

Proyecto # 1: Modelo de Ising 2D

Aplicación de los Métodos de Monte Carlo en física

Daniel Estrada Acevedo

Instituto de Física—Universidad de Antioquia

Resumen

En el presente trabajo se aborda el problema de reproducir la transición de fase de primer orden de un modelo de Ising dos dimensional, esto con el fin de mostrar el uso de los métodos de Monte carlo en problemas de física real. Acá se generan simulaciones con base en el algoritmo de *Metropolis-Hasting* y a partir del parámetro de orden M (magnetización del sistema), se calcula un estimado del valor crítico de $\beta = \frac{1}{k_b T}$, en el cual, un medio ferromagnético uniforme ($J = 1$) comienza a exhibir características magnéticas en la escala macroscópica. Como resultado se estimó un valor numérico de β_c con un error relativo de más de 50 %, el cual es sin duda muy grande, por lo que se propone posibles formas de reducir la discrepancia con el esperado teórico y mejorar el rendimiento del programa con técnicas de optimización y el refinamiento de los algoritmos.

Palabras clave— Monte Carlo, Metropolis-Hasting, Modelo de Ising, Ferromagnetismo, Transición de Fase.

1. Introducción

Los sistemas físicos macroscópicos y sus propiedades son estudiados por la física estadística usando la teoría de la probabilidad. Para llegar a catalogar un sistema como macroscópico, es necesario tener un número de partículas cercano al número de Avogadro ($\sim 10^{23}$) como mínimo. En este límite, la teoría puede estimar cantidades macroscópicas como la energía, la entropía, la temperatura, entre otras, a partir de procesos estadísticos y de las propiedades microscópicas de cada partícula.[7]

Es de usual interés para las diferentes ciencias simular este tipo de sistemas macroscópicos para poder confrontarlos con los procesos experimentales de los laboratorios y así comprobar la validez de los modelos teóricos. Sin embargo, ni con las más potentes computadoras hoy día, es posible alcanzar sistemas con estos límites termodinámicos, el costo computacional sería muy alto. Pero, bajo ciertas simplificaciones y con justificadas discrepancias con las predicciones teóricas, es posible plantear simulaciones moleculares con tamaños más reducidos que reproduzcan características importantes como transiciones de fase de los observables del sistema. Para realizar estas simulaciones, los científicos suelen utilizar algoritmos de evolución para su sistema que implemente métodos de Monte Carlo, con el fin de optimizar los tiempos de cómputo sin sacrificar exactitud en las predicciones. [7]

Con esto en mente, y con el objetivo de ilustrar la implementación de los métodos de Monte Carlo en aplicaciones a la física, en este trabajo, se desarrolla la simulación de un sistema acorde al modelo de Ising dos dimensional

y se evoluciona mediante el algoritmo *Metropolis-Hastings* para reproducir una transición de fase.

2. Marco Teórico

2.1. Modelo de Ising

Este es un modelo físico propuesto para estudiar el comportamiento de materiales ferromagnéticos. En dos dimensiones el modelo consiste en colocar partículas en una malla, con un valor de espín que puede tomar dos posibles valores, espín hacia arriba (+1) o espín hacia abajo (−1). La interacción entre espines solo se da entre primeros vecinos y se asume periodicidad en las condiciones de frontera, con lo cual, el Hamiltoniano o la energía del sistema en una configuración S esta dada por: [3]

$$\mathcal{H}(S) = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} s_{ij} (s_{i+1j} + s_{i-1j} + s_{ij+1} + s_{ij-1}), \quad (1)$$

donde $\langle i, j \rangle$ denotan la suma sobre los primeros vecinos solamente¹, J es la fuerza de interacción entre los espines ($J > 0$, favorece el ferromagnetismo [3]) y el $\frac{1}{2}$ evita el sobre conteo.

