluación debe asegurar que se han probado todas las sentencias del mismo, y que en las funciones externas se han realizado pruebas que aseguren que la entrada definida produce los resultados que se esperan realmente. Se verifica que todos los componentes del sistema funcionen correctamente y cumplen con los requisitos.
5. **Refinamiento del prototipo:** Es un aumento de la funcionalidad del sistema, para luego volver a la especificación de los requisitos y aumentar las necesidades del prototipo o continuar, si se logró el objetivo y alcance deseados, en la iteración que está terminando.
6. **Producto de ingeniería:** Es una transición adecuada de los prototipos, realizada para obtener el producto final, después de haber sido refinado durante varias iteraciones.

Para este proyecto se realizaron 5 prototipos, cada uno fue una etapa de la metodología, utilizando como lenguaje de programación Fortran 95 y como entorno de desarrollo Silverfrost Plato Versión 4.7; antes de describir cada uno de los prototipos es importante realizar las siguientes aclaraciones.

Para modelar el comportamiento magnético de compuestos de manganitas tipo perovskita se elegirá una estructura de simulación con celdas unitarias cúbicas. Este acercamiento está de acuerdo con a las estructuras reales observadas en esta familia [32] (ver Figura 5). Debe aclararse que este comportamiento cúbico para la celda unitaria puede cambiar un poco debido a deformaciones causadas por el dopaje, o la temperatura, la presión, entre otros.

Debido a que el comportamiento magnético en las manganitas está dominado por el momento magnético de los iones de manganeso, este modelo de celdas se representará mediante una retícula de posiciones (i,j,k) en la cual cada posición representa un ion de manganeso. En este trabajo no se ajustarán los parámetros del modelo a ninguna manganita en particular. Sin embargo, cabe la posibilidad de hacerlo utilizando información experimental del compuesto de interés como es la temperatura crítica del material y la constante de red mediante procedimientos ya explorados por otros autores [3], [11], [12], [38].

Para el presente estudio se eligieron tamaños de muestra de $L= 2, 3, 4, 5$ y 6 y con corridas hasta de 10000 pasos de Monte Carlo. Lo anterior para realizar comparaciones de tiempos de cómputo entre los algoritmos empleados.

Los prototipos implementados serán explicados brevemente a continuación.

5.1 Prototipo 1: Cálculo de energía de estructuras tipo manganita sin tener en cuenta la Interacción Dipolar

Para la creación de este primer prototipo se inició con una muestra plana y mediante la implementación del método de Ising (hamiltoniano dado por la ecuación 11) para muestras de varios tamaños (2, 4, 6, 8, 10...20) empleando 10000 pasos Monte Carlo como una primera verificación de la comprensión del proceso. Seguidamente se realizó la implementación con el modelo de Heisemberg (hamiltoniano dado en la ecuación 12) sin incluir el término de interacción dipolar. Se crearon muestras espaciales de diferentes tamaños (2, 4, 6, 8, 10...20), para un rango de temperaturas de 0.1 en 0.1 hasta 10.0. Se realizó el cálculo de la energía en el estado termodinámico mediante el método Monte Carlo a través del algoritmo Metrópolis descrito en la sección de marco teórico, el cual mediante muestreo por importancia, permite obtener distribuciones multivariadas, y realizar el cálculo de la energía actual y de la energía de prueba, para cada punto de la red. Para este modelo se obtuvieron los observables físicos energía, magnetización y susceptibilidad que resultaron ser comparables a los resultados reportados en la literatura.

Para la simulación de los ciclos de histéresis se procede de la forma descrita en el párrafo anterior cambiando la variable temperatura por la variable campo magnético externo. Los estados de la muestra se recorren con el algoritmo Metropoli para cada valor de campo dentro de un rango de 4 a -4 unidades de J y de regreso desde -4 hasta 4.

5.2 Prototipo 2: Cálculo de energía de estructuras tipo manganita teniendo en cuenta la interacción dipolar: Radio de corte

Para la realización de este segundo prototipo se retomó la versión anterior, a la cual se adicionó en el Hamiltoniano un término de interacción dipolar. La suma respectiva se realizó mediante la estrategia de emplear radios de corte. Se realizaron pruebas, con pocos pasos Monte Carlo, para diferentes radios de corte (3, 4, 5, 6, ... 17, 20, 25, 28), con el fin de determinar los tiempos necesarios para las corridas y la convergencia de la suma. Se implementó el método de Monte Carlo repitiendo cada una de las iteraciones de los cálculos de energía y seguidamente se obtuvieron los observables físicos para un rango pequeño de temperatura (0.1 en 0.1 hasta 4.0). La intención de este prototipo fue determinar los tiempos necesarios para llevar a cabo el cálculo de energía en función de los radios de corte seleccionados.

5.3 Prototipo 3: Cálculo de energía para estructuras tipo manganita con interacción dipolar: Sumas de Ewald

Basado en el prototipo anterior se procedió a implementar las sumas de Ewald en el cálculo de la interacción dipolar tal como se describen en la ecuación 7; estas sumas tienen una complejidad tanto matemática como computacional.

Para esta iteración se crea una muestra tridimensional donde asignan los espines a una estructura en bloque de manera aleatoria, definiendo dipolos magnéticos en cada punto de la red, con condiciones periódicas y se proceden a realizar pruebas para así definir unas condiciones de entrada confiables.

Para este proceso se realiza un estudio de la relajación mediante la identificación del número de pasos de Monte Carlo necesarios para la relajación del sistema. Lo anterior para asegurar que los promedios para el cálculo de los observables realmente se hagan en el equilibrio termodinámico del sistema, realizando corridas con 100, 1000 y 10000 pasos de Monte Carlo.

Por otro lado se realizaron diferentes corridas variando la J de intercambio, la cual permite observar que al ser incrementada, los espines tienden a alinearse con mayor facilidad a altas temperaturas por lo que la temperatura crítica aumenta con este incremento. Igualmente se varió la constante de interacción dipolar (g), con diferentes tamaños, pasos de Montecarlo y temperaturas.

Es de anotar que los observables fueron evaluados promediando los resultados de utilizar 5 semillas diferentes en el generador de números aleatorios de Monte Carlo.

5.4 Prototipo 4: Optimización de código del prototipo anterior

Después de tener un prototipo del algoritmo funcional se busca optimizar el tiempo de procesamiento, para esta iteración se realiza una revisión a fondo de cada uno de los bloques de código y su funcionalidad, buscando siempre consumir el menor tiempo posible de procesamiento. Para este proceso era importante escribir lo menos posible en disco, es decir, se implementó un caché de resultados en memoria RAM, debido a que este proceso es el que consumía más tiempo; esto se hizo guardando información en arreglos que se pudieran consultar sin necesidad de abrir archivos y ser leídos de nuevo. También se busca delimitar la información que se debía guardar, y tener la menor cantidad de ciclos

anidados y recorrer arreglos tridimensionales en un solo ciclo. De esta manera, en el siguiente prototipo sería posible distribuir tareas equitativas a varios núcleos del computador.

5.5 Prototipo 5: Paralelización del prototipo anterior

En este prototipo ya se tiene un código depurado y optimizado para proceder a ser paralelizado mediante dos librerías OpenMP y OpenACC, las cuales necesitan de paquetes instalados en el sistema.

Una vez configurados los computadores para este tipo de arquitecturas se procede a realizar la elección de los bloques de código a paralelizar y las respectivas pruebas de tiempo en los diferentes equipos a los que se tenía acceso, los cuales se describen en la Tabla 1. Los tiempos de corrida tienden a variar en los diferentes equipos, dadas sus características propias y teniendo en cuenta que solo en dos de los equipos se pueden realizar pruebas a nivel GPU.

En la siguiente Figura 9 se muestran los 5 prototipos implementados

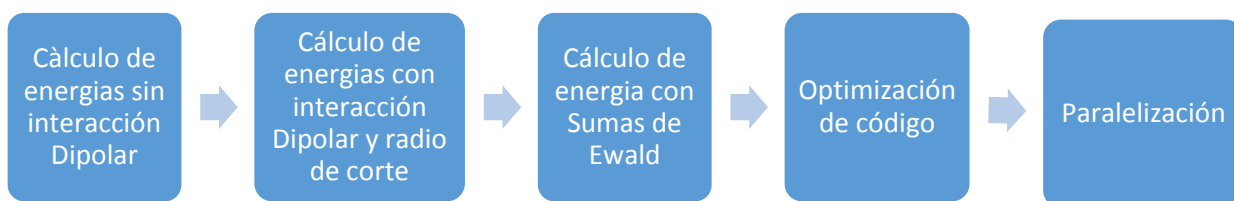


Figura 9 Prototipos implementados

5.6 Marco experimental

Para la elección del número de pasos de Monte Carlo se realizaron las curvas de relajación y se decide trabajar con 10.000 y con un radio de corte de 800 el cual se toma mayor a 10 veces el tiempo de relajación integral calculado. De acuerdo a este criterio, las simulaciones se efectuaron sobre 1.5×10^4 configuraciones (MCSmax) número máximo de pasos de Monte Carlo, descartando los primeros 1×10^4 pasos. Para la constante de intercambio (J) se realizan también las pruebas correspondientes, donde a mayores valores de la constante de intercambio hay un mayor acople ferromagnético entre primeros vecinos, lo cual implica a su vez la necesidad de mayores temperaturas para eliminar el orden magnético, se decide trabajar con un J de 1.0.

El valor del parámetro α se fijó en 0,5 ya que permitía convergencias más rápidas en las unas y además es un valor reportado en la literatura.

Se procede a variar los siguientes parámetros:

1. Temperatura 0.1 a $10 K_B T$ en incrementos de 0.1.
2. Semillas en los generadores de números aleatorios para las simulaciones.
3. La cantidad de pasos de MC para identificar un valor donde se estabiliza la energía.
4. Tamaños de la muestra.
5. La constante de intercambio J y de interacción dipolar g.
6. Ejecución en varios servidores.

5.6.1 Condiciones iniciales

Para iniciar el proceso de simulación se debe tener un archivo con extensión .Dat en el cual se describen las condiciones con las que se llevará a cabo la corrida de la

simulación, permitiendo de esta manera variar parámetros de inicio sin necesidad de afectar el código. Los valores necesarios para la configuración inicial del programa son:

(Ti): Es el valor que define la temperatura inicial en unidades de energía para iniciar los cálculos.

(Tf): Es el valor donde se define hasta que temperatura en unidades de energía se desea trabajar.

(dT): Paso en la temperatura en unidades de energía.

