

Estudio del modelo de Ising bidimensional con el enfoque del algoritmo Metrópolis Montecarlo

M. Caral* and I. Gómez F.**

Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Pabellón I, Ciudad Universitaria, 1428 Buenos Aires, Argentina.

En este trabajo se realizó un estudio de las variables termodinámicas asociadas a una red de spines modelada por el modelo de Ising en dos dimensiones. Se reconocieron las formas funcionales predichas por la teoría al realizar simulaciones del sistema en distintas condiciones (con y sin campo magnético externo, con y sin constantes de acoplamiento, diferentes tamaños de red). No obstante, limitaciones por efectos de red finita, así como también en la misma implementación de las simulaciones, llevaron a comportamientos inesperados de las magnitudes estudiadas. Particularmente se estudiaron la magnetización, la energía, la susceptibilidad, el calor específico, la correlación y el tiempo de decorrelación para este tipo de sistemas.

I. Introducción

En 1920 Wilhelm Lenz inventa el que luego fue llamado *modelo de Ising* para describir con mecánica estadística los sistemas ferromagnéticos. Si bien en su versión de 1 dimensión el modelo no presenta la transición de fase esperada, la versión $2d$ es el modelo más simple para representar la transición de fase en sistemas donde existen interacciones entre sus componentes (en este caso, spines).

La evolución de un sistema como el de Ising (que se da por la inversión de sus spines) puede representarse con mecánica estadística si se pesa cada posible nueva configuración con una probabilidad acorde. En particular, la distribución de probabilidad sobre los estados es tal que prioriza el decrecimiento de la energía del sistema. Una forma de considerar nuevas configuraciones y decidir, en base a su probabilidad asociada, si el sistema debe evolucionar o no a dicho estado, es utilizando el método de Metrópolis - Montecarlo. Con el enfoque de este algoritmo, se realiza en este trabajo el estudio de un sistema de Ising $2d$ y sus diferentes magnitudes asociadas.

II. El modelo

A. Metrópolis - Montecarlo

El método de Montecarlo es un método estocástico utilizado para aproximar soluciones cuyo costo computacional es muy elevado mediante la utilización de las soluciones analíticas exactas, o cuando no existe dicha solución analítica. Consiste en generar secuencias de números aleatorios (o pseudo aleatorios) para el cálculo de probabilidades u otras cantidades de interés.

En este trabajo se utilizó el método de Montecarlo combinado con el algoritmo de Metrópolis para el cálculo aproximado de magnitudes en un sistema reticular en dos dimensiones, con el fin de estudiar propiedades del ferromagnetismo.

El algoritmo de Metrópolis consiste en, dado un estado inicial i con energía ϵ_i , perturbar el sistema para obtener un nuevo estado j con energía ϵ_j . Si la energía del estado j es menor que la energía inicial ϵ_i , se acepta el nuevo estado. Por el contrario, si la energía del estado j es mayor que la del estado inicial i , se acepta el nuevo estado con una dada probabilidad, definida en base a la física del sistema.

B. Ising 2D

El modelo de Ising consiste en un arreglo de N spines y puede ser considerado de forma unidimensional, con solución exacta [1] o el modelo bidimensional. En este trabajo se tratará el modelo de Ising bidimensional para un red cuadrada de spines de dimensión $L \times L$.

El Hamiltoniano del sistema está dado por la siguiente ecuación

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

donde J es la constante de acoplamiento entre spines, la suma sobre $\langle i,j \rangle$ denota que es sobre primeros vecinos (en el arreglo 2D, vecino izquierdo, derecho, superior e inferior) y B es un campo magnético externo. El primer término de acoplamiento corresponde al efecto de la dirección de los spines vecinos sobre el spin central. El segundo término corresponde al efecto que genera la presencia de un campo magnético externo sobre la alineación de cada uno de los spines de la red.

Se dice que si $J > 0$ el sistema es ferromagnético, es decir, el acoplamiento favorece la alineación entre los vecinos, de la forma de $\uparrow\uparrow$ y $\downarrow\downarrow$. Si $J < 0$ se dice que el sistema es antiferromagnético, es decir, el aco-

* paulacaral@hotmail.com

** ignaao@gmail.com

plamiento favorece la *anti*-alineación entre vecinos, de la forma $\uparrow\downarrow$ y $\downarrow\uparrow$. [2]

Si se trabaja en el ensamble canónico (N, V, T) , se tiene que la función de partición viene dada por

$$Z = \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta H(s_i)} \quad (\text{II.2})$$

y la función densidad de probabilidad de cada estado posible es de la forma

$$P = \frac{e^{-\beta H(s_i)}}{Z} \quad (\text{II.3})$$

de aquí se define el valor medio para las distintas magnitudes de interés. Sea A un observable del sistema, entonces

$$\langle A \rangle = \frac{\sum A e^{-\beta H(s_i)}}{Z} \quad (\text{II.4})$$

Para el caso en que las magnitudes de interés son la magnetización M y la energía E se tiene

$$\langle M \rangle = \frac{\sum M e^{-\beta H(s_i)}}{Z} \quad (\text{II.5})$$

$$\langle E \rangle = \frac{\sum E e^{-\beta H(s_i)}}{Z} \quad (\text{II.6})$$

Expresiones a partir de las cuales se obtienen el calor específico C y la susceptibilidad χ como

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = k\beta^2 (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (\text{II.7})$$

$$\chi = \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial B} = N\beta (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \quad (\text{II.8})$$

1. Caso $J = 0$

El primer caso de estudio de este trabajo fue con acoplamiento entre spines nulo, de forma que $J = 0$ y el primer término de Hamiltoniano se anula:

$$H = -B \sum_i s_i$$

En este caso, si se quiere calcular la magnetización media por sitio se tiene que, usando la definición (II.4) para un solo spin se reduce a

$$M = \langle s_i \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i = \tanh(\beta B) \quad (\text{II.9})$$

donde N es el número total de spines de la red, o la dimensión de la red.

Si ahora se quiere calcular la energía media por sitio, aplicando la definición (II.4) para $\varepsilon_i = -B s_i$ se llega a que

$$E = -B \langle s_i \rangle = -\frac{B}{N} \sum_{i=1}^N s_i = -B \tanh(\beta B) \quad (\text{II.10})$$

2. Caso $B = 0$

El segundo caso de estudio de este trabajo fue para $J > 0$ y $B = 0$. En este caso se tiene solo la contribución de los primeros vecinos de spines, debido a la intensidad del acoplamiento. En este caso el Hamiltoniano viene dado por

$$H = -J \sum_{\langle j, i \rangle} s_j s_i \quad (\text{II.11})$$

Para este caso se tiene como expresión para la magnetización la ecuación obtenida por Onsager[3]

$$M = \langle s_i \rangle = \begin{cases} 0, & J^* < J_c^* \\ \left[1 - \frac{1}{\sinh^4(2J^*)}\right]^{1/8}, & J^* > J_c^* \end{cases} \quad (\text{II.12})$$

donde $J^* = \beta J$ y J_c^* es el punto crítico donde aparece la magnetización espontánea, por eso, J_c^* viene dado por

$$J_c^* = \frac{\text{arcsinh}(1)}{2} \approx 0,44 \quad (\text{II.13})$$

de donde, con esta última puede obtenerse la temperatura T_c de transición, dada por $1/J_c^* \approx 2,27$.

3. Interacción a segundos vecinos y frustración

El último caso de estudio de este trabajo es el que presenta una variación en la física del sistema y es el caso en el que hay una interacción ferromagnética a primeros vecinos y una interacción antiferromagnética a segundos vecinos. En este caso se supuso campo magnético externo nulo. La energía del sistema viene dada por el Hamiltoniano de la forma

$$H = -J \left(\sum_{\langle j, i \rangle} s_j s_i - \sum_{\langle k, i \rangle} s_k s_i \right) \quad (\text{II.14})$$

donde la suma en $\langle j, i \rangle$ es sobre primeros vecinos (arriba, abajo, izquierda, derecha), mientras que la suma en $\langle k, i \rangle$ es a segundos vecinos o en diagonales (arriba izquierda, arriba derecha, abajo izquierda, abajo derecha). Esta expresión vale para cuando la interacción entre primeros y segundos vecinos con el spin central tiene la misma magnitud pero diferente signo, que fue

el caso en este trabajo.