Este sistema se plantea como un colectivo canónico, es decir, un sistema cerrado de partículas que puede intercambiar calor con el entorno, pero no materia. Con esto en mente, la función de partición del sistema está dada por: [5]

$$\mathcal{Z}(\beta) = \sum_S e^{-\beta \mathcal{H}(S)}, \quad (2)$$

¹No se considera la interacción con los vecinos de forma diagonal, una partícula i solo interactuará con la de la derecha, la izquierda, la de arriba y la de abajo.

donde $\beta = \frac{1}{k_B T}$, con T como la temperatura del sistema y k_B como la constante de Boltzmann. Con lo que la probabilidad de que el sistema se encuentre en una configuración particular S se puede escribir como: [4]

$$P(S) = \frac{e^{-\beta \mathcal{H}(S)}}{\mathcal{Z}(\beta)}, \quad (3)$$

y por tanto los observables del sistema pueden ser estimados como. [3]

$$\langle O \rangle = \sum_S O(S) P(S) = \frac{1}{\mathcal{Z}(\beta)} \sum_S O(S) e^{-\beta \mathcal{H}(S)}. \quad (4)$$

Una de las cosas interesantes del modelo de Ising 2D es que, contrario a lo que esperaban los científicos del siglo xx, en este sistema se presenta una transición de fase. Para observarla, se toma entonces un parámetro de orden (un observable que da cuenta de en qué fase se encuentra el sistema) y se estudia su dependencia con la temperatura. Si el sistema presenta una transición de fase de primer orden, el valor de este observable pasara abruptamente de un valor cercano a cero hasta un valor diferente de cero cuando se cruce una temperatura critica. Otra característica de este modelo es que posee solución analítica, al menos el problema simplificado que acá se planteo, en el que no se considera la interacción con campos magnéticos externos. Resulta entonces que las soluciones predicen que el valor critico en el cual se da la transición de fase, satisface: [6][4]

$$J\beta_c = \frac{1}{2} \ln(1 + \sqrt{2}). \quad (5)$$

Pues bien, en este trabajo en se opta entonces por tomar como parámetro de orden la magnetización del sistema M , definida como:

$$M = \frac{1}{N} \sum_{ij} s_{ij},$$

donde, ij en este caso barren todas las partículas de la maya.

Y como se vera en los resultados de la simulación, el sistema pasará de tener una magnetización nula a ser un sistema magnético cuando se cruce la temperatura critica (β_c), representando así, la física de los materiales ferromagnéticos. Es usual también observar la transición de fase usando la susceptibilidad magnética $\chi_\mu = \beta N (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2)$.

Para cerrar esta sección, podemos resaltar que es también común, y útil para los procesos computacionales, trabajar con parámetros adimensional, en este caso se opta por usar $\hat{\beta} = J\beta$ y $\hat{\mathcal{H}} = \frac{\mathcal{H}}{J}$. Es fácil ver que este cambio no afecta en absoluto el valor de $e^{-\beta \mathcal{H}(S)}$. [3]

2.2. Método de Monte Carlo

Suponiendo que se tiene un maya de partículas de longitud L , entonces el numero total de posibles configuraciones S vendría a ser 2^{L^2} , lo que hace que calcular los observables como la magnetización por medio de (4) sea

casi imposible incluso para sistemas muy por debajo de los limites termodinámicos. Sin embargo, para este problema es posible la aplicación de los métodos de Monte Carlo. En particular, si recordamos en que se pueden calcular integrales generando un numero finito N de valores en el dominio de integración A y efectuando un estimado de la forma: [3]

$$I = \int_A dx f(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_i^N f(x_i). \quad (6)$$

Podemos extrapolar esta idea y obtener un estimado para (4) generando N posibles configuraciones S de la maya de partículas, N suficientemente grande, y así tener una aproximación al observable con una suma finita menor tal como en (6). En este caso en particular, se calcularía el estimado de la magnetización como: [4]

$$\langle M \rangle = \frac{1}{N} \sum_n^N M_n, \quad (7)$$

donde, M_n es la magnetización de la n -ésima configuración del sistema, S_n . A diferencia del problema de la integración simple con la que se hizo el símil, la generación de las configuraciones S_n del sistema se hacen acorde a la función de probabilidad (3) (Muestreo por importancia) mediante un método MCMC (*markov chain Monte Carlo*), en específico, el algoritmo de *Metropolis-Hasting* el cual se detalla en la metodología.