(Ppy): Relación de presión-módulo de Young

(Mcsmax): Número máximo de pasos de Monte Carlo

(No): Corte en mcs a partir del cual calculamos los promedios

(E): Campo eléctrico para polarización

(1-x,2-y,3-z) (ic): Selección de la dirección del campo

(Des): Selección, 1 para temperatura, 2 para campo:

(sp): Porcentaje de sitios con polarización (entre cero y uno):

(Jg=J/g): Constante de intercambio

(kg=k/g): Constante de anisotropía

(g): Constante de interacción dipolar

5.6.2 Equipos de cómputo utilizados

Para la ejecución de los programas y la obtención de resultados se utilizan los equipos cómputo ubicados en diferentes lugares descritos en la *Tabla 1*, los cuales permitieron realizar procesos a distintas velocidades, y realizar corridas de diferentes programas y en distintos computadores al mismo tiempo. Se Debe tener en cuenta que las comparaciones de tiempo se realizaron en dos equipos para medir el nivel de paralelización con CPU (Gaia, Bioinfomaster.ird.fr) y para probar con GPU se realizó en el Laboratorio realidad Virtual de la Universidad Autónoma de Manizales (UAM)

Tabla 1 Configuración Equipos de computo

Nombre	Ubicación	Tecnología Cpu	Core	Ram	Caleda-rizador	Sistema operativo	GPU
Gaia	UAM	Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2630 v3 @ 2.40GHz	16	32GB	No	Linux Ubuntu 14.04.3	NO
Bioinfomaster.ird.fr	Francia	Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2630 v2 @ 2.60GHz	12	64	SGE	Linux CentOS 7	No
Laboratorio realidad Virtual	UAM	Intel(R) Core(TM) i9-9900K CPU @ 3.60GHz	16	64	NO	Linux Ubuntu 18.04.3	GeForce RTX 2080Ti 11GB Ram 2944 CudaCores
BIOS	Manizales	Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2670 0 @ 2.60GHz	32	256	Slurm	CentOS 6.7	NO
BIOS	Manizales	Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2670 0 @ 2.60GHz	32	256	Slurm	CentOS 6.7	2 nvidia Tesla K20m 4.7GB Ram 2496 CudaCores

5.7 Archivos de salida

Como resultado de la simulación se obtienen como producto tres archivos con extensión .Dat de los cuales se puede obtener la información necesaria para realizar los respectivos análisis de los observables físicos. Estos archivos se presentan de la siguiente manera:

Magnetización: Este archivo está compuesto por 9 columnas las cuales describen, temperatura, Energía promedio, Magnetización promedio en X, Magnetización promedio en y, Magnetización promedio en XY, Magnetización promedio en Z, susceptibilidad, susceptibilidad en XY y susceptibilidad en Z.

Posiciones_ini: Este archivo almacena las posiciones y los dipolos iniciales en 7 columnas las cuales describen, posición en i, posición en j, posición k, tipo de celda (1) con dipolo magnético (2) sin dipolo magnético, dipolos en la posición X, Y y Z.

Posiciones_Fin: Este archivo almacena las posiciones y los dipolos de configuración, final la simulación en 7 columnas las cuales describen, temperatura, posición en i, posición en j, posición k y dipolos en la posición X, Y y Z.

6 RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En este capítulo se presentan los resultados de las simulaciones realizadas para manganitas tipo perovskitas partiendo de la implementación de un modelo sencillo (Ising) y pasando a un modelo más completo (Heisemberg). Los resultados se presentan en tres secciones; en la primera se incluye los observables físicos sin tener en cuenta la interacción dipolar; en la segunda, se incluye la interacción dipolar como término en el Hamiltoniano y se emplean las sumas de Ewald y los Radios de Cortes para realizar el cálculo de las sumas. Y en la tercera, se presentan los resultados de tiempos y rendimientos cuando se realizan modificaciones y mejoras al programa tal como la optimización del código, la paralelización con OpenMP y OpenACC.

6.1 Cálculo de los observables físicos sin incluir la interacción dipolar

Como un primer acercamiento al modelo de Heisemberg, se partió de un modelo básico de Ising con el cual se calcularon energías, magnetización y susceptibilidad. A pesar de su sencillez, este modelo contiene todos los elementos necesarios para estudiar Hamiltonianos más complejos mediante la dinámica de Monte Carlo. En las Figuras 10, 11, 12 se muestran las curvas de energía, magnetización y susceptibilidad en función de la temperatura obtenidas para una muestra plana de 20 x 20 para 20000 pasos Montecarlo mediante el modelo de Ising. Las curvas presentan el comportamiento esperado para este tipo de sistemas lo cual verifica el adecuado funcionamiento del prototipo.

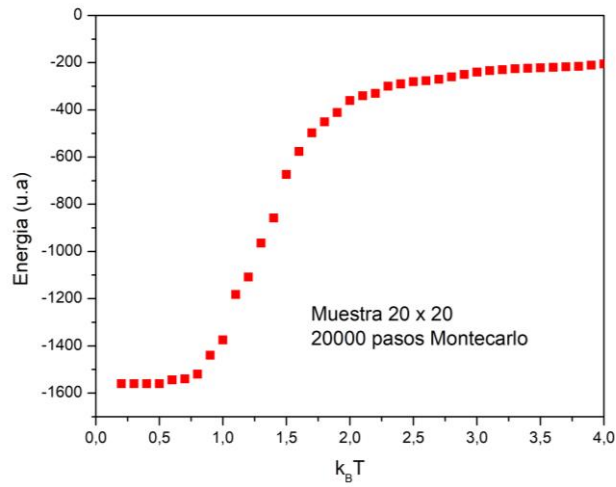


Figura 10 Energía con modelo de Ising

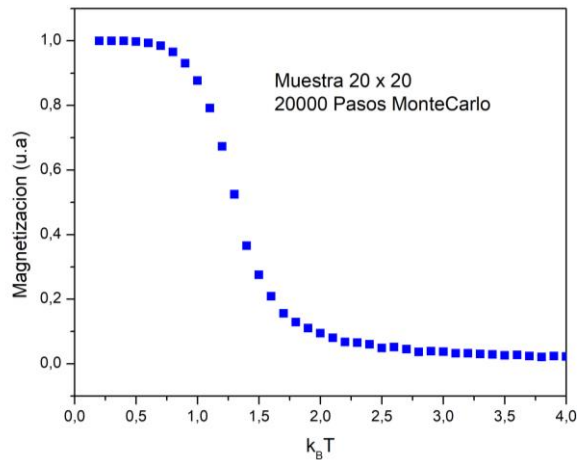


Figura 11 Magnetización con modelo de Ising

Verificado el adecuado comportamiento del modelo de Ising, se procedió a construir el modelo espacial de Heisemberg que, a diferencia del anterior, permite una dirección aleatoria de los espines en el espacio. En la Figura 13 se observan las curvas de relajación para la energía de un sistema de tamaño 4x4x4 cuando no se tiene en cuenta la interacción dipolar. Se debe tener en cuenta que las fluctuaciones siempre van a darse debido a que, incluso a temperaturas bajas, existe la probabilidad de que la dirección del dipolo

magnético pueda pasar de un estado de menor energía a uno de mayor. Se aprecia cómo se alcanzan niveles de estabilidad en tiempos superiores a 8000 pasos Monte Carlo y se considera que realizar 10.000 pasos es suficiente para trabajar en el equilibrio termodinámico.

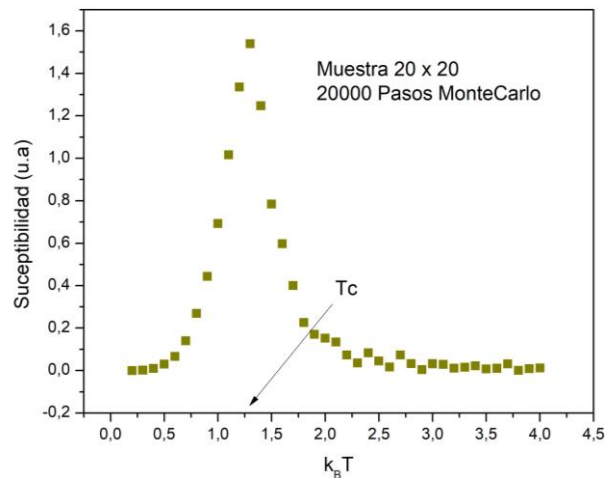


Figura 12 Susceptibilidad con modelo de Ising

De acuerdo con la Figura 14, es importante anotar que las curvas de energía tienden hacia una curva maestra que se corresponde con un sistema en equilibrio termodinámico. El resultado anterior permite concluir que se pueden realizar algunos análisis con 1000 pasos para determinar comportamientos generales de los observables ahorrando tiempo de computo, y dejar para los valores finales las corridas a 10000 pasos.

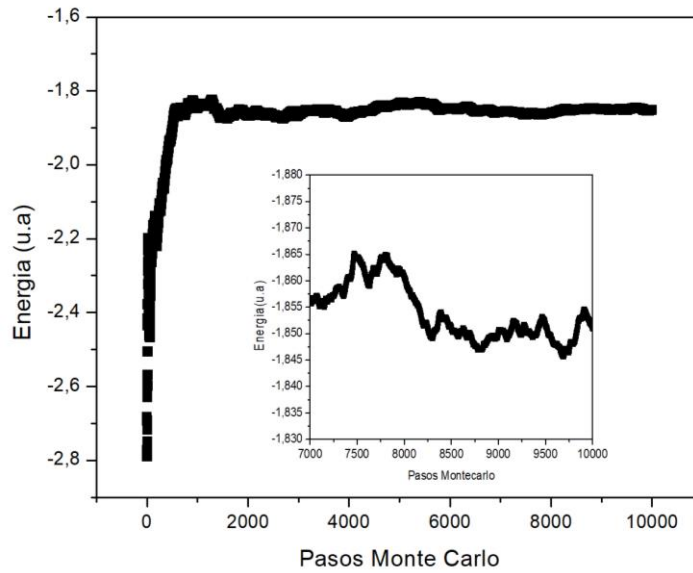


Figura 13 Curva de relajación

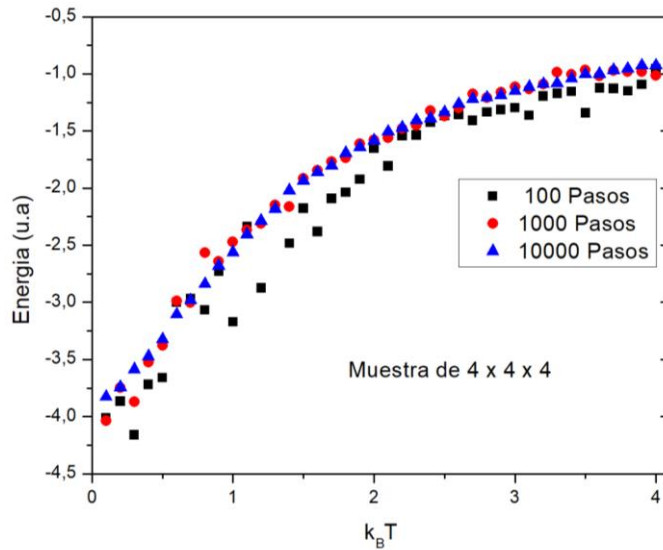


Figura 14 Energía para diferentes pasos de Monte Carlo

En las Figuras 15, 16, 17 se muestran los resultados obtenidos con el modelo de Heisemberg para una muestra de tamaño 20 x 20 x 20 sin tener en cuenta la interacción dipolar, estas curvas se obtuvieron con un J de intercambio igual a 1. Se evidencia el

comportamiento clásico ampliamente reportado para un sistema de este tipo de sistemas, verificando el buen comportamiento del programa.

