

ESTUDIO DE MODELO DE ISING MEDIANTE MCMC (METROPOLIS)

Juan Murillo¹, Carlos Contreras¹, Isaac Arévalo¹, Luis Zambrano¹

¹ Escuela de Física, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia.

Introducción

El modelo de Ising es un modelo central en la física estadística, la razón es que este modelo nos ayuda a estudiar las transiciones de fase en sistemas magnéticos. Para esto tendremos una red (en nuestro caso 2D) en la cual cada sitio tiene un espín $s_i = \pm 1$. Donde la energía de nuestro sistema se escribe como:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i \quad (1)$$

Donde $J > 0$ favorece el alineamiento ferromagnético y h es un campo magnético externo ¿De qué nos sirve este modelo?

- Nos permite modelar el magnetismo en materiales ferromagnéticos y paramagnéticos
- Nos ayuda a estudiar conceptos universales tales como la transición de fase, exponente crítico y correlaciones
- Funciona como un banco de pruebas para evaluar y comparar diferentes métodos numéricos en la física estadística y sistemas complejos

Modelo teórico

El modelo de Ising 2D consiste en una red cuadrada de tamaño $L \times L$, donde cada sitio contiene un espín que puede tomar uno de los valores posibles. Generalmente se aplican condiciones periódicas de frontera.

las variables del modelo son:

- Espines: $s_i = \pm 1$
- Temperatura: T
- Constante de acoplamiento : J
- Campo magnético externo: h

Las cantidades observables principales son:

- Energía por espín: $E = \frac{\langle H \rangle}{N}$
- Magnetización por espín: $m = \frac{\langle \sum_i s_i \rangle}{N}$
- susceptibilidad magnética: $\chi = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{N k_B T}$

Para el modelo de Ising 2D sin campo externo ($h = 0$), la temperatura crítica exacta es:
 $T_c = \frac{2J}{\ln(1+\sqrt{2})} \approx 2.269 \quad (J = 1)$

¿Qué es una cadena de Markov?

Una cadena de Markov es una sucesión de estados donde la probabilidad del siguiente estado depende solo del actual. Para MCMC usamos una cadena de Markov diseñada para tener como distribución estacionaria la distribución de Boltzman

$$P(s) \propto e^{-\frac{H(s)}{k_B T}} \quad (2)$$

¿Por qué utilizar MCMC en Ising

- El espacio de configuraciones crece exponencialmente con el número de espines, por lo que enumerar todas las configuraciones no es factible.
- MCMC permite muestrear configuraciones según la distribución de Boltzmann y estimar observables como energía, magnetización y funciones de correlación con complejidad manejable.

Algoritmo Metropolis-Hastings (Metropolis simples para Ising)

Para aplicar el metropolis-Hastings se usó el siguiente algoritmo:

```
for i in range(pasos):
    # elegir espín aleatorio en la red
    x = rng.integers(0, N)
    y = rng.integers(0, N)

    espin_viejo = espines[x, y]
    espines[x, y] = -espin_viejo

    # variación de energía
    DE = energia_total_2d(espines) - energia_total_2d(espines0)
```

```
# Regla de Metropolis
if DE <= 0 or rng.random() < np.exp(-DE/T):
    espines0 = espines.copy()
else:
    espines[x, y] = espin_viejo # revertir

energias.append(energia_total_2d(espines))
M = np.sum(espines.copy())
M_i[i+1] = M
```

El algoritmo Metropolis implementado en el código muestra la distribución de Boltzmann,

$$P(s) \propto e^{-H(s)/T},$$

lo que garantiza que la cadena de Markov converge al equilibrio térmico.

Temperatura crítica y transición de fase

El Modelo de Ising Bidimensional (2D), en una red cuadrada con interacción entre primeros vecinos y campo magnético externo nulo, es famoso porque sí exhibe una transición de fase.