3. Implementación

Para el desarrollo de la simulación, se planteó la tarea en pasos:

- Generar un sistema de partículas como un arreglo cuadrado ($L \times L$).
- Generar diferentes configuraciones $\{S_n\}$ con el algoritmo de *Metropolis-Hasting*, para calcular el estimado $\langle M \rangle$.
- Obtener una dependencia de $\langle M \rangle$ con $\hat{\beta}$ y así ver si ocurre la transición de fase.
- Usar los mismo datos para ver la transición de fase mediante la susceptibilidad magnética χ_μ .

Para lo primero, se creó una clase de Python `IsingLattice` que representa el sistema, éste contiene un arreglo cuadrado de partículas (`IsingLattice.S`) el cual servirá como base para el desarrollo de la simulación. Cada partícula en la maya es a su vez una instancia de otra clase (`Part`) que contiene la información de cada partícula, el valor de su espín, su energía, y la posición de sus vecinos en el arreglo (Figura 1).

Ahora, para la generación de las configuraciones $\{S_n\}$ se implementa, mediante el método `IsingLattice.updateLattice()`, el algoritmo de Metropolis-Hasting, que consiste en:

- Partir de una configuración inicial S_0 .

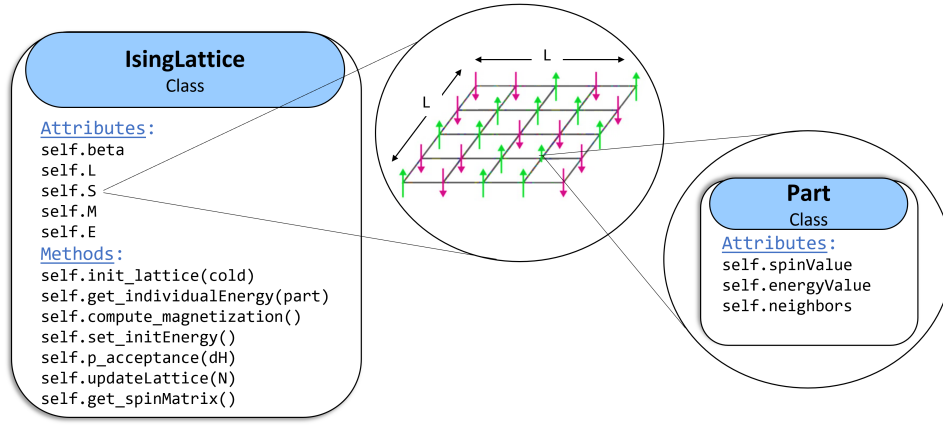


Figura 1: Representación gráfica de las clases `IsingLattice` y `Part` definidas en el módulo `Ising_classes.py`.

- Tomar una partícula del sistema e invertir el valor de su espín, $s_{ij} = -s_{ij}$. Con esto se tendría una nueva configuración.

$$S_0 \rightarrow S' = \begin{bmatrix} s_{11} & \dots & s_{1L} \\ \vdots & -s_{ij} & \vdots \\ s_{L1} & \dots & s_{LL} \end{bmatrix}$$

- Calcular la energía de la nueva configuración y definir el cambio de esta cantidad:

$$\delta\hat{H} = \hat{H}(S') - \hat{H}(S)$$

- Aceptar la nueva configuración con probabilidad `IsingLattice.p_acceptance()` definida como:

$$W(S \rightarrow S') = \begin{cases} 1 & \text{if } \delta\hat{H} \leq 0 \\ e^{-\beta\delta\hat{H}} & \text{else} \end{cases},$$

- Si no se acepta la nueva configuración simplemente descartar el cambio y mantener la configuración inicial: $S_0 \rightarrow S_0$.