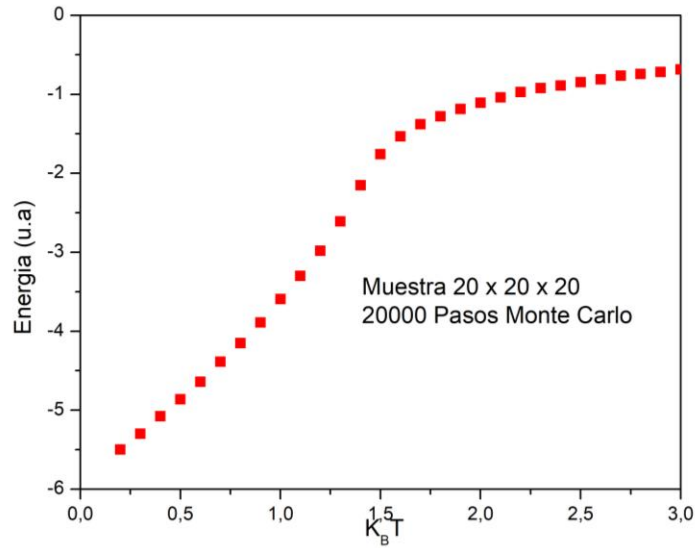


Figura 15 Energía con Heisemberg

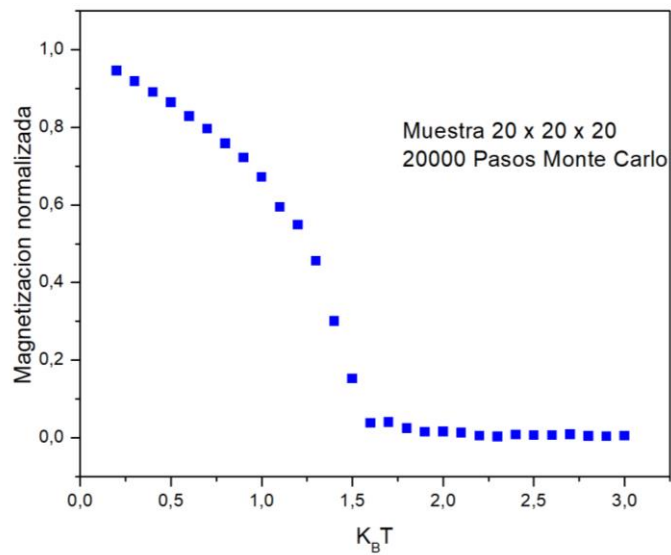


Figura 16 Magnetización con Heisemberg

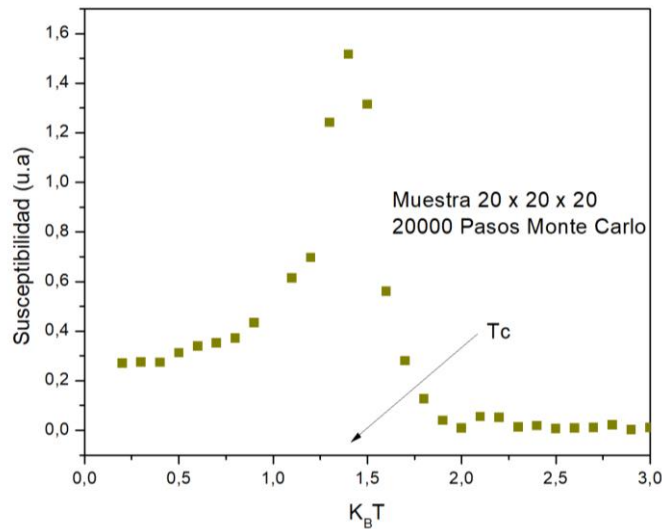


Figura 17 Susceptibilidad con Heisemberg

Se analizaron las variaciones debidas al J de intercambio para una muestra de $12 \times 12 \times 12$ y para 1000 pasos. Los resultados se muestran en la Figura 18. Se observa que al incrementarse el J de intercambio los momentos magnéticos tienden a alinearse con mayor facilidad a altas temperaturas, por lo que la temperatura crítica aumenta con este incremento. A partir de estos análisis se selecciona el valor de $J=1$ para realizar las siguientes simulaciones.

En las figuras 19 y 20 se presentan los resultados obtenidos del análisis de tamaño de la muestra para 1000 pasos Monte Carlo. Se muestran las curvas de susceptibilidad en función de la temperatura y la variación de la temperatura con el recíproco del tamaño. Se identifica un aumento de la T_c con el aumento del tamaño de la muestra, lo cual se puede explicar desde la teoría del escalamiento finito. Estos aumentos están fuertemente ligados a la diferencia de coordinación entre los dipolos de la superficie del material y los dipolos no superficiales, o a efectos relacionados con el peso que tiene la periodicidad de los dipolos en muestras pequeñas y grandes.

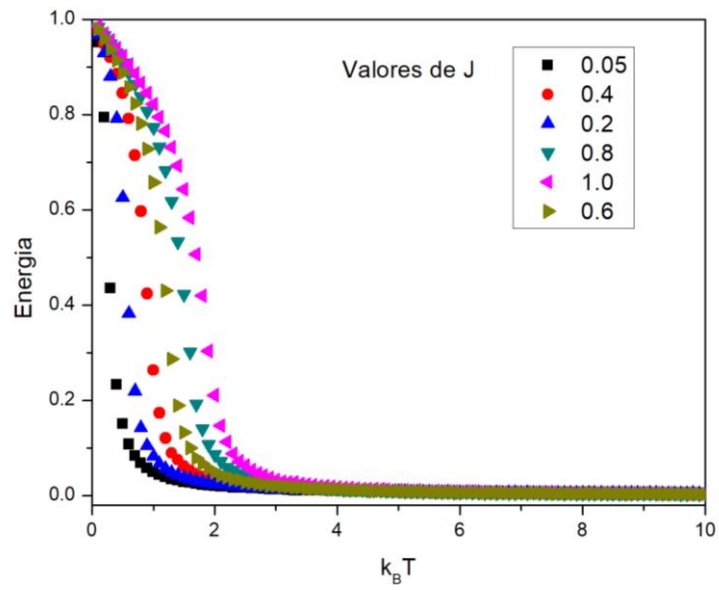


Figura 18 Magnetización variando el J de intercambio

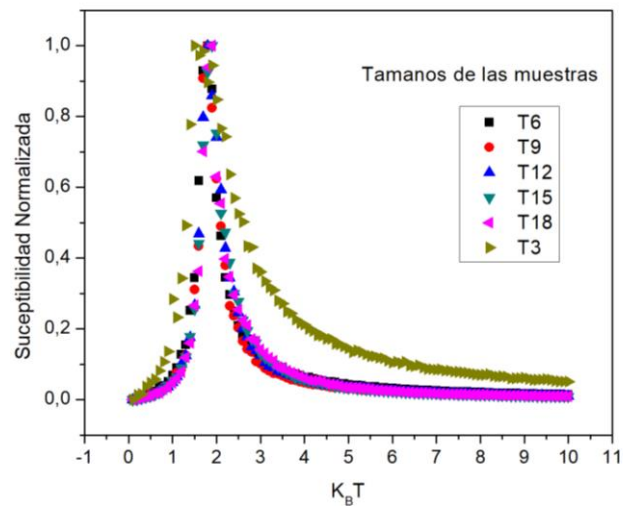


Figura 19 Susceptibilidad con diferentes tamaños de muestras

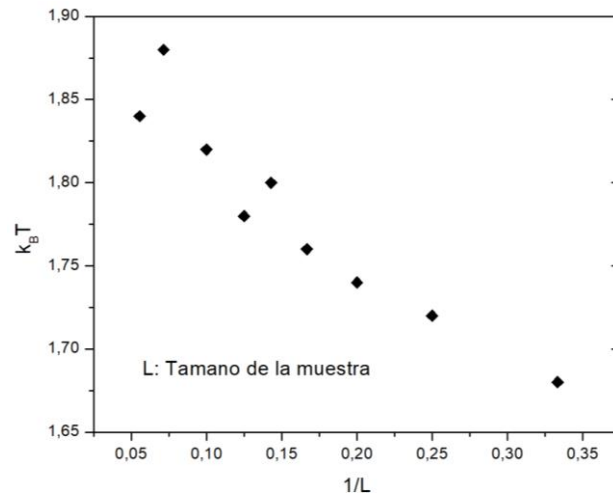


Figura 20 Temperatura con diferentes tamaños de muestras

6.2 Cálculo de los observables físicos incluyendo la interacción dipolar

6.2.1 Mediante sumas de Ewald

Cuando se incluye el término de interacción dipolar en el Hamiltoniano tipo Heisenberg se encuentra que las curvas de relajación sugieren trabajar el método promediando los observables más allá de los 5000 pasos de Monte Carlo, sin embargo se observa que se alcanza la estabilidad termodinámica para valores menores que cuando no se incluyó la interacción dipolar.

Si bien, al incluir el término de interacción dipolar las simulaciones tardan más tiempo, ya que los modelos incluyen operaciones más complejas, estas simulaciones generan la posibilidad de hacer más realista el estudio del fenómeno. A continuación se presentan los resultados obtenidos de los observables físicos incluyendo el término de interacción dipolar.

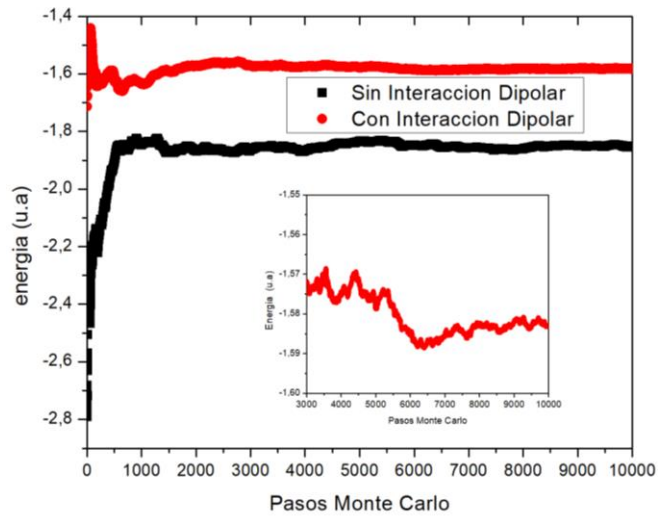


Figura 21 Comparación de las curvas de relajación con y sin interacción dipolar

En las Figuras 22, 23, 24 se presentan algunas curvas de energía, magnetización y susceptibilidad para una muestra de $5 \times 5 \times 5$, con 1000 pasos Montecarlo y variando el valor de g desde 0,010 a 2 para un J de intercambio igual a 1.