Es en estas condiciones que se observa el fenómeno de frustración, dado que no hay una preponderancia entre primeros o segundos vecinos y el sistema no puede alcanzar un estado de mínima energía.

III. Simulaciones numéricas

A. Importance Sampling

Para estudiar el método de muestreo conocido como *importance sampling* se realizaron simulaciones numéricas mediante el método de Montecarlo. Se generaron números pseudo aleatorios para muestrear la distribución gaussiana (no normalizada)

$$f(x) = e^{-\frac{x^2}{2}}$$

Se parte de un x_0 arbitrario y se define un tamaño máximo de paso δ . El próximo valor x_1 resulta tal que $|x_0 - x_1| < \delta$ y este nuevo x_1 se acepta si

$$\frac{f(x_1)}{f(x_0)} > X$$

con $X \sim U[x_0 - \delta, x_0 + \delta]$. Este proceso se repitió $N = 1000000$ (un millón) de veces para generar la cadena de Markov del muestreo de la distribución, para $x_0 = 0$, $\delta = 5$.

Luego se estudió el porcentaje de aceptación de pasos en función de la magnitud de δ . Con este objetivo se barrió desde $\delta = 0$ hasta $\delta = 50$, con incrementos de 0,1.

Se estudió también la correlación entre pasos de la cadena de Markov generada. Particularmente, lo que se quiso observar fue la correlación entre los i -ésimos primeros pasos con los $(i + k)$ -ésimos pasos siguientes, empezando con $k = 0$ hasta $k = N/2$, con N el número total de pasos de la cadena de Markov. Para la simulación se tomó una cadena de Markov de longitud $n = 25000000$ (veinticinco millones), a la cual se la dividió en 5000 subpartes de $N = 5000$ pasos cada una. Se calculó la correlación para cada una de las 5000 divisiones y se promediaron.

Por otro lado, se utilizó este método de muestreo para calcular

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 e^{-\frac{x^2}{2}} = \sqrt{2\pi} \sigma^2$$

donde el valor a obtener es $\sigma^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N x_i^2$. Se usó $\delta = 5$ y 10000 iteraciones (cien mil) para muestrear la función, finalmente, de la cadena de Markov obtenida se calculó la integral I .

Finalmente, se estudió la dependencia del resultado

anterior en función del tiempo de termalización, donde tiempo es en realidad el número de pasos, ya que no hay una noción real de tiempo. Se realizó entonces una simulación en la que se calcula el *promedio acumulativo* para el valor de σ en cada iteración del programa, de forma que pueda observarse hacia donde tiende el valor. Se realizó este procedimiento para varios δ , aquellos tales que el porcentaje de aceptación estuviese aproximadamente entre el 30 % y el 60 %. Se barrió desde $\delta = 2$ hasta $\delta = 5,5$ con incrementos de 0,5.

B. Ising 2D

Para estudiar el modelo de Ising 2D se realizaron simulaciones numéricas para el armado de la red, el poblado de la misma tanto con spines \uparrow o \downarrow , se calcularon los valores de las variables termodinámicas de interés y se comparó con los resultados teóricos expresados anteriormente en este trabajo.

1. Caso $J = 0$ - Estudio de las variables termodinámicas

En principio se estudió un arreglo cuadrado de $L = 32$ el cual se pobló con spines \uparrow y \downarrow de forma uniforme, es decir, con probabilidad $p = 1/2$, y se consideró una constante de acoplamiento entre spines $J = 0$, de forma que todos los spines sean independientes entre sí. Se consideró para las simulaciones la presencia de un campo magnético externo $B = 1$. En primera instancia lo que se realizó fue un programa que tome un elemento de la red de forma aleatoria y lo invierta según el algoritmo de Metrópolis. Si la energía del sistema luego de invertir el spin es menor que la energía inicial, entonces el spin se invierte con probabilidad 1. Si la energía del sistema al invertir el spin es mayor que la energía inicial, el spin se invierte con probabilidad

$$p = e^{-2B^*}$$

con $B^* = \beta B$. Para las simulaciones se consideró a $\beta = 1/T$, con $k = 1$. Se compara el valor de la probabilidad p con un $X \sim U[0, 1]$ y si $p > X$, entonces el spin se invierte aunque la energía final del sistema sea mayor a la inicial. Dado que la probabilidad de aceptación, para $B = 1$ fijo, depende únicamente de T , las simulaciones se realizaron barriendo desde $T = 100$ hasta $T = 0$ con decrementos de 0,1. La simulación se llevó a cabo realizando 1000 muestreos completos de la red (es decir, cada muestreo tiene 32×32 intercambios - o no - de spines) para una dada temperatura, de modo de asegurar la termalización del sistema (alcanzar el estado estacionario) y la descorrelación de los datos. Una vez que se alcanzó el estado estacionario se

sumaron aritméticamente todos los spines y se dividió por el número de muestreos, obteniendo

$$M = \langle s_i \rangle$$

Se obtiene este resultado 200 veces y se promedian. Finalmente se repitió este proceso para cada temperatura, sin repoblar la red (ya que interesa tener la red ya termalizada). Obtenida esta magnitud del sistema, se calculó la energía por simple multiplicación con la intensidad del campo magnético B . Cabe destacar que en esta instancia no se conoce la cantidad de muestreos necesarios hasta descorrelacionar las muestras, pero, como se ve más adelante, la cantidad de muestreos necesarios es del orden de las decenas, mucho menor que los miles de muestreos utilizados en este caso.

2. Caso $B = 0$ - Frecuencia de muestreo y correlación

Para el caso en el que se tomó $J \neq 0$ y $B = 0$, es decir, la única contribución es el acoplamiento entre spines vecinos, también se trabajó con una red de $L = 32$ poblada inicialmente de forma uniforme con $p = 1/2$. Sin embargo, el barrido de la red en este caso se realizó de forma secuencial dada la simpleza de su implementación (además es igualmente válido que un muestreo aleatorio para este problema en particular). En este caso fue necesario proponer condiciones de contorno periódicas para la red, de forma que no existan *bordes* durante el barrido.

Nuevamente se hizo uso del algoritmo de Metrópolis donde, al estar considerando primeros vecinos, la probabilidad de aceptación se ve modificada en función de la cantidad de spines \uparrow y \downarrow alrededor del spin en cuestión. Considerando que hay solamente 4 spines vecinos, existen únicamente 5 posibles valores de probabilidad

$$p = \left\{ e^{-8J^*}, e^{-4J^*}, 1, e^{4J^*}, e^{8J^*} \right\}$$

El procedimiento es análogo al anterior, pero considerando estos 5 casos posibles. Se barre la red de forma secuencial, parándose en el spin i -ésimo, se suma los spines vecinos obteniendo 5 resultados posibles $\{4, 2, 0, -2, -4\}$. En base al valor de esta suma y a la orientación del spin i , se toma la probabilidad de aceptación p correspondiente y se la compara con un $X \sim U[0, 1]$, si $p > X$ se acepta el cambio.

Para el análisis del sistema se realizó un barrido que consistió en tomar 1100000 (un millón cien mil) valores de magnetización M y energía E , donde M es la suma aritmética de spines normalizada por L^2 , y E corresponde al primer término de la ecuación (II.1) dividido 2 (para no contar dos veces la misma interacción). Esto se realizó barriendo totalmente la red y

obteniendo M_0 y E_0 , volviendo a barrer la red totalmente y calculando nuevamente, esta vez, M_1 y E_1 ; repitiendo este proceso 1100000 veces para cada valor de J . Se tomaron los valores de J desde 0,10 hasta 0,60 con incrementos de 0,01. Una vez obtenidos estos datos, se desechan los primeros 100000 (cien mil) para asegurar la termalización del sistema y se calcula la correlación en función de k , donde k es el espaciado entre datos.

Para el cálculo de la correlación se tomaron las listas de 1000000 (un millón) de elementos y se las dividió en 1000 subpartes de 1000 elementos cada una a las cuales se les calculó la correlación. Una vez obtenidas las correlaciones en función de k para cada lista, se promedian y se obtiene una correlación promedio para cada J del barrido.