Una actualización completa del sistema correspondería a m aplicación del anterior proceso (para lo cual [3] recomienda realizar L^2 repeticiones), con esto se obtendría la nueva configuración S_i a añadir a $\{S_n\}$.

Para calcular la magnetización con el estimado de Monte Carlo (6) se generarían N de éstas, es decir, tendría que ejecutarse el algoritmo $m \times N$. Una vez ejecutado este proceso, se tendrán los datos necesarios para ver la transición de fase mediante los observables mencionados.

La elección de la partícula a la cual se le va a girar el espín en el segundo paso del algoritmo es aleatoria según se recomienda en [3]. Fácilmente se podrían recorrer el sistema de forma ordenada aplicando el proceso m veces, sin embargo, no se recomienda porque aumenta la correlación entre las configuraciones obtenidas.

Ahora, para calcular el estimado de Monte Carlo se tendría entonces una muestra de N configuraciones como se mencionó antes, sin embargo, [3] aconseja usar un

conjunto menor tomando las configuraciones solo cada N_{skip} . Además, también recomienda realizar el análisis del sistema solo después de un número N_{Therm} de pasos de simulación cuando el sistema se haya termalizado (ver Figura 2). con estas dos consideraciones se disminuye más la correlación y se garantiza que el sistema llega al equilibrio, de forma que las configuraciones que se usen para los cálculos sean representativas y con baja correlación.

En resumen, luego de el proceso descrito, se tiene una muestra de configuraciones $\{S_n\}$ de tamaño $N' = (N - N_{Therm})/N_{skip}$, con el cual aplicar 6 y obtener un valor para $\langle M \rangle$ dada un valor de $\hat{\beta}$. Si se estudia entonces la dependencia de $\langle M \rangle$ con $\hat{\beta}$, se podrá observar que existe un valor $\hat{\beta}_c$ en el cual se da la transición de fase antes mencionada, en este punto, la magnetización pasa de ser casi nula a un valor mayor, es decir, los espines tienden a alinearse cuando la temperatura disminuye ²

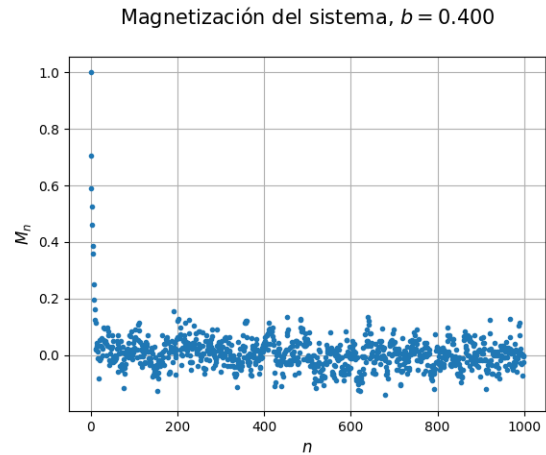


Figura 2: Evolución de la magnetización M_n para $L = 30$, $\beta = 0.4$, $N_{skip} = 100$, iniciando el sistema con todos los pines en la misma orientación (*cold state*).

²De la misma forma, es posible realizar el calculo de χ_μ y ver que diverge en $\hat{\beta}_c$.