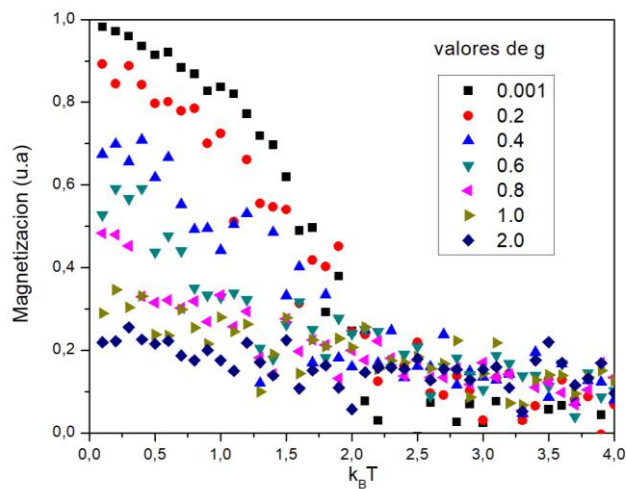


Figura 22 Magnetización variando g

Después de evidenciar el buen comportamiento del programa, se realiza un análisis de la energía, la magnetización y la susceptibilidad para cuatro valores de g con 10000 pasos Monte Carlo, los resultados se presentan en las Figuras 23, 24, 25. Además, en la Figura 28 se muestran los ciclos de histéresis obtenidos para una muestra de tamaño $5 \times 5 \times 5$, con un valor de $g=0.2$ y variando el parámetro J .

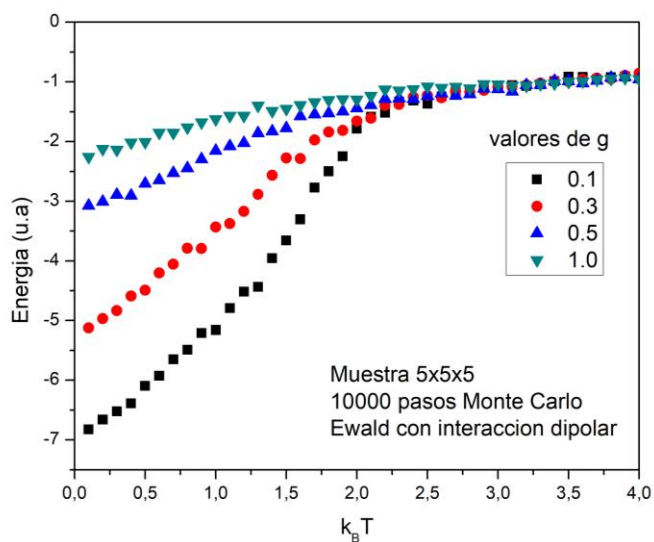


Figura 23 Energía con Diferentes g y Montecarlo 10000, tamaño $5 \times 5 \times 5$

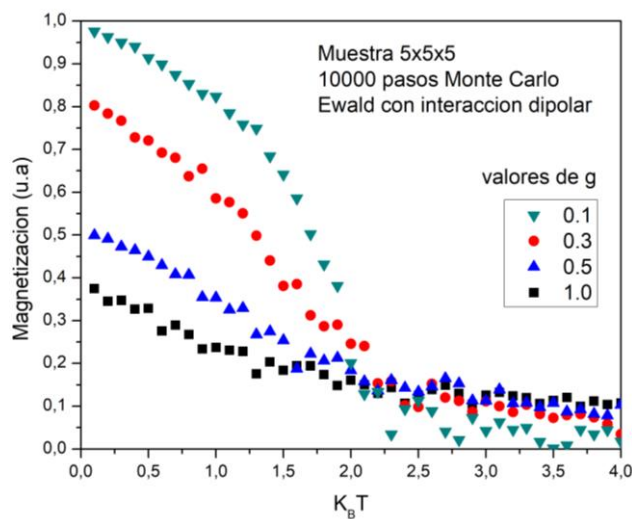


Figura 24 Magnetización con Diferentes g y Montecarlo 10000, tamaño $5 \times 5 \times 5$

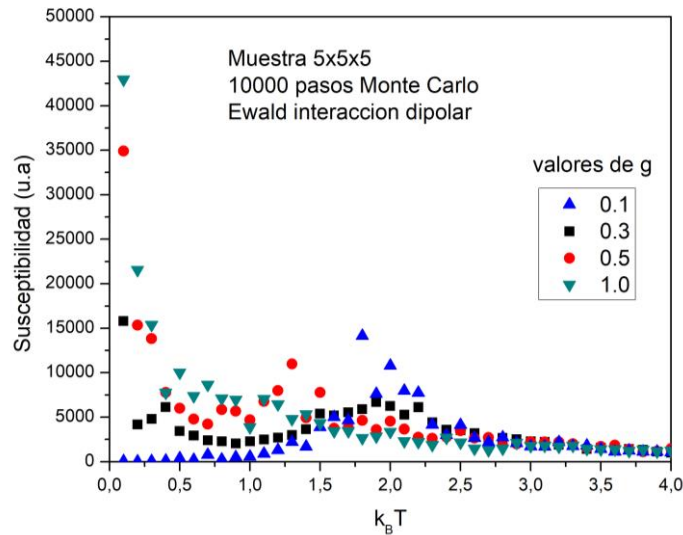


Figura 25 Susceptibilidad con Diferentes g y Montecarlo 10000, tamaño 5*5*5

En las curvas de magnetización (Figura 24) se observa como la interacción dipolar destruye el ordenamiento ferromagnético dando lugar a menores magnetizaciones a bajas temperaturas y al surgimiento de nuevos ordenamientos, donde se conjugan las interacciones de corto y largo alcance de naturaleza FM y AM. En la Figura 26 [39] se observan configuraciones magnéticas experimentales de películas delgadas resultado de una interacción dipolar dominante. En la Figura 27 [3], se aprecia el resultado de simulaciones como las realizadas en este trabajo para películas delgadas de manganitas con fuerte interacción dipolar. Dichas interacciones han sido calculadas por el método de multipolo rápido.

Por otra parte, en las curvas de susceptibilidad (Figura 25) se observa una menor definición de los picos a medida que aumenta la interacción dipolar, lo anterior debido al menor orden ferromagnético que se ocasiona.

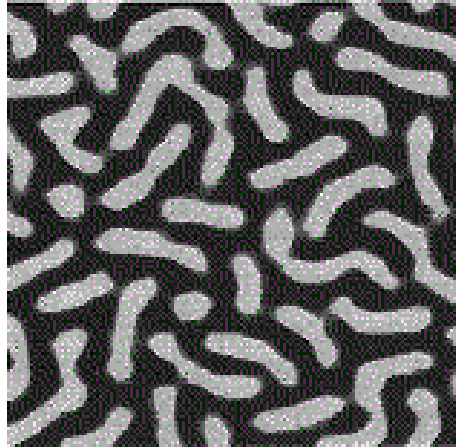


Figura 26 Configuraciones magnéticas experimentales [39]

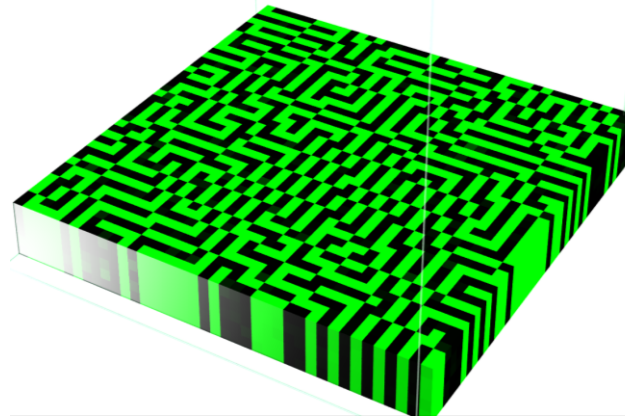


Figura 27 Configuraciones magnéticas simuladas [3]

Con relación a los ciclos de histéresis, se observa en la figura 28 un comportamiento típico de esta clase de ciclos. Al aumentar el campo magnético aumenta la magnetización hasta que el campo alcanza un valor llamado campo coercitivo en el cual la magnetización cambia de signo abruptamente; luego de lo cual la magnetización sigue aumentando de manera suave hasta alcanzar su máximo. Cuando el campo se barre en sentido contrario, la disminución en el campo hace que los dipolos magnéticos vayan perdiendo alineación con este campo de una manera suave. Cuando el campo magnético

externo es cero aún se presenta una magnetización remanente (imanación) debida a la formación de dominios ferromagnéticos en la muestra. Para romper estos dominios es necesario que el campo magnético aplicado siga disminuyendo hasta alcanzar un valor negativo del campo coercitivo para el cual la magnetización se invierte nuevamente formando un ciclo para la magnetización.

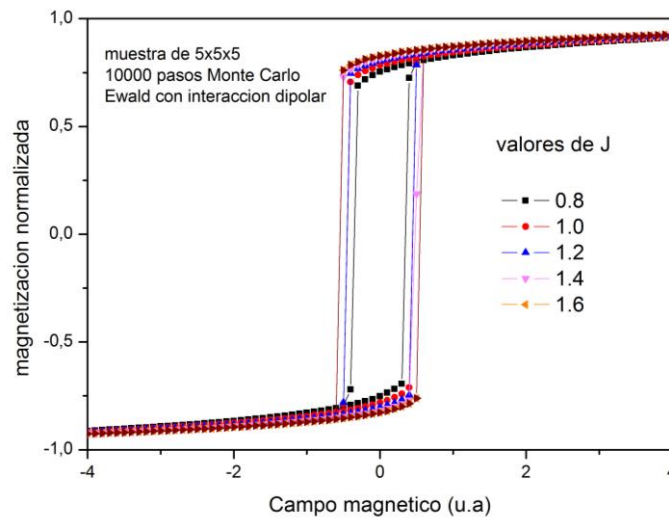


Figura 28 Magnetización vs Campo Magnético

Valores mayores de la constante de intercambio J hacen que la interacción ferromagnética sea más fuerte y por ende sea más difícil romper los dominios en los ciclos de histéresis, lo cual se evidencia en mayores campos coercitivos. Por otra parte, el aumento en el parámetro de interacción dipolar g se traduce en menores valores de magnetización remanente y menores campos coercitivos. En la Figura 28, se observan valores de magnetización relativamente altos debido a un valor bajo del parámetro g ($g=0.2$).