Calculada la correlación para cada valor de la constante de acoplamiento J se prosiguió a calcular τ que es el *tiempo* de descorrelación, donde tiempo es en realidad la cantidad de pasos dado que no hay una real noción de tiempo. El cálculo de τ consiste en medir para qué valor de k la correlación se hace menor que 0,1.

Una vez obtenido el valor de τ , este se vuelve la *frecuencia de sampleo* ya que se lo puede utilizar para recolectar de la tira de datos de M y E aquellos que correspondan a estados que estén descorrelacionados entre sí. Estos nuevos vectores de magnetización y energía (conformados solo por los estados seleccionados para evitar correlación) son los utilizados para calcular dos magnitudes de particular interés como son la susceptibilidad χ y el calor específico C . En particular, estas dos magnitudes son las varianzas de M y E respectivamente, por lo que el cálculo de las mismas se realizó simplemente aplicando las ecs. (II.8) y (II.7) a los vectores de estados *seleccionados*.

3. Distintos tamaños de red en el caso $B = 0$

Para el estudio de sistemas de spines con diferentes tamaños de red se procedió de forma similar al caso $L = 32$, obteniendo M y E y trabajando sobre estos vectores para hallar χ y C para estudiar el sistema. Se realizaron simulaciones con redes de tamaños $L = 4, 16, 64, 128$, todas pobladas inicialmente con probabilidad $p = 1/2$. Además, de la misma forma pero sin ahondar en el cálculo de la susceptibilidad y el calor específico, se simularon redes grandes de $L = 256, 512$ y 1024 para observar el fenómeno de magnetización espontánea y el J_c^* en cada caso.

La única diferencia con el caso anterior es que, siendo que no se necesitaba estudiar la correlación, en vez de adquirir vectores de 1100000 de datos, simplemente se implementó un código que, recibiendo el valor correspondiente de τ , realizaba los muestreos necesarios pero sólo guardaba el último. De esta forma, se

obtuvieron vectores de M y E que sólo pertenecían a estados descorrelacionados entre sí.

El cálculo de τ para los distintos valores de L se estimaron usando que

$$\tau \propto L^2 \quad (\text{III.1})$$

De esta forma, usando el dato del único τ estimado computacionalmente (el perteneciente a $L = 32$), se puede hallar la constante de proporcionalidad y calcular los tiempos de decaimientos correspondientes a otros tamaños de red.

4. Caso antiferromagnético - $J < 0$

Para el estudio del caso antiferromagnético se trabajó con una red de dimensión $L = 32$, poblada inicialmente de manera uniforme con $p = 1/2$, igual que en los casos anteriores.

Se realizaron barridos en J desde 0 hasta -1 , con decrementos de 0,01, de forma de poder ver los 2 regímenes del sistema. A diferencia de los casos anteriores, estas simulaciones se realizaron considerando un campo magnético B externo de 2 intensidades distintas, $B = 1$ y 0,001. El hecho de considerar el campo magnético trae aparejada una nueva redefinición de la probabilidad de aceptación para el algoritmo de metrópolis, que surge de la combinación de los casos individuales de $B = 0$ y $J = 0$. Para estos casos, la probabilidad de aceptación viene dada por

$$p = p_J p_B$$

donde $p_J = \{e^{-8J^*}, e^{-4J^*}, 1, e^{4J^*}, e^{8J^*}\}$ dependiendo del valor que de la suma de los spines vecinos; y donde $p_B = \{e^{-2B^*}, e^{2B^*}\}$, siendo la primera para spin \uparrow y la segunda para spin \downarrow .

De estas simulaciones se extrajo la magnetización M y la energía E del sistema, de la misma manera que se hizo en los casos anteriores, una vez conocido el valor τ adecuado para los muestreos.

5. Fenómeno de frustración - Interacción a segundos vecinos

Finalmente se realizó el estudio del sistema en el caso que la interacción a primeros vecinos es con un acoplamiento ferromagnético, $J > 0$, y la interacción a segundos vecinos con acoplamiento antiferromagnético, $J < 0$, donde los primeros vecinos son los spines de la izquierda, derecha, arriba y abajo, y los segundos vecinos son los spines de las diagonales. Se trabajó siempre con una red de $L = 32$ y poblada inicialmente con $p = 1/2$.

En este caso, la probabilidad de aceptación del algoritmo de metrópolis se ve modificada por el agregado

de la suma de los segundos vecinos de spines, de la siguiente forma

$$p = p_{1_{ros}} p_{2_{dos}}$$

donde $p_{1_{ros}}$ es la probabilidad de aceptación del caso con $B = 0$, y la correspondiente a los segundos vecinos es igual a la de los primeros vecinos pero con el signo del exponente invertido.

Se realizaron simulaciones barriendo en J^* desde 1 hasta -1 con decrementos de 0,01 para observar si había algún cambio en el régimen para la magnetización. Se usó $B = 0$ y se tomaron 2000 datos por cada valor de J^* , cada $\tau = 175$ muestreos para descorrelacionar.

IV. Resultados

A. Importance Sampling

Del muestreo realizado a la distribución normal (no normalizada en este caso) se obtuvo una cadena de Markov de pasos x_i , los cuales, al realizar un histograma para ver de forma cualitativa su distribución, se observa que sigue la forma de la distribución normal teórica, como se ve en el figura 1. Con el fin de

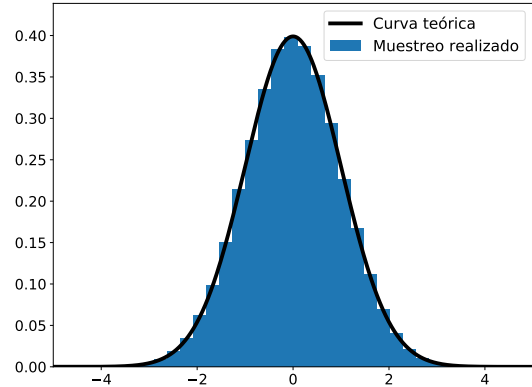


Figura 1: Distribución cualitativa de los datos de la cadena de Markov resultante del muestreo por *Importance Sampling* a la función gaussiana (no normalizada). El histograma se encuentra normalizado, mientras que la curva de trazo continuo es la función $N(0, 1)$, obviamente, normalizada.

determinar el rango de valores para el paso de exploración δ , donde el porcentaje de aceptación esté entre el 30 % y el 60 %, se obtuvo el gráfico de la figura 2. Se observa que para pasos pequeños (del orden de la unidad) el porcentaje de aceptación es muy alto, mientras que para pasos grandes (del orden de las decenas) el porcentaje de aceptación es muy bajo. En este caso

se obtuvo que para los valores de δ entre 2,2 y 5,2, se hallan los porcentajes de aceptación deseados, entre el 30 % y 60 %.

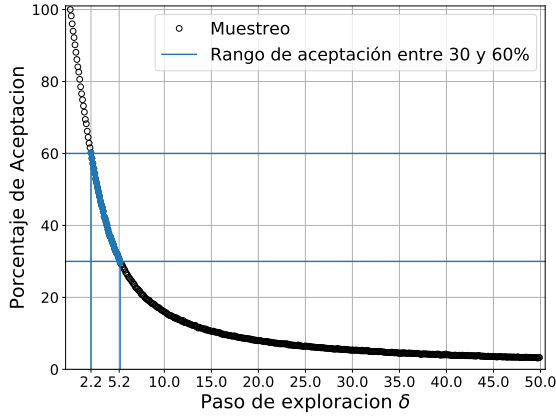


Figura 2: Porcentaje de aceptación de pasos en función de δ . Se barrió desde $\delta = 0$ hasta $\delta = 50$ con pasos de 0,01. Con $x_0 = 0$ y 100000 (cien mil) iteraciones.