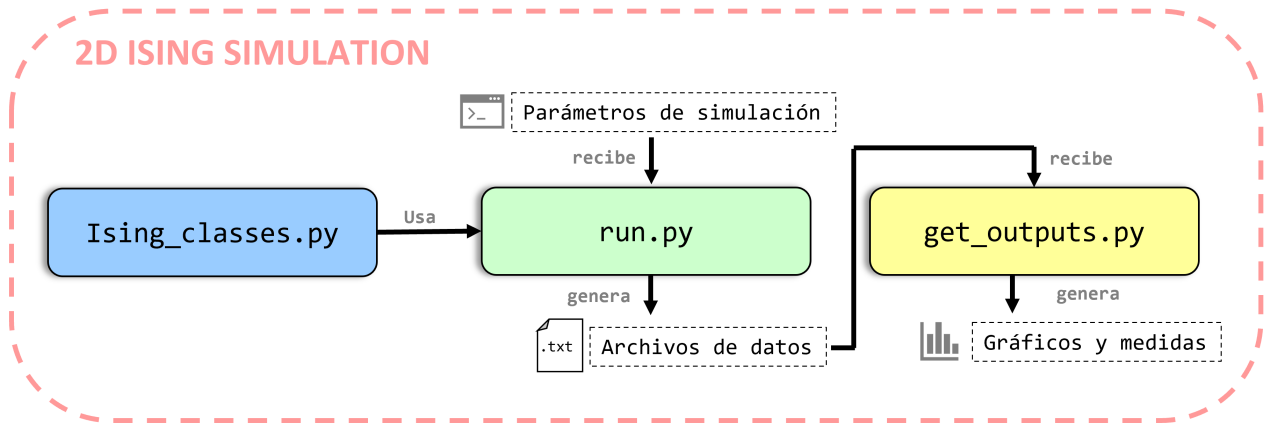


Figura 3: Estructura del flujo de trabajo de los módulos que conforman el programa.

4. Resultados

Para producir los resultados se trabajó de forma modular siguiendo el diagrama de flujo que se aprecia en la Figura 3. El papel de cada módulo en el programa se puede resumir rápidamente como:

- **Ising.Classes.py:** Contiene la definición de las clases `IsingLattice` y `Part`, las cuales representan el sistema y su evolución como se describió en la metodología.
- **run.py:** En este módulo se define la función `run_simulation(...)`, la cual, se encarga de generar, a partir de unos parámetros de simulación, la información de los observables y la evolución de la configuración de espines en el sistema.
- **get_outputs.py:** Recopila los datos generados con `run.py` y produce las gráficas y medidas de interés.

Se simularon mayas de dos tamaños diferentes, uno de $L = 10$ y otro de $L = 30$, para ver los efectos del tamaño del sistema en la transición de fase. A partir de los datos se pudo realizar gráficas en función de β de: La energía $\langle E \rangle$, La magnetización $\langle M \rangle$, la susceptibilidad magnética χ_μ y adicionalmente se decidió incluir otra medida que era fácil de calcular con los mismos datos, el calor específico $c = \frac{\beta}{N} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$. En las Figuras 4 y 5 se presentan entonces los resultados.

Como se esperaba, se nota la transición de fase en ambos sistemas cuando se alcanza un valor de $\hat{\beta}_c = 0.693$ (en el sistema 10×10) y $\hat{\beta}_c = 0.707$ (en el 30×30). Estos valores se estimaron promediando los valores críticos de cada observable. Ahora bien, este resultado es insatisfactorio pues el valor crítico esperado está dado por (5), que corresponde a $\hat{\beta}_c \approx 0.4407$, lo que significa que el estimado calculado presenta un error relativo de más del 50 % en ambos casos.

5. Conclusiones

Es claro que la exactitud de la simulación no es la que se esperaba, sin embargo, no todo es negativo, puede rescatarse el hecho de que el programa reproduce fielmente la física del sistema. El sistema es un modelo paradigmático de la física estadística que sirve para mostrar el fenómeno de transición de fase, y como tal, la simulación construida acá, permite reproducir el fenómeno.

Ahora bien, para estudiar el porqué de la discrepancia con la teoría de los resultados expuestos, se pueden plantear algunas propuestas:

- Lo primero que se puede considerar es tomar arreglos de partículas de mayor tamaño. Como se menciona al inicio de este trabajo, el efecto de tamaños finitos es inevitable en simulaciones computacionales que se alejan de los límites termodinámicos, sin embargo, podría tratar de estudiarse mayas de al menos $L = 500$ y ver que pasa con $\hat{\beta}_c$. [3] propone estudiar la convergencia de $\hat{\beta}_c$ en función de L .
- Aunque es interesante desarrollar la propuesta anterior, los tiempos de computo de la versión actual del código impiden implementar la simulación para mayas grandes, por tanto, queda como propósito mejor el rendimiento del código y analizar si se puede refinar los algoritmos.
- Hablando de algoritmos, es sabido que el tradicional *Metropolis-Hasting* presenta problemas cerca de $\hat{\beta}_c$, por lo que se suele proponer la implementación del algoritmo de *Swendsen-Wang* o de *Wolff* [1] [2].