A continuación, se realiza un análisis de los observables físicos en función del tamaño de la muestra. En las Figuras 29 y 30 se muestran las curvas de energía y magnetización para diferentes tamaños de la muestra. Se observan tendencias características esperadas en este tipo de estudios. Por otra parte, a medida que aumentan las dimensiones de la muestra base (sin considerar las réplicas) los efectos de tamaño van disminuyendo hasta que las simulaciones reflejan el comportamiento en bulk del material. Esto puede observarse por el corrimiento de las curvas hacia una curva maestra al aumentar el tamaño.

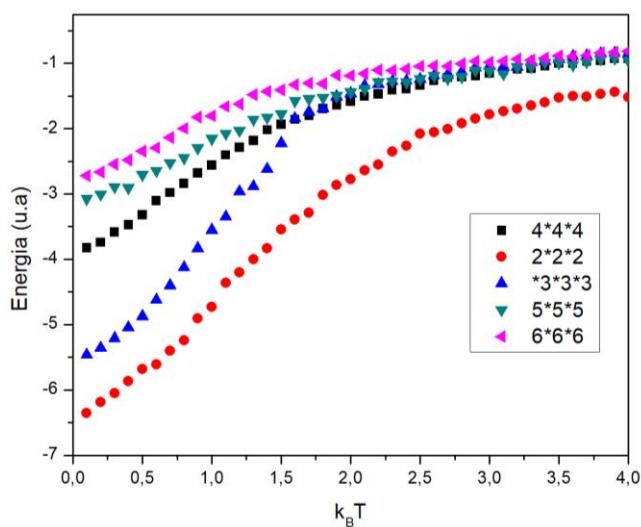


Figura 29 Energía vs tamaño

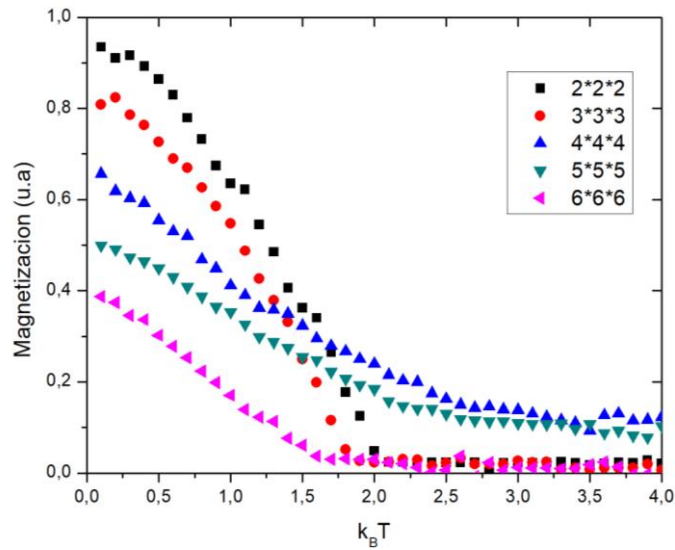


Figura 30 Magnetización vs tamaño

6.2.2 Mediante radios de corte

Una primera aproximación al cálculo de la energía de interacción dipolar es el uso de un radio de corte para la sumatoria (sumas directas). En este caso la serie empleada es de lenta convergencia y el uso de dichos radios de corte puede dar lugar a la aparición de momentos magnéticos inexistentes en la frontera de dicho radio de corte; lo cual, puede llevar a resultados y a comportamientos no realistas o artificiales. La limitante para utilizar radios de corte más grandes es, como ya se había mencionado, el tiempo de cómputo requerido.

Se realizaron los cálculos para muestras de diferentes tamaños mediante las sumas totales empleando radios de corte. En la Tabla 2 se presentan los valores del tiempo necesario para obtener la energía de dos muestras ($4 \times 4 \times 4$ y $8 \times 8 \times 8$) con 1000 pasos Monte Carlo en un rango de temperaturas de 0 a 4. En la Figura 31 se observa como a medida

que aumenta el tamaño de la muestra los tiempos se hacen cada vez mayores aumentando en forma exponencial para los mismos radios de corte.

Tabla 2 Tiempo en horas de cómputo para diferentes radios de Corte

Radios de corte	Tiempo (h)	Tiempo (h)
	Muestra 4X4X4	Muestra 8x8x8
1	0,04333	0,09556
2	0,06889	0,32222
3	0,14778	0,96667
4	0,26889	1,94444
5	0,50222	3,73333
6	0,86667	6,52222
7	1,33333	10
8	1,97778	15,14444
9	2,87778	23,94444
10	3,91111	35,45556
11	5,28889	50,68889
12	6,91111	65,23333
15	14,12222	190,32222
16	18,63333	
17	21,87778	
20	39,47778	
25	110,16667	
28	153,43333	

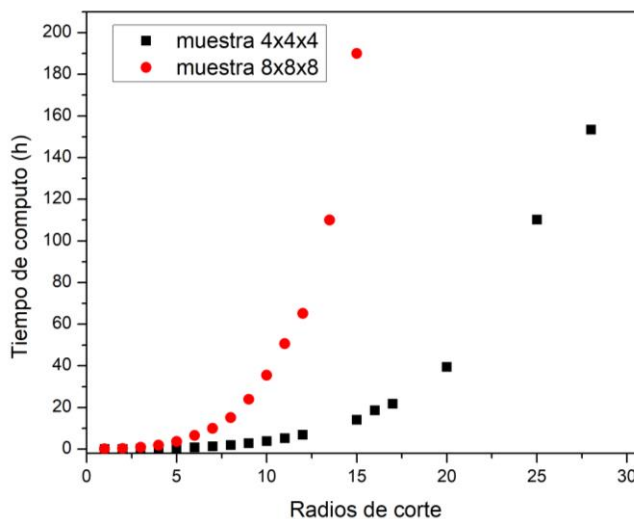


Figura 31 Tiempos de cómputo vs Radios de Corte

En la Figura 32 se muestran curvas de energía de interacción dipolar vs temperatura para diferentes radios de corte. Si bien los valores a radios mayores que 2 son cercanos, no se observa convergencia en los resultados para los radios elegidos. Por otra parte, los tiempos computacionales se tornan cada vez más prohibitivos conforme aumente dicho radio.

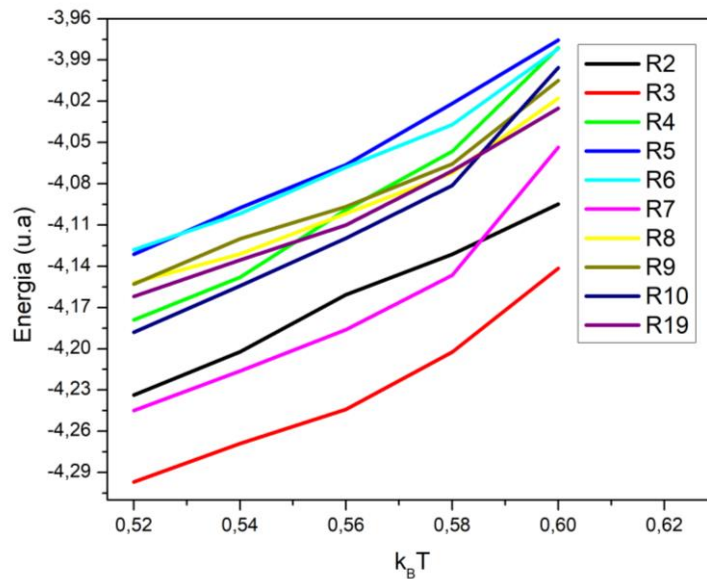


Figura 32 de energía de interacción dipolar vs temperatura para diferentes radios de corte

6.3 Resultados de comparación de tiempos

En esta sección, se presentan los resultados de la optimización del código, proceso realizado con el objetivo de bajar los tiempos de ejecución. En primer lugar se realizó una revisión detallada de cada porción del código, especialmente en los lugares donde se almacenan y se procesan la mayor cantidad de datos, con el fin de reducir el consumo de tiempo.

Se realizaron varias pruebas para identificar los fragmentos donde se consumía más tiempo de procesamiento; se obtuvo como resultado el archivo de posiciones finales donde se definió que no era necesario guardar todas las configuraciones sino las de bajas temperaturas, en las cuales el sistema se estabiliza en configuraciones FM, AF o

combinaciones entre estas dos. Se decide guardar las configuraciones finales de las temperaturas de 0.5 a 0.1. Por otro lado el archivo de relajación también tomaba demasiado tiempo, ya que se guardaba información por cada paso de Monte Carlo y teniendo en cuenta que las corridas se realizaban con 10000 pasos, eran 10000 veces las que tenía que ir al disco a escribir. Por tanto, después de realizar el estudio de relajación, e identificar la cantidad de pasos de Monte Carlo necesarios para la estabilidad termodinámica, este archivo se dejó de crear.

Otro aspecto importante en la optimización del algoritmo puede verse en la Figura 33, que muestra un fragmento del código inicial donde se tenían 5 ciclos anidados que computacionalmente se convertían en altos costos de ejecución. Suponiendo que se tiene una muestra de tamaño $5*5*5$, la variable *nion* tendría un valor de 375, lo que significa que los dos primeros ciclos se ejecutarían 140.625 veces para poder ir a los cálculos subsiguientes que se ejecutan 1000 veces. Es decir este fragmento del programa se ejecutaría en total 140.625.000 veces, lo que genera un gran consumo de memoria y de tiempo de procesamiento. Para evitar este proceso que consume tiempo de ejecución se decide partir el código como se puede observar en las Figuras 34 y 35.

En la Figura 34 se crea una matriz para almacenar los cálculos realizados en los dos primeros ciclos, de tal manera que en las siguientes iteraciones no se tengan que volver a calcular estos valores, sino consultar los datos almacenados en una matriz. Lo anterior, optimiza el proceso de cálculo y por ende el tiempo de ejecución. Los ciclos 3,4,5 de la Figura 33 son transformados en un solo ciclo, tal como se muestra en la Figura 34, en el cual es posible recorrer una matriz tridimensional con un solo ciclo. Después de tener la

menor cantidad de ciclos anidados, se procede a realizar los procesos de paralelización que consistieron básicamente en dividir los procesos y gestionar el envío de cada iteración a un hilo que este libre, de esta manera se ejecutaron varias iteraciones al tiempo.

```
1 do a = 1, nion
  2 do b = 1, nion
    !CONSULTA DATOS Y REALIZA OPERACIONES
    3 do i = -mmm1, mmm1
      4 do j = -mmm2, mmm2
        5 do k = -mmm3, mmm3
          if (xxxx) then
            !CALCULO PARTE REAL
          endif
        enddo
      enddo
    enddo
  enddo
enddo
```

Figura 33 Código sin optimizar

```
do b = 1, nion**2
  1 !RECORRE UNA MATRIZ
  !BIDIMENSIONAL, REALIZA
  2 !CALCULOS Y LOS GUARDA
  !EN OTRA MATRIZ
enddo |
```

Figura 34, Código optimizado

En la Figura 35 se puede observar como se paralelizaron los fragmentos de código, identificando las variables compartidas y las libres. Este proceso de optimización y

paralelización se realizó con cada uno de los fragmentos del código y es solo una muestra de la función donde se calculan las sumas de Ewald.

```
do iter = 1, (var**3*nion**2)
3 4 !RECORRE MATRIZ TRIDIMENSIONAL
5 4 !CALCULA PARTE REAL DE LA SUMA
enddo|
```

Figura 35, Código optimizado

En la Tabla 3 (figura 36) se muestra cómo cambia el tiempo de ejecución en segundos para una muestra de tamaño 4*4*4, con 40 temperaturas y 1000 pasos de Monte Carlo con corte en 800 y un g de 0.5, por métodos diferentes. Se analiza un radio de corte de 18 para el cual el tiempo de cómputo es similar al tiempo necesario por sumas de Ewald con código optimizado. Se debe tener en cuenta que aunque los tiempos son similares los radios de corte son un método aproximado mientras las sumas de Ewald son el método exacto. Cuando se realizan paralelizaciones el código con Ewald los tiempos disminuyen pasando de 197.600 segundos a 38.400 segundos.