Lo siguiente fue el estudio de la correlación entre los valores de la cadena. Luego de realizar los muestreos y obtener los promedios para los valores de correlación para cada k , se graficaron como se ven en la figura 3. Muy rápidamente (para $k > 10$) ya se tiene que la correlación entre pasos de la cadena de Markov es menor a 0,1, incluso para el valor de δ mayor. Por otro lado

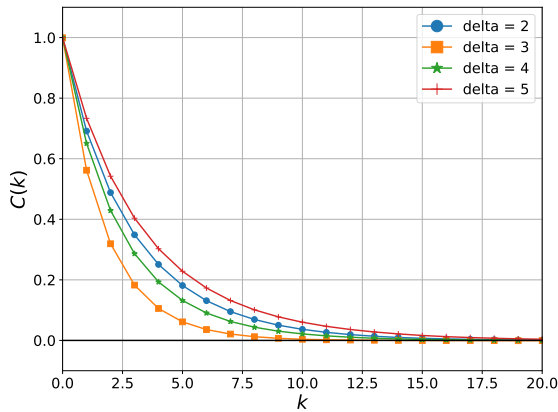


Figura 3: Correlación en función de k , con k la distancia entre dos muestras de una misma cadena de Markov. Se realiza para diferentes valores de $\delta = 2, 3, 4, 5$. Se observa que la correlación decae para los primeros 10 pasos a menos de 0,1.

se observó que la correlación, si bien se mantenía en valores muy cercanos a cero, es en promedio negativa.

En la figura 4 puede verse esta tendencia a lo largo de todos los datos obtenidos. Puede observarse también

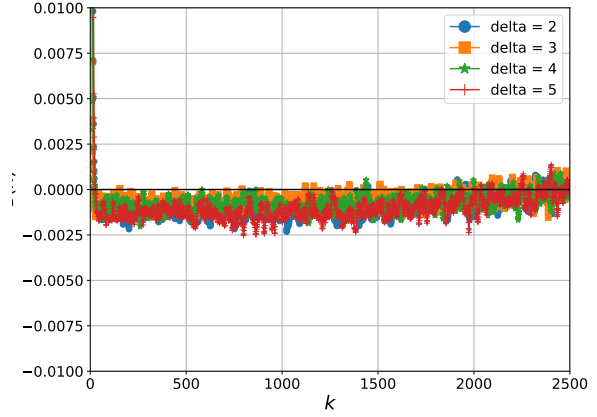


Figura 4: Gráfico completo de la correlación, para todos los k que se realizó la simulación. Presenta la correlación una tendencia cercana a cero, aunque negativa.

que para valores de $k > 2000$ la correlación comienza a tener una tendencia creciente, acercándose aún más a cero. Esta negatividad promedio puede atribuirse a errores de redondeo del programa o al hecho de que el mismo utiliza números pseudo aleatorios y no totalmente aleatorios.

Finalmente, con el fin de hallar el valor de σ^2 se realizaron las simulaciones para diferentes valores de δ . En los gráficos de la figura 5 puede verse, en línea horizontal de trazo continuo el valor teórico para σ^2 en este caso y los datos simulados. Estas curvas son el

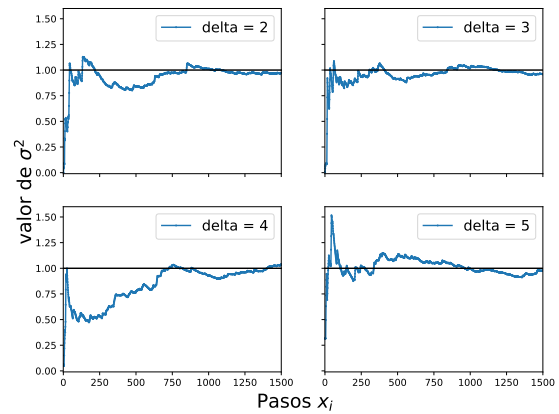


Figura 5: Gráficos del promedio acumulado para el valor de σ^2 para diferentes valores de δ . Se observa una convergencia hacia el valor real por encima de los 1000 pasos.

promedio acumulativo para el valor de σ^2 , es decir, en cada paso se sumó un dato y se calculó el promedio de estos, en el próximo paso se repite para un dato más, hasta que el promedio converge al valor real. No se puede observar claramente para qué valor de δ la convergencia es más rápida, pero sí puede apreciarse cómo para todos los valores de δ que aproximadamente para $x_i > 1000$, es decir, luego de los mil pasos, el valor estimado de σ^2 fluctúa alrededor del valor real en menos de un 10 %.

Para calcular σ^2 se utilizó entonces, como se mencionó antes, $\delta = 5$ y 100000 (cien mil) pasos, obteniendo así el resultado pedido

$$I = \sqrt{2\pi} \times 0,991$$

B. Ising 2D

1. Caso $J = 0$

De las simulaciones numéricas para el caso en el que el primer término del Hamiltoniano se anula, es decir $J = 0$, la magnetización del sistema es un efecto debido puramente a la interacción de los spines con el campo magnético externo, efecto que se sensibiliza en función de la disminución de la temperatura, como se puede ver en el gráfico de la figura 6. Se observa

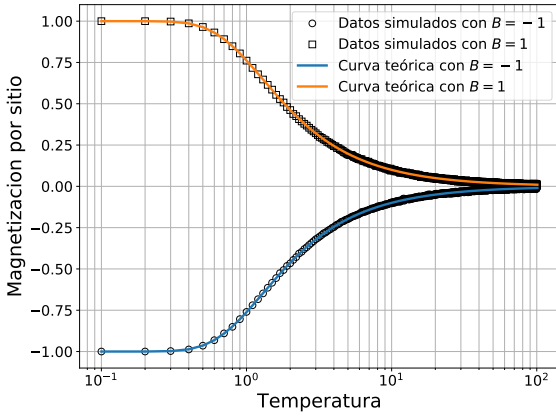


Figura 6: Magnetización media por sitio en función de la temperatura T del sistema, para campos magnéticos $B = 1$ y $B = -1$.

como la magnetización decrece desde el valor máximo hasta cero a medida que la temperatura aumenta. Esto es consistente con el hecho de que la temperatura favorece la heterogeneidad de orientaciones de spin, debido a la agitación de éstos. En esas condiciones la contribución del campo magnético en la orientación de los spines se vuelve despreciable frente al efecto de

la temperatura.

Por otro lado, puede observarse como los resultados de las simulaciones se corresponden fuertemente con la expresión para la magnetización obtenida de forma teórica, (II.9). El otro aspecto a considerar en

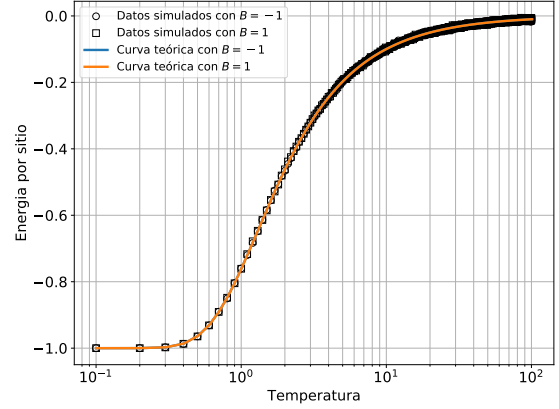


Figura 7: Energía del sistema en función de la temperatura del baño térmico. Se ve que tanto para $B = 1$ como para $B = -1$ se tiene la misma curva de energía (se superponen) tanto de forma teórica como en la simulación.

esta etapa fue la energía del sistema, que viene dada por (II.10). Se realizó el gráfico de la figura 7 donde se comparan los resultados medidos en las simulaciones, con la curva teórica. Otra vez se obtienen resultados muy coincidentes.

También nótese que para campo magnético positivo o negativo, la energía del sistema es la misma, comenzando desde un valor máximo negativo hasta alcanzar el promedio energía nula al aumentar la temperatura.

2. Caso $B = 0$

Para el caso en que la única contribución a la energía venía dada por el acoplamiento entre spines J^* , luego de realizar las simulaciones mencionadas en la sección anterior, se obtuvieron los siguientes resultados para una red de $L = 32$.