Con todo esto, se recalca como expectativa de este trabajo, optimizar al máximo el programa para poder apuntar a sistemas más grandes.

Transición de fase L=10

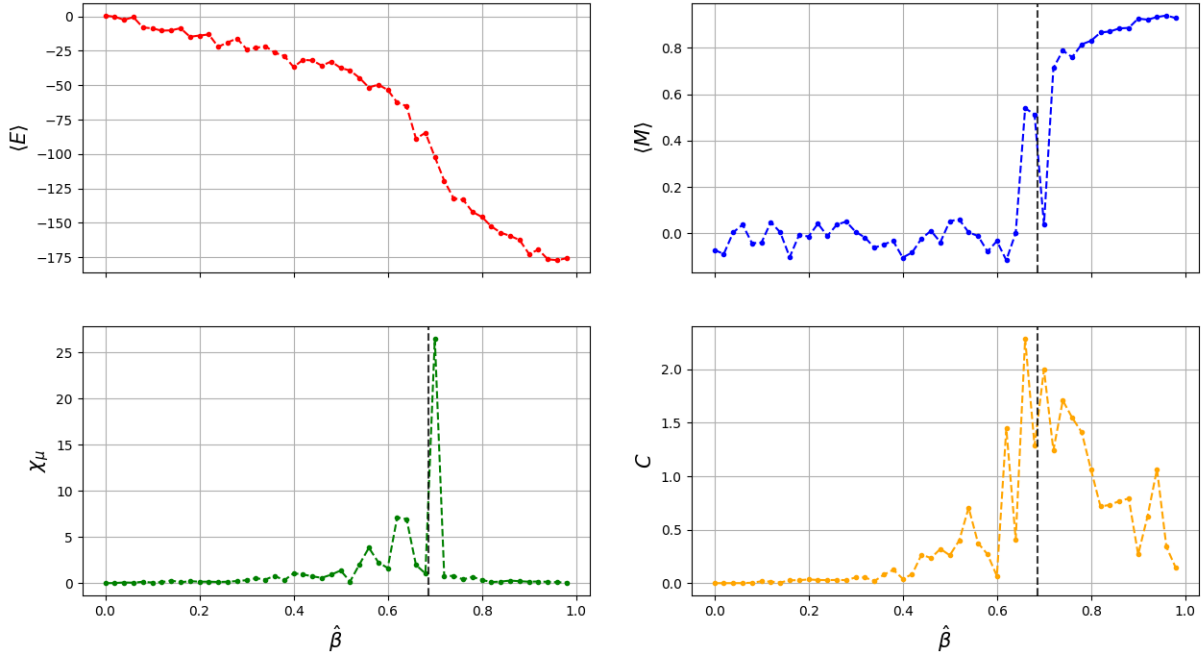


Figura 4: Gráficas de transición de fase para una maya 10×10 , $N = 1000$, $m = 100$, $N_{skip} = 100$, $N_{Therm} = 84$, con $\hat{\beta} = \{0, 0.002, 0.004, \dots, 0.998\}$