Tabla 3 Comparación de tiempos

Método	Tiempo Segundos
Interacción dipolar con radio de corte de 18	~98.000
Interacción Dipolar con Ewald con todos los DO	197.600
Interacción Dipolar con Ewald minimizando DO	96.000
Interacción Dipolar con Ewald Paralelizado OPENMP	47.200
Interacción Dipolar con Ewald Paralelizado Gpu OPENACC	38.400

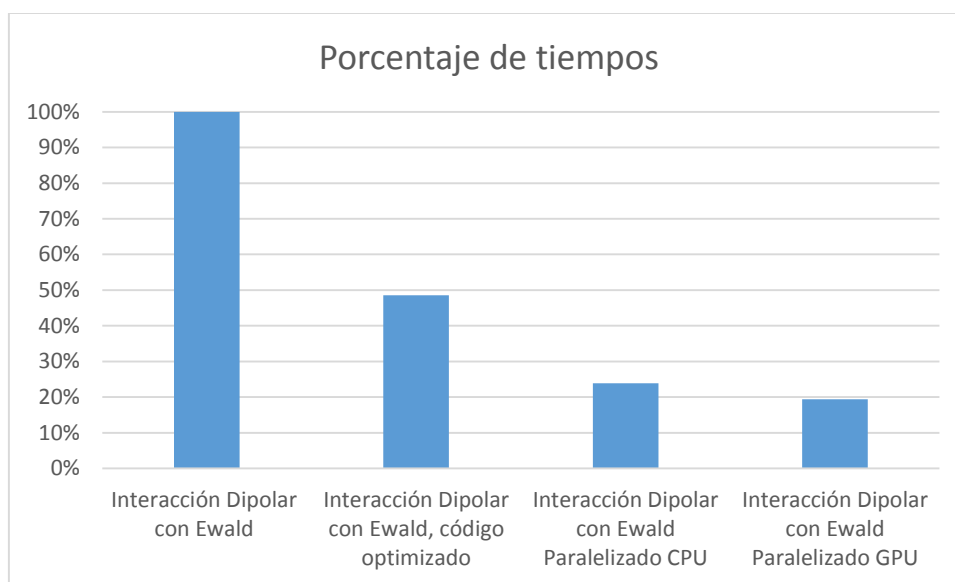


Figura 36 Tiempo de ejecución vs tamaño de la muestra paralelizado

En la Tabla 1, de la sección de metodología, se puede observar la configuración de cada uno de los equipos de cómputo usados para obtener resultados del programa, es de

anotar que para las mediciones de tiempo solo se trabajaron sobre 3 equipos, el servidor Gaia (UAM) y el clúster South Green, bajo el servidor maestro Bioinfomaster.ird.fr nodo 13 para medir tiempos de ejecución a nivel CPU y Laboratorio realidad Virtual (UAM) para medir tiempo de procesamiento utilizando GPU. En la Tabla 4 puede observarse los tiempos de procesamiento para diferentes tamaños de muestra en los dos equipos de cómputo elegidos para estas comparaciones. Es de aclarar que se decidió trabajar con estos dos equipos porque eran los que tenían las configuraciones más similares, además de ser los equipos en los que el acceso para trabajar era menos restringido en cuanto a disponibilidad.

Tabla 4 Comparación de tiempos en servidores

Tamaño de la muestra	Servidor ubicado en Francia				Servidor Gaia ubicado en la UAM			
	2*2*2	3*3*3	4*4*4	5*5*5	2*2*2	3*3*3	4*4*4	5*5*5
Tiempo de ejecución en segundos	2.353	24.705	298,777	1128,465	2.378	26.095	118,759	569,72
	2.282	54.719	132,148	1129,455	2.377	26.462	118,22	569,341
	2.283	25.441	135,375	1155,594	2.382	26.949	118,201	557,605
	5.013	41.562	299,136	499,21	2.373	26.114	118,255	558,108
	4.854	53.552	131,869	1148,198	2.376	26.117	118,36	557,797
	2.312	25	134,045	499,75	2.379	26.131	118,146	558,212
	2.232	39.628	298,949	499,669	2.380	26.126	118,115	558,296
	2.315	24.584	192,124	1131,729	2.376	26.120	118,544	557,133
	2.277	21.603	132,136	509,696	2.424	26.119	118,969	559,256
	2.246	41.099	298,46	502,497	2.375	26.176	118,032	560,42
Promedio	2.817	32.692	205,3019	820,4263	2.382	26.241	118,3601	560,5888
Desviación estándar	1,117	12,559	82,481	335,592	0,015	0,271	0,304	4,801

Para este experimento se ejecutó cada tamaño de muestra 10 veces y en cada uno de los servidores, con el fin de determinar la reproducibilidad y la confiabilidad en los tiempos obtenidos. Como se observa en la Figura 37 el tiempo de ejecución en el servidor Gaia ubicado en la Universidad Autónoma de Manizales es aproximadamente 32% más rápido en ejecución que el Bioinfomaster.ird.fr ubicado en Europa, País Francia. Esta

diferencia se podría explicar por la cantidad de Cores de cada equipo, pero es importante resaltar que el momento de la ejecución los Cores utilizados en el servidor Gaia eran restringidos a 12 para que estuvieran en igualdad de condiciones. El tamaño de la memoria Ram tampoco es una causa debido a que el programa consume solo 1024 MB (Figura 40), un tamaño muy inferior al de la configuración de los equipos.

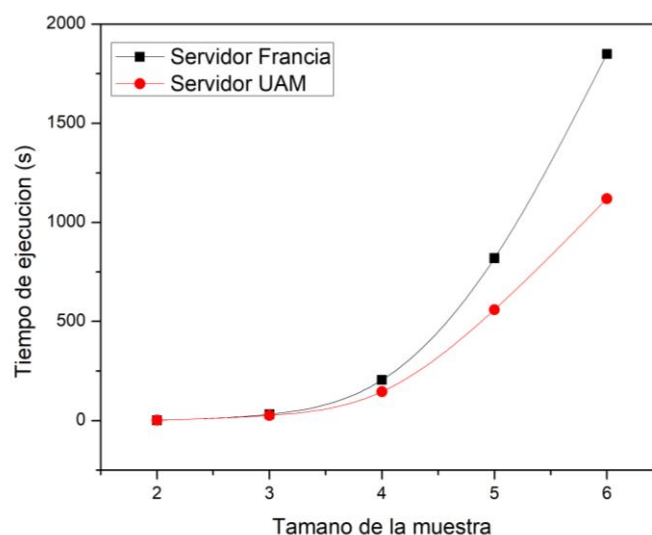


Figura 37 Tiempo de ejecución en servidores

El Clúster de South Green (<https://bioinfo.ird.fr/>) para realizar el proceso de escritura de resultados utiliza la tecnología NAS (Network Attached Storage), que significa almacenamiento en red, dedicada a compartir la capacidad de almacenamiento entre los servidores que componen el clúster a través de una red. Esta tecnología altera el tiempo de procesamiento en comparación con el servidor de la UAM, en el que su proceso de escritura es interno y no tiene que viajar por la red, lo que se constituye en una posible causa en las diferencias de tiempo de procesamiento.

En la Tabla 5 se puede observar como el tiempo de ejecución va disminuyendo a medida que se incrementan el número de cores, pero llega un momento donde el tiempo se estabiliza e independientemente de la cantidad de cores usados, el tiempo ya no disminuirá y será sostenido, lo que permitió elegir como número indicado de cores para trabajar el 10. Este experimento se realizó en el computador Gaia, repitiendo cada ejecución 10 veces para de esta manera obtener una desviación estándar confiable.

Tabla 5 Tiempo de ejecución por Core

Tiempo (en segundos) de ejecución por Número de Cores								
	Sequential Seuencial (1 Core)	2	4	6	8	10	12	16
Tiempo de ejecución (Segundos)	240.038	219.096	150.535	141.403	131.490	118.360	118.952	119.138
	240.125	219.948	150.438	141.425	131.659	118.280	118.983	119.095
	240.095	219.845	150.587	141.000	131.590	118.361	118.972	119.110
	240.128	219.800	150.421	141.356	131.458	118.425	118.993	119.010
	240.222	219.985	150.395	141.378	131.549	118.263	118.923	119.025
	240.120	219.984	150.478	141.325	131.643	118.364	118.941	119.125
	240.048	219.905	150.532	141.501	131.489	118.398	118.884	119.142
	240.225	219.000	150.463	141.478	131.542	118.355	118.942	119.133
	240.100	219.892	150.389	141.381	131.568	118.302	118.872	119.098
	240.119	219.803	150.502	141.429	131.656	118.300	118.962	119.102
Promedio	240.122	219.726	150.474	141.368	131.564	118.341	118.942	119.098
Desviación estandar	0,062	0,364	0,065	0,14	0,073	0,039	0,04	0,046

La forma de construcción de la Figura 38 fue mediante el cálculo de aceleraciones, el cual consiste en dividir el tiempo de ejecución obtenido mediante el uso de una estrategia paralela para los diferentes números de núcleos, y el tiempo de ejecución obtenido mediante una estrategia secuencial. Se obtiene como resultado la identificación de la cantidad máxima de Cores utilizados para este programa es de 10, ya que es en este valor donde se estabiliza la aceleración y los cambios en tiempo de ejecución ya no son significativos.