Se calculó la correlación para los datos de magnetización y energía como se detalló previamente, obteniendo los resultados que se muestran en las figuras 8a y 8b, respectivamente. Se puede observar en ambos casos la tendencia exponencial decreciente, análoga a la observada en el caso de importance sampling (Fig. 3). Se aprecia además con mucha claridad cómo las correlaciones se hacen más importantes al acercarse al punto crítico: en ambos casos (magnetización y energía), la curva de correlación tiene un decaimiento mucho más lento cuando $J^* \rightarrow J_c^* \approx 0,44$, es de

cir, cuando el parámetro de acoplamiento alcanza su punto crítico. Este efecto puede observarse de forma

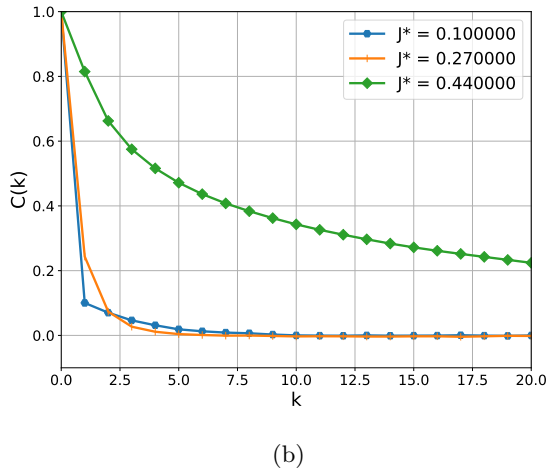
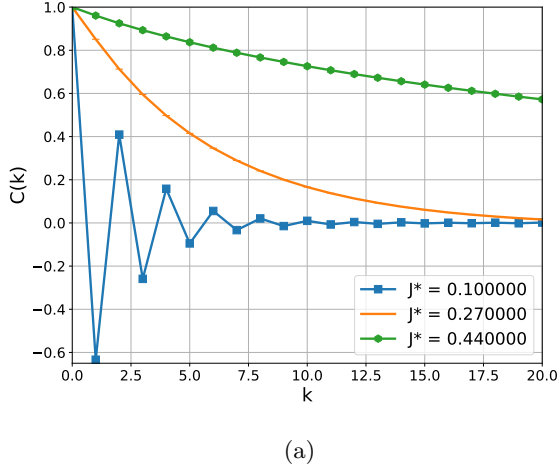


Figura 8: (a) Función de correlación para la **magnetización** para diferentes valores de J^* . (b) Función de correlación para la **energía** para diferentes valores de J^* .

cuantitativa en la figura 9. De los datos de correlación se halló el tiempo de decorrelación τ para cada valor de J^* . Se comparan las curvas de τ vs J^* para el caso de la magnetización y la energía en la figura 9.

En este gráfico no sólo se aprecia cuánto más tiempo necesita el sistema para llegar a un estado decorrelacionado cuando se encuentra cerca de la transición, pero además se puede observar una amplia diferencia entre la decorrelación correspondiente a la energía y a la magnetización de los estados. Considerando esto, se tomó el valor de τ mayor (que en este caso corresponde a $\tau_M = 175$) al momento de simular los estados para estudiar sistemas decorrelacionados. Conocido el valor de τ se tomaron los estados que estuviesen decorrelacionados entre sí para realizar el análisis

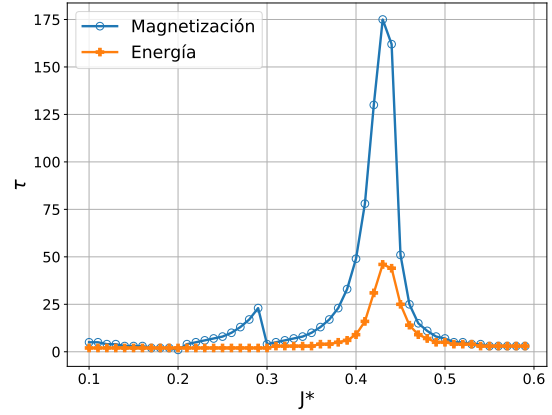


Figura 9: *Tiempo* de decorrelación en función de la constante de acoplamiento J^* . Se comparan las curvas obtenidas para la correlación de magnetización y de energía.

que sigue. En primer lugar se graficaron la magnetización y la energía en función de la constante de acoplamiento J^* , como se muestra en la figura 10. Si bien la magnetización respeta la forma funcional esperada por la teoría, la energía parecería seguir decreciendo sin estabilizarse. Se atribuye este fenómeno a defectos en el cálculo de la magnitud durante las simulaciones numéricas. En segundo lugar, se estudiaron el

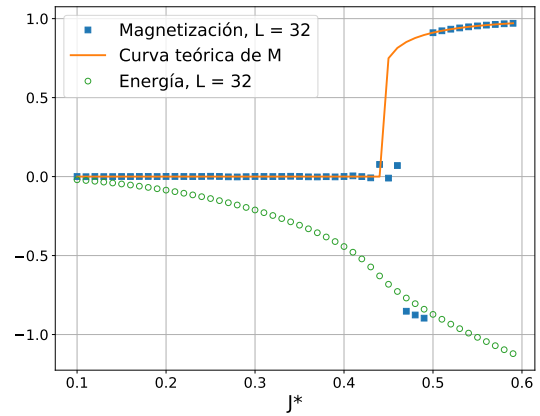


Figura 10: Energía y magnetización para una red de 32×32 en ausencia de campo magnético y en función de la constante de acoplamiento J^* .

calor específico y la susceptibilidad del sistema, como se muestra en las figuras 11a y 11b, respectivamente. Ambas magnitudes presentan la respuesta esperada al pasar por el valor de $1/J_c^*$ crítico, equivalente a la temperatura crítica T_c . Allí, ambas magnitudes divergen

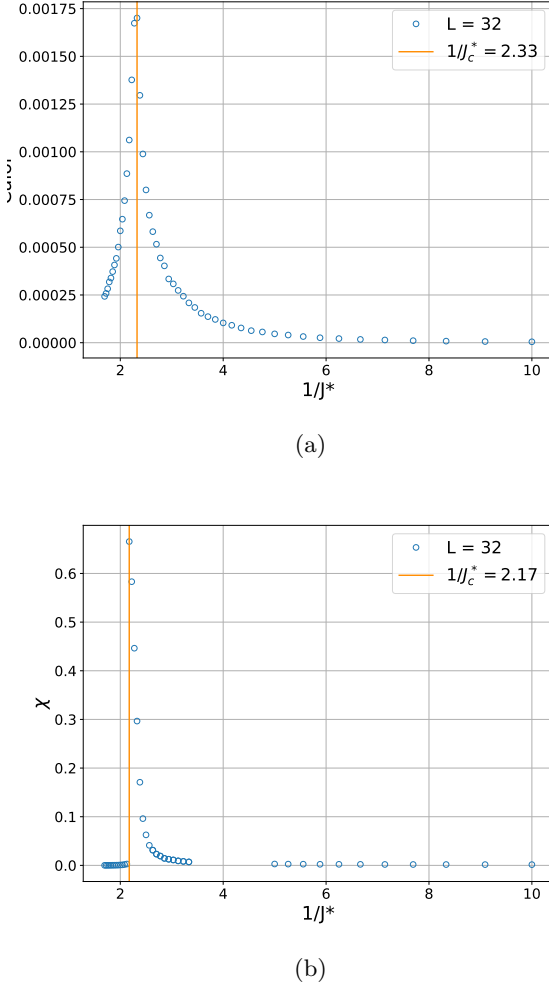


Figura 11: (a) Calor específico en función de la inversa de la constante de acoplamiento (proporcional a la temperatura). (b) Susceptibilidad en función de la inversa de la constante de acoplamiento (proporcional a la temperatura).

en amplitud. El máximo para la curva de χ se encuentra en $1/J_c^* = 2,17$, que es equivalente $J_c^* = 0,46$, lo cual es coherente con el valor estimado por la teoría de $J_c^* = 0,44$. De manera análoga, el máximo de la curva de C estima un valor crítico del acoplamiento en $J_c^* = 0,42$. Es importante notar que, además de tener su máximo en la temperatura correspondiente, el ancho del pico en ambas magnitudes es angosto, representando una baja fluctuación de M y E fuera del entorno del punto crítico.