La solución exacta, encontrada por Onsager, para la temperatura crítica en campo magnético nulo es:

$$k_B T_c = \frac{2J}{\ln(1 + \sqrt{2})}$$

Usando las unidades de simulación donde $J = 1$ y $k_B = 1$, el valor numérico de la temperatura crítica es:

$$T_c \approx 2.269$$

La transición que ocurre a T_c es una Transición de Fase de Segundo Orden (o continua).

Fase	T	M	Ordenamiento
Ferromagnética	$T < T_c$	$M \neq 0$	Espines alineados
Paramagnética	$T > T_c$	$M = 0$	Espines aleatorios

Resultados



Figure 1: snapshots de 2500, 3000 y 3500 pasos



Figure 2: snapshots de 4000 y 4500 pasos

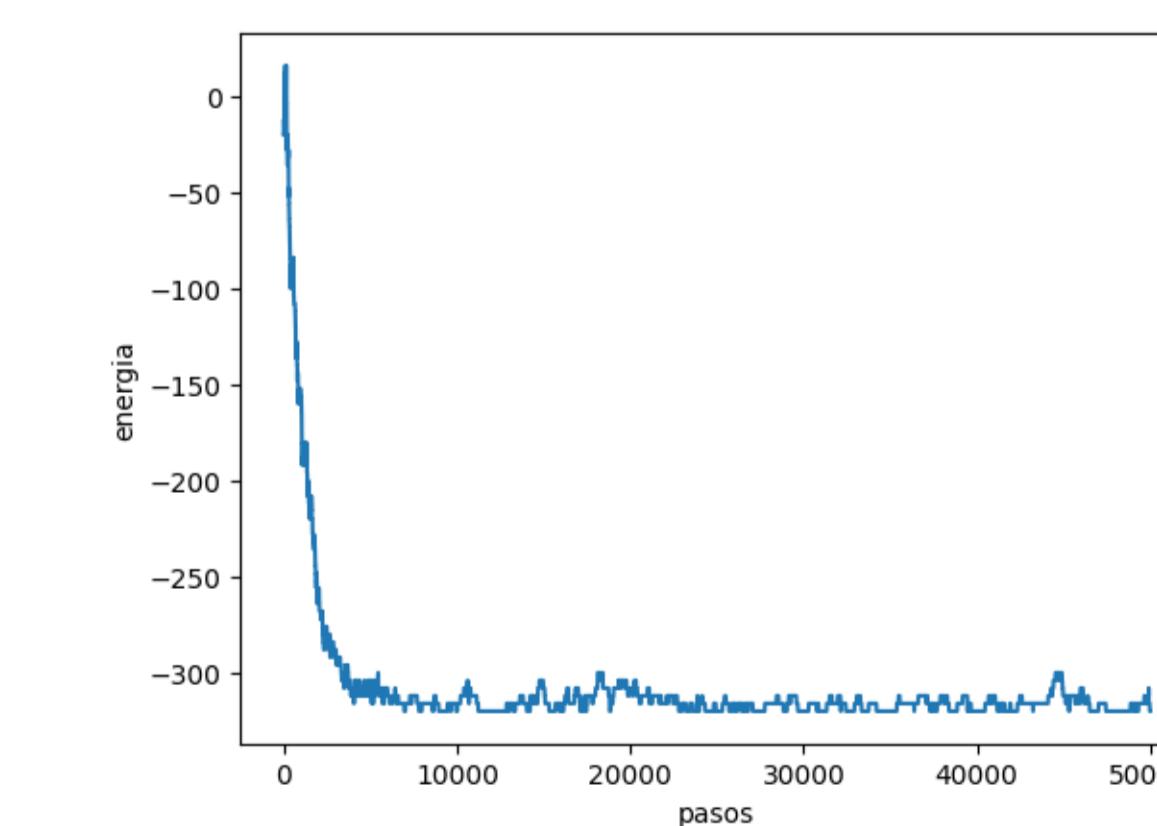


Figure 3: energía del sistema