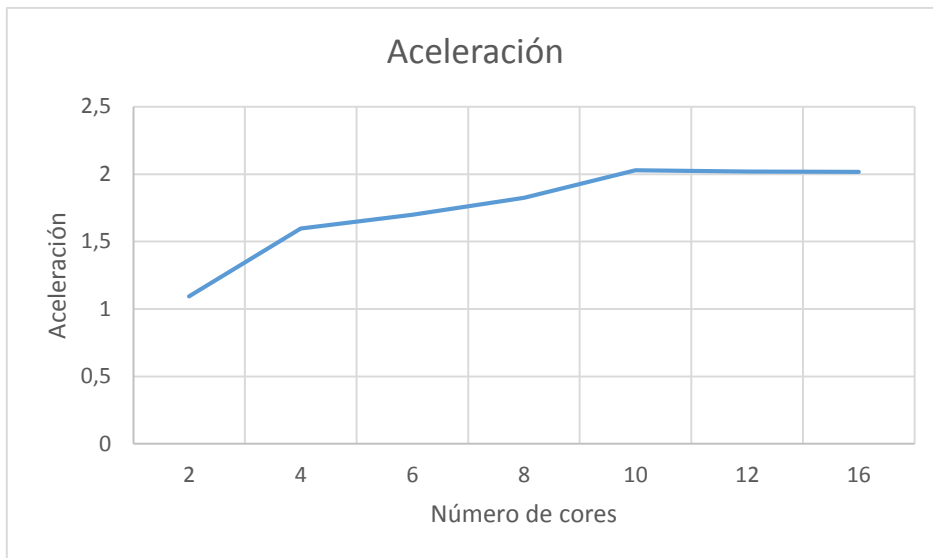


Figura 38 Aceleración de los cores

En la Figura 39 se muestra como la aceleración se duplica reduciendo tiempo de ejecución en un 50 %. Por otra parte, en la Figura 40, se evidencia la variación de los cores y el consumo de memoria.

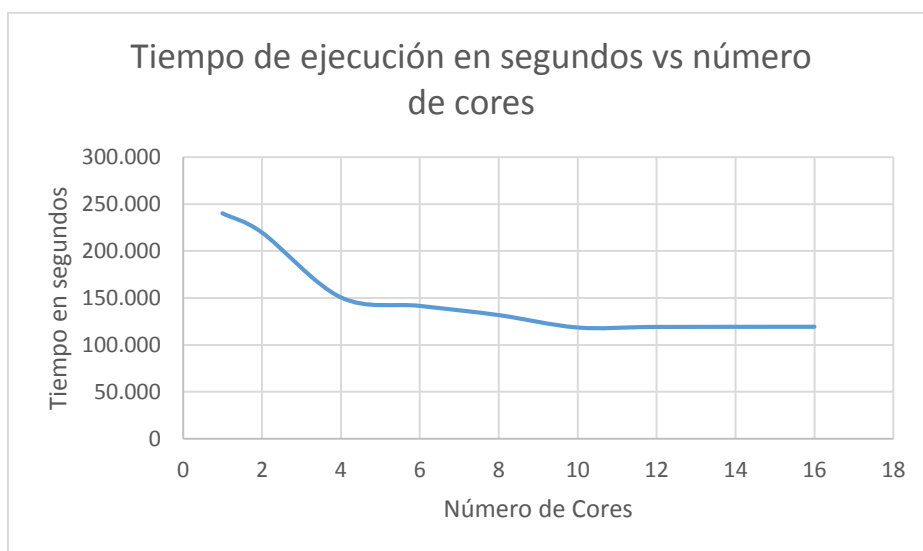


Figura 39 Tiempo de ejecución vs número de cores

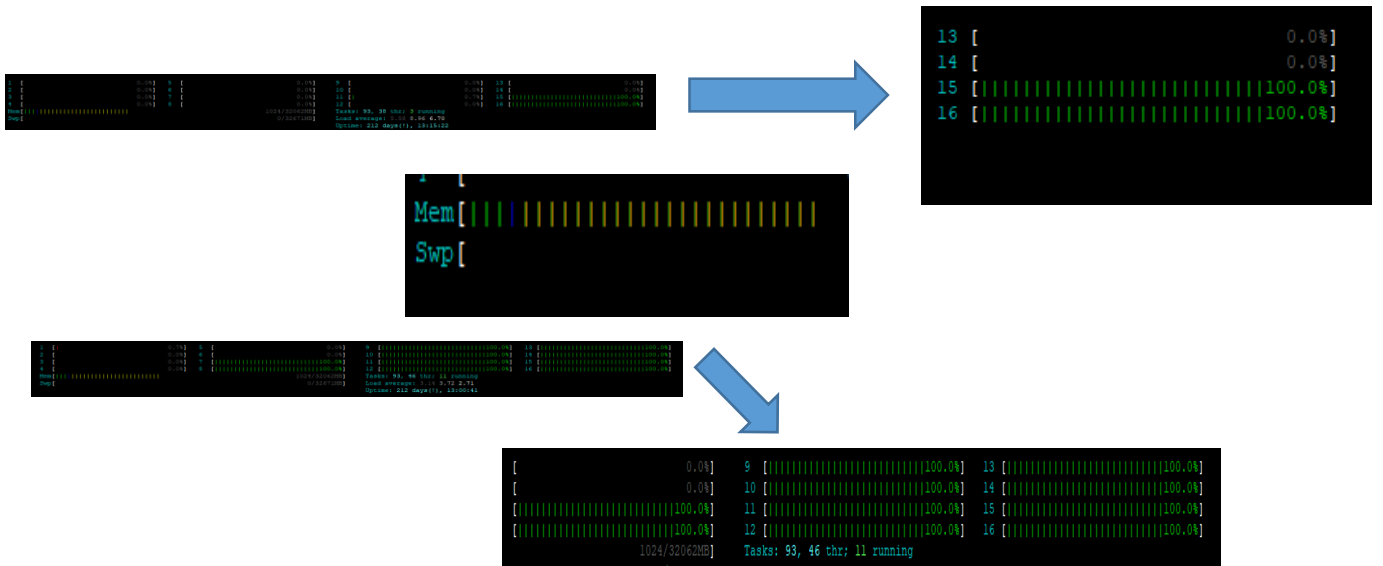


Figura 40 Variación de Cores y consumo de memoria

En la Figura 41 se puede observar el tiempo de ejecución en segundos de muestras de diferentes tamaños paralelizados a nivel CPU y GPU, se concluye que la diferencia entre los tiempos de ejecución de estos de estas dos técnicas es del 20%, con un valor mayor para CPU.

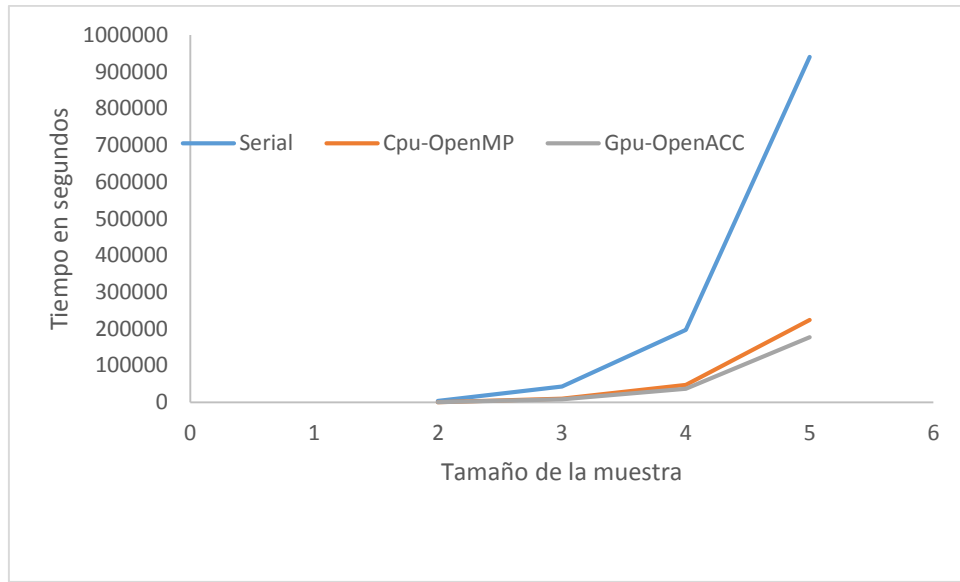


Figura 41 CPU Vs GPU

En la Figura 42 se puede observar como los resultados no cambian al implementar las estrategias de paralelización, dado que al realizar cada cambio, los observables fueron comparados de manera que no se alteraran el correcto funcionamiento de los algoritmos sino el tiempo de ejecución.

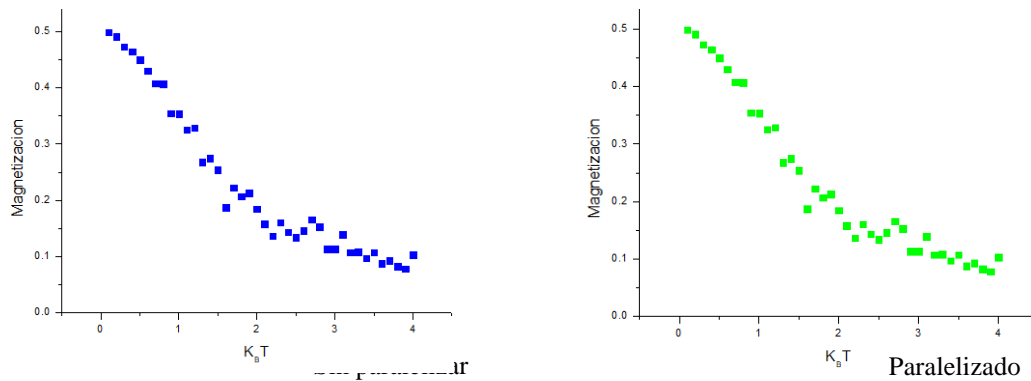


Figura 42 Comparación resultados con Ewald sin paralelizar y paralelizado.

7 CONCLUSIONES

Se ha encontrado que las sumas de Ewald planteadas en este trabajo para el cálculo de las interacciones de largo alcance son un método efectivo en relación con el tiempo de convergencia, el cual disminuye a medida que se realizan procesos de paralelización en los códigos de programación.

De otra parte, es necesario darle más peso a la interacción dipolar dentro de las simulaciones Monte Carlo para evidenciar cambios significativos en los observables físicos como se espera de acuerdo con resultados experimentales.

La metodología usada fue una decisión importante la cual permitió realizar un desarrollo de la simulación ordenado y claro, además de avanzar de manera segura al poder verificar por cada prototipo los resultados.

El lenguaje de Programación usado ha sido fortran el cual por ser un lenguaje de alto nivel, procedimental e imperativo, permite un buen desempeño en el momento de realizar cálculos números, ayudando esto a un mejor desempeño en el desarrollo de la simulación.

Se implementaron modelos computacionales para el cálculo de interacciones magnéticas de corto y largo alcance en nanoestructuras periódicas empleando un Hamiltoniano tipo Heisemberg con el método Monte Carlo junto con el algoritmo Metropolis.

Se desarrollaron algoritmos para el cálculo de la interacción dipolar magnética mediante los modelos de sumas directas y sumas de Ewald.

El modelo planteado puede ser usado para simular el comportamiento magnético de nanoestructura de manganitas tipo perovskita dada la concordancia entre la geometría cúbica del modelo y la geometría cristalina de estos materiales para ciertos niveles de dopaje.