3. Distintos tamaños de red en el caso $B = 0$

Se realizó el mismo estudio que en el caso de $L = 32$ para distintos tamaños de red, pero ajustando el valor de τ para que sea coherente con el tamaño de red

utilizado. En particular, dado que vale la ec. (III.1), usando el dato de que para $L = 32$, $\tau = 175$, se calculó que la constante de proporcionalidad sería $a \approx 0,17$. Con esto, se calcularon los valores de τ para cada L . Las magnetizaciones para los distintos tamaños de red se muestran en la figura 12, donde se muestran datos simulados y sus respectivos promedios. Se observa el comportamiento correspondiente, marcando una transición a una magnetización determinada (± 1) luego de que la constante de acoplamiento J^* atraviese su valor crítico. Asimismo se estudiaron la energía, el

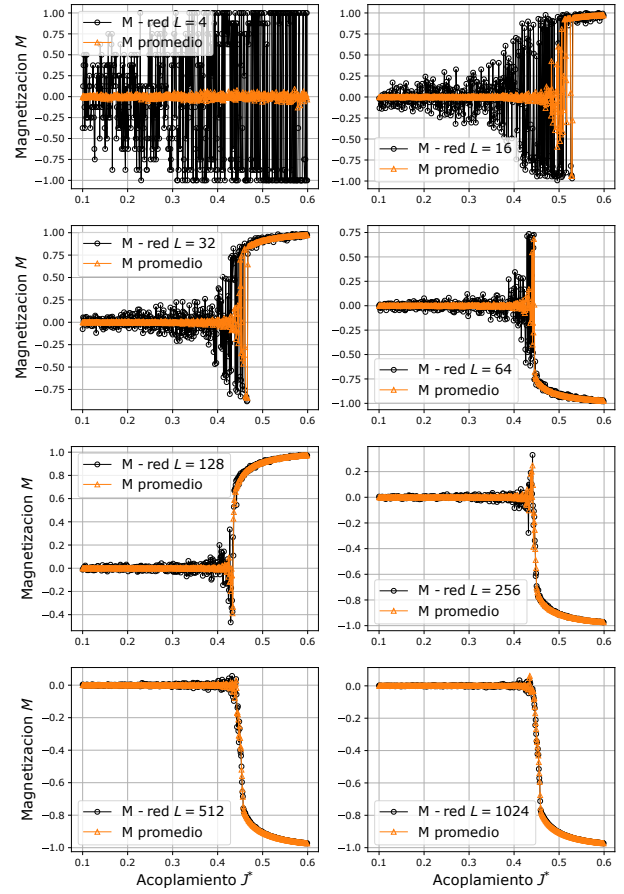


Figura 12: Gráficos de magnetización en función de la constante de acoplamiento J^* para distintos tamaños de red.

calor y la susceptibilidad para algunos de estos valores de L . En la figura 13 se muestra la energía para diferentes tamaños de red. Se observa nuevamente el fenómeno observado para el caso de $L = 32$ en que la energía no tiende a estabilizarse, atribuido a problemas en la simulación. El hecho de que el efecto se repita para los distintos valores de L fundamenta la hipótesis de que el problema se da en el momento de la simulación (ya que en todos los casos la energía fue calculada con la misma implementación de código). Finalmente, en las figuras 14a y 14b se graficaron el

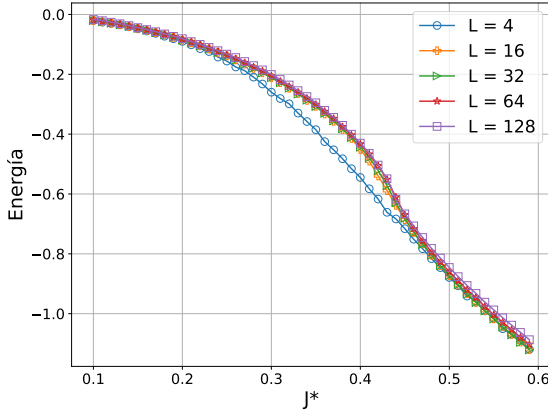


Figura 13: Gráficos de energía en función de la constante de acoplamiento J^* para distintos tamaños de red.

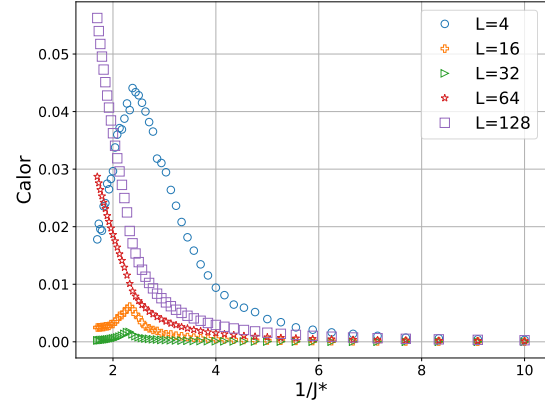
calor específico y la susceptibilidad de los distintos sistemas, respectivamente. En el caso de χ el efecto que se observa es el esperado: la divergencia de la función se acerca más al punto crítico conforme el tamaño de la red es mayor, es decir, se va corrigiendo el efecto de red finita al aumentar L . No obstante, en el caso de C sucede exactamente lo contrario, para $L = 4$ (el menor tamaño simulado) la divergencia se da para valores muy cercanos al de J_c^* , mientras que para $L = 128$ se encuentra claramente desplazado. Los valores de J_c^* en cada caso se muestran en la tabla I. Si bien este comportamiento es inesperado, reconociendo que el cálculo de C depende estrictamente de la energía que, como pudo verse, tiene conflictos con la forma funcional teórica esperada, es natural pensar que el error en este caso se arrastra desde allí.

Tabla I: Valores de J_c^* hallados según las distribuciones de χ y C para cada L .

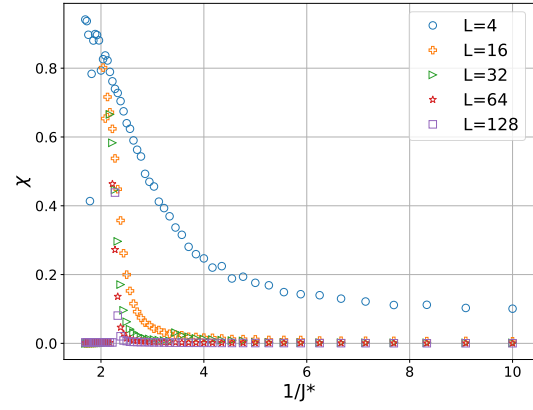
	L	J_c^*
χ	4	0.59
	16	0.49
	64	0.45
	128	0.44
C	4	0.42
	16	0.43
	64	0.59
	128	0.59

4. Caso antiferromagnético

De las simulaciones para el caso antiferromagnético se obtuvo que, en presencia de campo magnético externo,



(a)



(b)

Figura 14: (a) Calor específico en función de la inversa de la constante de acoplamiento (proporcional a la temperatura) para distintos tamaños de red. (b) Susceptibilidad en función de la inversa de la constante de acoplamiento (proporcional a la temperatura) para distintos tamaños de red.

la magnetización promedio del sistema se anula, como se ve en la figura 15.

Se presentan los resultados para las dos intensidades de campo diferentes utilizadas en las simulaciones. Ambas magnetizaciones se anulan para valores absolutos de acoplamiento grandes. Esto se debe a que, a pesar de la presencia del campo magnético, para valores de J^* no tan cercanos a cero, el acoplamiento predomina sobre la agitación térmica y la influencia del campo, generando un arreglo de spines del tipo $\uparrow\downarrow$ y anulando, en promedio, la magnetización.