Transición de fase L=30

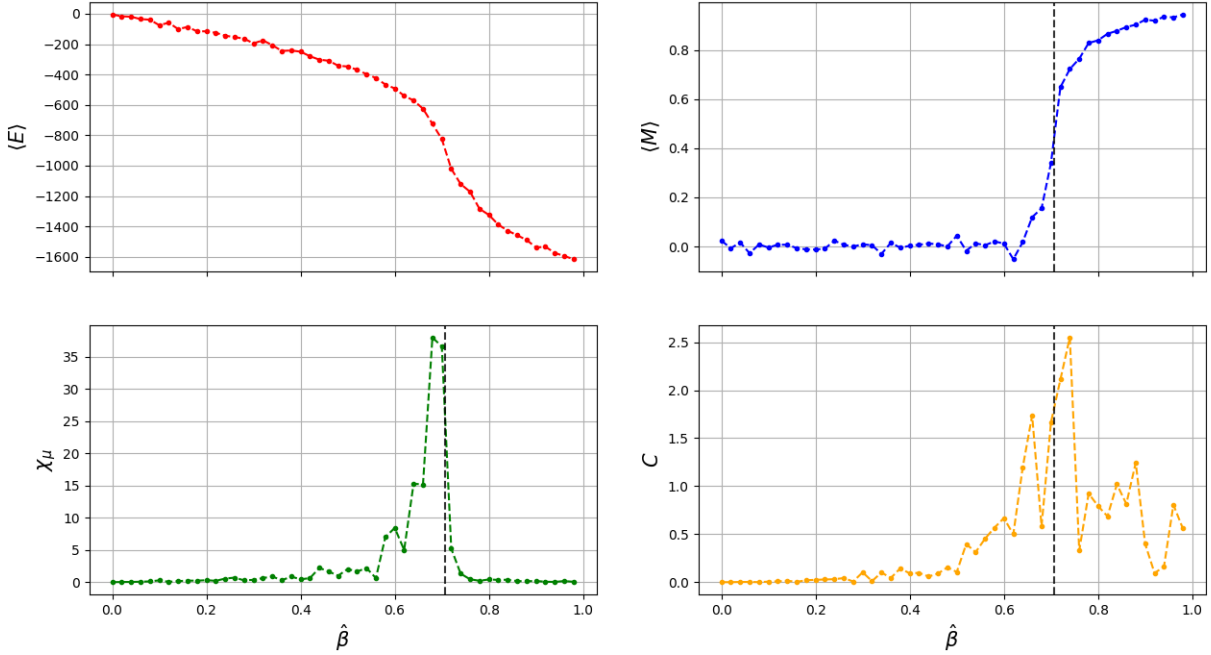


Figura 5: Gráficas de transición de fase para una maya 30×30 , $N = 1000$, $m = 900$, $N_{skip} = 100$, $N_{Therm} = 169$, con $\hat{\beta} = \{0, 0.002, 0.004, \dots, 0.998\}$

Referencias

- [1] lorenzomancini1. *IsingModel2D_MonteCarlo*. URL: https://github.com/lorenzomancini1/IsingModel2D_MonteCarlo/blob/master/Ising2D.ipynb.

- [2] *Monte Carlo simulations for the Ising model*. URL: <https://compphys.quantumtinkerer.tudelft.nl/proj2-intro-ising/>.
- [3] Laurin Pannullo. *Final Project: The 2D Ising Model, Study of the phase transition via Monte Carlo simulations*. URL: https://itp.uni-frankfurt.de/~mwagner/teaching/C_WS19/projects/Ising_proj.pdf.
- [4] Christian Schäfer. *Phase transition of the 2d ising model via Monte Carlo simulations*. URL: https://itp.uni-frankfurt.de/~mwagner/teaching/C/proj1_ising.pdf.
- [5] Wikipedia. *Colectividad canónica* — *Wikipedia, La enciclopedia libre*. [Internet; descargado 21-octubre-2021]. 2021. URL: https://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Colectividad_can%C3%B3nica&oldid=134388900.
- [6] Wikipedia contributors. *Ising model* — *Wikipedia, The Free Encyclopedia*. [Online; accessed 19-October-2021]. 2021. URL: https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Ising_model&oldid=1048384303.
- [7] Wikipedia contributors. *Statistical mechanics* — *Wikipedia, The Free Encyclopedia*. [Online; accessed 21-October-2021]. 2021. URL: https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Statistical_mechanics&oldid=1048046772.