Los observables obtenidos a partir de los modelos propuestos: energía, magnetización, susceptibilidad y ciclos de histéresis reproducen comportamientos teóricos y experimentales reportados en la literatura para el tipo de materiales propuestos.

Todo modelo que pretenda explicar el comportamiento magnético de este tipo de materiales debe incluir el término de interacción dipolar, puesto que es un efecto presente a bajos niveles de dopaje que puede dar lugar a fenómenos y a propiedades importantes. No debe olvidarse que el fenómeno de la interacción dipolar es de largo alcance y por tanto puede generar campos significativos al trabajar con muestras de gran tamaño (infinitas).

El cálculo de la interacción dipolar mediante la sumas de Ewald conlleva a costos computacionales elevados, sin embargo, es posible reducir los tiempos de manera considerable mediante procedimientos de optimización de código, consumo de memoria, almacenamiento de información y paralelización.

Los códigos que transformaron los ciclos Do...While anidados en ciclos más simples lograron una reducción de tiempo alrededor de un 50% mediante código limpio,

optimización y reducción de almacenamiento. El tiempo del paso anterior se pudo reducir en un 50% más, mediante métodos de paralelización con CPU encontrando el máximo número de core en el cual se obtiene la mayor reducción de tiempo. Finalmente se reduce en un 20% más el valor anterior empleando técnicas de paralelización a nivel GPU. Gracias a estas mejoras se obtiene una reducción de la quinta parte del tiempo comparado con el inicial.

El uso del código optimizado, depurado y paralelizado en este trabajo es significativo, debido a que puede permitir el estudio de muestras de mayor tamaño, variando sus configuraciones con menores tiempos de ejecución.

8 TRABAJOS FUTUROS Y SOCIALIZACIÓN DE RESULTADOS

8.1 Trabajos futuros

Como trabajo futuro se podría optimizar más el código para que al ser paralelizado a nivel GPU se tenga una mayor disminución en el tiempo de ejecución, esto podría realizarse con plataformas de paralelización más avanzadas como son CUDA o con modelos que permitan la ejecución del código en varios nodos de un Cluster, los cuales se componen de varias máquinas independientes conectadas por una red.

También se puede explorar el modelo genérico aquí desarrollado en la simulación de las propiedades magnéticas de una manganita en particular ajustando parámetros como temperatura crítica, nivel dopaje y valores del parámetro de red.

Desde el punto de vista computacional, se sugiere formalizar aún más el usos de librerías y plataformas de computación en paralelo para optimizar este tipo de simulaciones, haciendo código más granular y utilizando

8.2 Socialización de resultados

Con los resultados de este trabajo se realizó una ponencia en Las *XVII jornadas de Ingeniería Liderazgo + Emprendimiento* realizadas en la universidad de Caldas del 11 al 13 de septiembre de 2018.

Se encuentra en escritura un artículo de investigación con los resultados de este trabajo, el cual se espera enviar a revista indexada en el mes de noviembre del presente.

Se ha realizado la creación de un semillero de investigación en modelamiento y simulación de materiales en el grupo de investigación en física y matemática de la UAM, al cual pertenecen 4 estudiantes de diferentes programas de la Universidad.

9 REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] C. P. Poole and F. J. Owens, *Introducción a la nanotecnología*. Editorial Reverté, 2007.
- [2] N. Pebet, “Resonancia Nuclear Magnética,” *XIII Semin. Ing. Biomédica 2004*, 2004.
- [3] H. H. Ortiz Álvarez, “Propiedades magnéticas y ferroeléctricas de nanocompuestos con estructura perovskita $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ y $\text{Pb}(\text{Zr}_x\text{Ti}_{1-x})\text{O}_3$: Simulación Monte Carlo,” 2016.
- [4] A. H. Grande, “Nanotecnología y nanopartículas magnéticas: La física actual en lucha contra la enfermedad,” *Rev.R.Acad.Cienc.Exact.Fís.Nat. (Esp)*, vol. 101, pp. 321–327, 2007.
- [5] J. L. Rodríguez and G. López, *La nanociencia y la nanotecnología: una revolución en curso*, vol. 14, no. 29. Facultad Latinoamericana de Ciencias Sociales, Sede Académica de México, 2007.
- [6] G. H. Jonker and J. H. Van Santen, “Ferromagnetic compounds of manganese with perovskite structure,” *Physica*, vol. 16, no. 3, pp. 337–349, Mar. 1950.
- [7] C. Zener, “Interaction between the d -Shells in the Transition Metals. II. Ferromagnetic Compounds of Manganese with Perovskite Structure,” *Phys. Rev.*, vol. 82, no. 3, pp. 403–405, May 1951.
- [8] E. O. Wollan and W. C. Koehler, “Neutron Diffraction Study of the Magnetic

Properties of the Series of Perovskite-Type Compounds $[(1-x)\text{La}, x\text{Ca}]\text{MnO}_3$,” *Phys. Rev.*, vol. 100, no. 2, pp. 545–563, Oct. 1955.

- [9] L. M. Wang, H. H. Sung, B. T. Su, H. C. Yang, and H. E. Horng, “Growth of ferromagnetic $\text{Nd}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ films with an off-axis sputtering configuration,” *J. Appl. Phys.*, vol. 88, no. 7, p. 4236, 2000.
- [10] E. Restrepo parra, “Simulación Monte Carlo de propiedades magnéticas y de transporte en sistemas de superredes del tipo (FM/AFM)_N,” Universidad Nacional de Colombia Sede Manizales, 2010.
- [11] G. Hernández Orozco, J. J. F. Olaya, J. Jairo, and E. Restrepo Parra, “Fundamentos de simulación de materiales por medio del método de Monte Carlo,” *Av. Investig. en Ing. ISSN-e 1794-4953, Vol. 11, N°. 1, 2014, págs. 100-110*, vol. 11, no. 1, pp. 100–110, 2014.
- [12] J. D. Agudelo Giraldo, “Modelamiento y Simulación de Nanoestructuras Magnéticas Granulares,” Universidad Nacional de Colombia, 2018.
- [13] G. Ruiz López, “Física estadística de fluidos con potenciales efectivos dependientes del estado termodinámico.,” 2006.
- [14] P. A. Giménez Molinel, “Transiciones de fase en sistemas nucleares finitos e infinitos,” Universidad de Buenos Aires, 2014.
- [15] N. L. Gorn, D. V. Berkov, P. Görnert, and D. Stock, “Comparison of the Fast Multipole and Ewald methods for the evaluation of the magnetodipolar field in

- disordered systems,” *J. Magn. Magn. Mater.*, vol. 310, no. 2, pp. 2829–2831, Mar. 2007.
- [16] A. Bródka, “Ewald type summations of Coulomb interactions in computer simulations of a system with one-dimensional periodic boundary conditions,” *J. Mol. Struct.*, vol. 704, no. 1–3, pp. 101–105, Oct. 2004.
- [17] J. M. M. Montes, “José Manuel Menéndez Montes,” 2002.
- [18] N.J. Juretschke and H.K. Wagenfeld, “Evaluation of optical and electrostatic lattice potentials,” p. 253, 1985.
- [19] J. López, L. Benjamín, and I. Tandi, “Tensión Superficial del Acetonitrilo,” 2015.
- [20] P. E. Smith and B. M. Pettitt, “Efficient Ewald electrostatic calculations for large systems,” *Comput. Phys. Commun.*, vol. 91, no. 1–3, pp. 339–344, Sep. 1995.
- [21] J. Kolafa and J. W. Perram, “Cutoff Errors in the Ewald Summation Formulae for Point Charge Systems,” *Mol. Simul.*, vol. 9, no. 5, pp. 351–368, Jan. 1992.
- [22] C. Kittel, J. Aguilar Peris, and J. de la. Rubia Pacheco, *Introducción a la física del estado sólido*. Reverté, 1995.
- [23] M. González, “Interacción dipolo-dipolo | La Guía de Química.” [Online]. Available: <https://quimica.laguia2000.com/general/interaccion-dipolo-dipolo>. [Accessed: 07-Oct-2019].
- [24] E. Picón, “Una comparación Monte Carlo de tres métodos métricos de

- segmentación con análisis conjunto,” *Red Rev. Científicas América Lat. y el Caribe, España y Port.*, vol. 25, no. 2, 2004.
- [25] J.-C. Walter and G. T. Barkema, “An introduction to Monte Carlo methods,” *Phys. A Stat. Mech. its Appl.*, vol. 418, pp. 78–87, Jan. 2015.
- [26] D. B. Hitchcock, “A History of the Metropolis–Hastings Algorithm,” *Am. Stat.*, vol. 57, no. 4, pp. 254–257, Nov. 2003.
- [27] F. T. Gratton, “Introducción a la Mecánica Estadística.” Buenos Aires, 2002.
- [28] J. W. Gibbs, *Elementary principles in statistical mechanics*. 1902.
- [29] S. Chib and E. Greenberg, “Understanding the Metropolis-Hastings Algorithm,” *Am. Stat.*, vol. 49, no. 4, pp. 327–335, Nov. 1995.
- [30] M. E. J. Newman and G. T. Barkema, “Monte Carlo Methods in Statistical Physics chapter 1-4,” 1999.
- [31] R. Marrero Gómez, “Estudio del comportamiento del algoritmo Metropolis-hastings en función del número de espines que se voltean en el modelo de Ising.” Uned, 2017.
- [32] E. Dagotto, *Nanoscale Phase Separation and Colossal Magnetoresistance*. Springer- Verlag. 2002.
- [33] V. J. Van, *The theory of electric and magnetic susceptibilities*. 1932.
- [34] I. Betancourt and M. E. Amano, “Síntesis, estructura y propiedades magnéticas de

manganitas $\text{La}_{0.80}(\text{Ag}_{1-x}\text{Srx})_{0.20}\text{MnO}_3$ ($x = 0.00 - 1.00$),” *Síntesis, Estruct. y propiedades magnéticas manganitas*, vol. 23, 2010.

- [35] “El problema de paralelizar - La Naturaleza Del Software.” [Online]. Available: <https://www.lnds.net/blog/2009/09/el-problema-de-paralelizar.html>. [Accessed: 11-Oct-2019].
- [36] L. L. N. L. Blaise Barney, “OpenMP.” [Online]. Available: <https://computing.llnl.gov/tutorials/openMP/>. [Accessed: 28-Sep-2019].
- [37] OpenACC, “Homepage | OpenACC,” 2019. [Online]. Available: <https://www.openacc.org/>. [Accessed: 28-Sep-2019].
- [38] E. Restrepo Parra, “Simulación Monte Carlo de propiedades magnéticas y de transporte en sistemas de superredes del tipo (FM/AFM)_n,” Universidad Nacional de Colombia, 2010.
- [39] O. Iglesias, “Time Dependent Processes In Magnetic Systems,” Universidad de Barcelona, 2002.