La intensidad del campo magnético externo genera un corrimiento en el valor de J^* para el cual la magnetización se anula, como es de esperarse. Puede verse también, que justamente cerca de $J^* = 0$ que la dispersión de la magnetización aumenta para el ca-

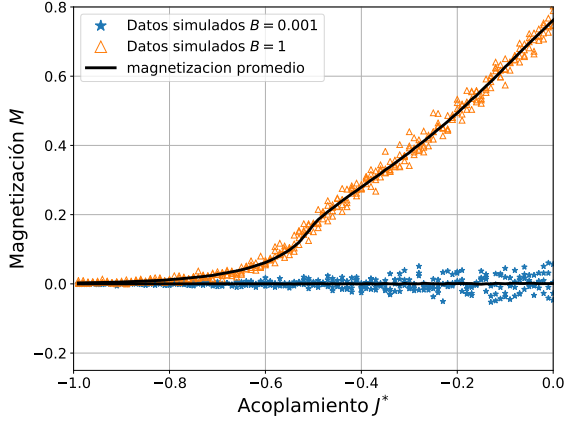


Figura 15: Magnetización simulada y promedio para el caso $J < 0$ con campo magnético externo $B = 0,001$ y para $B = 1$. Se ve que en el caso del campo magnético de baja intensidad se tiene la mayor dispersión para J^* cercanos a 0.

so del campo magnético de baja intensidad, debido a la que la agitación térmica es preponderante en este régimen. Estas fluctuaciones en la magnetización son las que llevan a que la susceptibilidad magnética χ del sistema aumente, como se ve en el gráfico de la figura 16, donde también se ve que la susceptibilidad para el caso $B = 1$ es no nula en el mismo rango, pero menor. Por último, en lo que a energía del sistema respecta, se

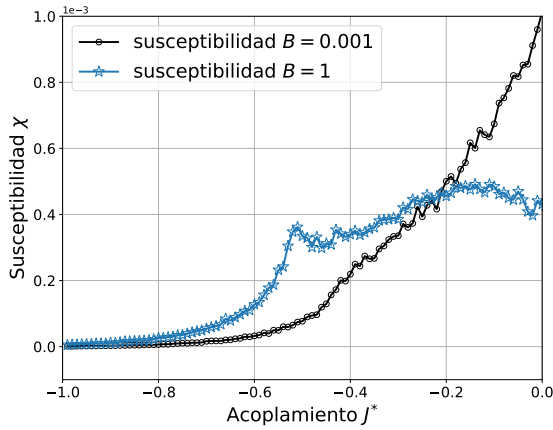


Figura 16: Susceptibilidad magnética para un sistema con acoplamiento antiferromagnético y campo magnético externo $B = 0,001$ y para $B = 1$.

ve en los gráficos de la figura 17 que para ambas intensidades de campo magnético, la forma funcional de la energía es cualitativamente similar, donde en cierta región la curva tiende a una lineal que sigue decreciendo

a medida que J^* decrece. Este es un comportamiento

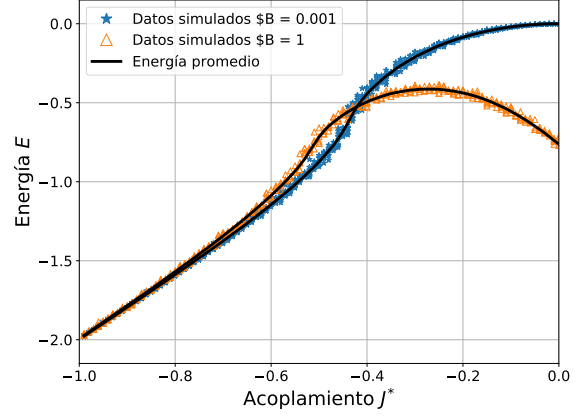


Figura 17: Energía simulada y promedio para el caso $J < 0$ con campo magnético externo $B = 0$. Se ve como decrece sin parecer estabilizarse para valores de J negativos.

inesperado para la energía, dado que indicaría que esta aumenta en valor absoluto a medida que J^* sigue disminuyendo, lo cual a su vez implica magnetización nula. Este fenómeno se atribuye, nuevamente, a algún error de cálculo durante la implementación del código del cálculo de la energía. Como resultado de esto, el calor específico resulta tener un pico donde la curva se hace aproximadamente lineal, como se ve en la figura 18.

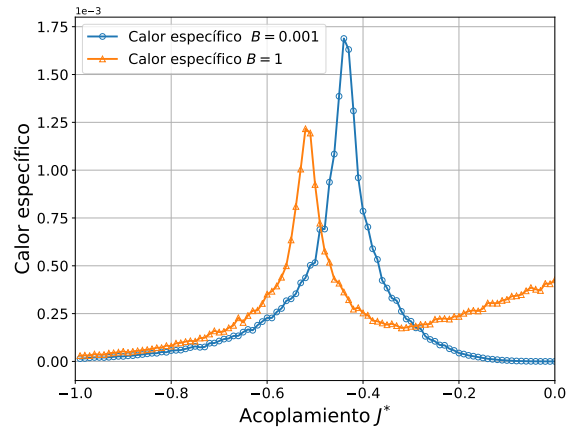


Figura 18: Calores específicos obtenidos para los sistemas con acoplamiento negativo y $B = 0,001$ y $B = 1$.

5. Fenómeno de frustración

Cuando se le impone a un sistema en ausencia de campo magnético externo la condición de que la interacción a primeros vecinos es ferromagnética pero a segundos vecinos es antiferromagnética, la magnetización que se obtiene de las simulaciones numéricas es la que se observa en el gráfico de la figura 19. Se puede ver cómo la magnetización no alcanza un

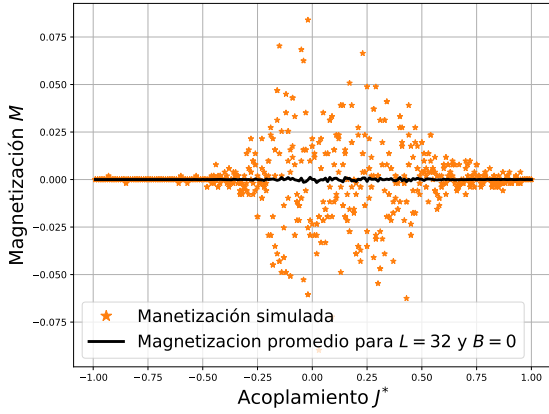


Figura 19: Magnetización en función del acoplamiento. Se ve una importante dispersión de la magnetización para valores de J^* cercanos a cero, la cual no es simétrica respecto de este valor.

valor definido a pesar de que la constante de acoplamiento atraviesa su punto crítico. Particularmente, alrededor $J^* = 0$, que equivale a temperaturas altas, la magnetización tiene mucha dispersión. En este entorno la agitación térmica de los spines (sin un campo magnético externo que los oriente) desencadena una magnetización fluctuante que, en promedio, es nula. Lejos de este entorno puede observarse que no se genera ninguna magnetización espontánea. Es ahí donde las contribuciones de los primeros vecinos sumados a las contribuciones de los segundos promedian 0 y con menos dispersión. Esto es porque, si bien la contribución neta debida al acoplamiento es nula, sigue siendo en el fondo preponderante ante la agitación térmica. Asimismo, la susceptibilidad muestra un ancho considerable en el mismo intervalo de J^* , describiendo las fluctuaciones de la magnetización en todo ese rango, como se ve en la figura 20.

C. Algoritmos alternativos

El algoritmo convencional de metrópolis puede mejorarse respecto a dos aspectos distintos. En primer lugar, el muestreo de configuraciones de un sistema

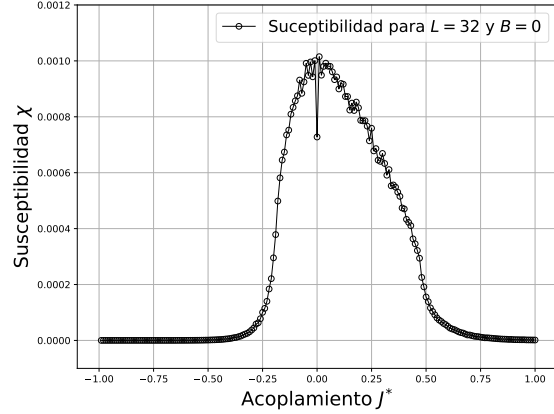


Figura 20: Susceptibilidad magnética en función del acoplamiento.

puede fallar si el estado inicial se encuentra en un mínimo de energía: dado que el perfil de energías en función de la magnetización tiene dos puntos mínimos, una vez que el sistema se encuentra en alguno de esos estados alcanza un equilibrio estable en el sentido de que es difícil transicionar a un estado de mayor energía desde allí. Por esto, es altamente improbable llegar a la otra configuración de menor energía, realizando un muestreo fiel de las posibles configuraciones del sistema.

En segundo lugar, el tiempo de decorrelación aumenta cuando estamos cerca del punto crítico y aparece el “critical slowing down”. Este efecto puede ser disminuido para lograr estados intrínsecamente diferentes en menor tiempo.

Se desarrollaron dos algoritmos alternativos que acatan estas problemáticas del algoritmo de metrópolis convencional.

1. Muestreo: algoritmo de Glauber

Para lograr que el estado del sistema evolucione a uno de mayor energía, es necesario modificar la probabilidad de transición que define el algoritmo de metrópolis. Particularmente, se busca que la probabilidad P_a de transicionar a un estado de mayor energía sea más alta. Dado que la probabilidad subyacente p^* depende únicamente del tamaño L de la red, el factor que puede modificarse para lograr el efecto es $\frac{\omega(S_{i+1})}{\omega(S_i)}$. Cualquier modificación que respete la condición de balance detallado, es válida para implementar.

Con esto en mente, Glauber propone la siguiente modificación:

$$\frac{\omega(S_{i+1})}{\omega(S_i)} \rightarrow \frac{\omega(S_{i+1})}{\omega(S_i) + \omega(S_{i+1})} \quad (\text{IV.1})$$

Se puede verificar que cumple la condición de balance detallado:

$$P_i P_{i \rightarrow j} = P_j P_{j \rightarrow i}$$

$$\omega(S_i) \frac{\omega(S_{i+1})}{\omega(S_i) + \omega(S_{i+1})} = \omega(S_{i+1}) \frac{\omega(S_i)}{\omega(S_{i+1}) + \omega(S_i)}$$

Entonces, es válido realizar esta modificación.

Este nuevo factor puede reescribirse en función de la diferencia de energía entre estados de la siguiente forma:

$$\frac{\omega(S_{i+1})}{\omega(S_i) + \omega(S_{i+1})} = \frac{1}{1 + \frac{\omega(S_i)}{\omega(S_{i+1})}} = \frac{1}{1 + e^{\beta \Delta E}} \quad (\text{IV.2})$$

Si además se desarrolla el exponente:

$$\begin{aligned} \beta \Delta E &= \beta [H_{i+1} - H_i] \\ &= 2S_{i,j} [J^*(S_{i+1,j-1} + S_{i-1,j+1} \\ &\quad + S_{i+1,j+1} + S_{i-1,j-1}) + B^*] \\ &= 2S_{i,j} [J^* f + B^*] \end{aligned} \quad (\text{IV.3})$$

y se define $g \equiv 2[J^* f + B^*]$, entonces se puede reescribir la ec. (IV.2) como

$$\frac{\omega(S_{i+1})}{\omega(S_i) + \omega(S_{i+1})} = \frac{1}{1 + g^{S_{i,j}}} \quad (\text{IV.4})$$

Con este nuevo factor, las transiciones de spin se dan con las probabilidades como se muestra en la tabla II.

Tabla II: Probabilidades de transición de spines

Spin actual	Spin nuevo	P_a
-1	-1	$g/(1+g)$
-1	+1	$1/(1+g)$
+1	-1	$g/(1+g)$
+1	+1	$1/(1+g)$

Analizando estos resultados, se puede ver que la probabilidad de transición es idéntica cuando el spin nuevo es el mismo, es decir, ya no importa de qué spin viene, se le está asignando a cada lugar la probabilidad de tener un spin up o uno down. Por lo tanto, el algoritmo de Glauber es equivalente al algoritmo de *baño térmico* y logra aumentar la probabilidad de realizar un muestreo completo de los estados del sistema.

2. Tiempo de descorrelación: algoritmo de Swemsem - Wang

Una forma de disminuir el tiempo de descorrelación cerca del punto crítico es tratar de evitar la inversión de spines uno por uno. Para esto, Swemsem desarrolló un criterio que permite invertir varios spines simultáneamente, teniendo el cuidado de que los conjuntos (conglomerados) que fuesen invertidos al mismo tiempo, sean representativos. Es decir, se definen los conglomerados de forma tal que la inversión de los spines en ellos represente un cambio de estado a otro de distinta energía.

El criterio que describe Swemsem es el siguiente: se toman los *clusters* de spines que tienen la misma orientación. Luego, dentro de esos conjuntos, se definen *links* entre ellos con probabilidad $p = 1 - e^{-\beta J}$. Como esta unión es dependiente de una probabilidad, no todos los spines pertenecientes a un mismo fragmento quedarán *linkeados* a los demás. Esto forma los conglomerados. Finalmente, se invierten solo los spines que están *linkeados* a los demás. Así, se logra la inversión simultánea de varios spines utilizando conglomerados representativos.

Con este método, el factor z que escala el tiempo de descorrelación τ ($\tau \sim |T - T_c|^z$) pasa de ser $z = 2,16$ (caso Ising 2d) a $z = 0,35$. Entonces, el método logra de forma efectiva disminuir el tiempo en que se obtienen dos estados distintos.

No obstante, es importante notar que z es un exponente crítico dinámico del sistema y, por lo tanto, debería respetar la cota inferior teórica dada por el modelo de Ising en 2d, $z \geq 7/4$, pero esto no es así implementando este algoritmo. Como se discutió en el informe de percolación[4], los exponentes críticos definen universalidades y, por lo tanto, todos los sistemas con los mismos exponentes comparten las mismas propiedades estadísticas. El hecho de que el exponente crítico z rompa con lo esperado para la universalidad propia del sistema de Ising 2d, da la pauta de que el conglomerado por *links* define una universalidad distinta.

V. Conclusiones

Se pudo implementar el método de importance sampling y se corroboró su fidelidad al muestrear la función distribución gaussiana, que para un orden de magnitud no superior a las miles de muestras ya obtiene resultados con menos del 10 % de error y de forma significativamente rápida. Asimismo se pudo ver que con tan solo 10 muestras ya se tiene una correlación menor a 0,1.

En cuanto al estudio del modelo de Ising 2d se puede concluir que se observaron satisfactoriamente las

predicciones de la teoría con las simulaciones numéricas, tanto para la función correlación como para la magnetización, energía, calor específico y susceptibilidad. Salvo en los casos patológicos (correspondientes al estudio de distintos tamaños de red), se encontraron buenas aproximaciones al valor crítico de los parámetros correspondientes.

También fue posible hallar los tiempos de descorrelación estudiando una red de 32×32 y aplicando la teoría para estimar los correspondientes a otros tamaños de red. Se pudo observar cómo esta magnitud aumentaba notablemente conforme el sistema se aproximaba a la transición de fase. Además, estudiando este parámetro en términos de magnetización y energía se observó que hay una amplia diferencia entre ambos: mientras que dos estados del sistema pueden estar descorrelacionados en términos de energía, podrían no estarlo en términos de magnetización.

Para el caso en el que se estudió el acoplamiento antiferromagnético con campo magnético externo fini-

to, se observó que la intensidad del campo magnético juega un papel en retrasar la desaparición de la magnetización, mientras haya balance entre la intensidad de éste y del acoplamiento. Cuando el acoplamiento se vuelve muy grande (en los negativos) le gana al campo magnético externo haciendo que los spines promedien magnetización nula. Por otro lado, se obtuvieron resultados inesperados para la energía y el calor específico, atribuidos a errores en la implementación del cálculo de la energía.

Por otra parte, se observó el fenómeno de frustración cuando el sistema se encuentra en un régimen que favorece la fluctuación de la orientación de los spines y sin un campo externo que los influencie. Particularmente, la magnetización y la susceptibilidad magnética fueron parámetros descriptivos de este efecto.

Por último, el estudio de los algoritmos de Glauber y Swensson-Wang dieron lugar a nuevas perspectivas que permitirían a futuro implementar simulaciones numéricas más optimizadas que las utilizadas en este trabajo.

-
- [1] varios. Ising model. https://en.wikipedia.org/wiki/Ising_model, - -. -.
- [2] David Tong. *Lectures on Statistical Physics*, pages 147–155. -, 2012.

- [3] Lars Onsager. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Physical Review*, 65(3 and 4):100, 1944.
- [4] I. Gómez Florenciano P. Caral. Percolacion de nodos en redes cuadradas 2d. Technical report, Universidad de Buenos Aires - Departamento de Física, 1er cuatrimestre 2019.