Simulación Computacional del Modelo de Ising 2D mediante el Algoritmo de Metropolis-Hastings dentro del enfoque Monte Carlo en Cadenas de Markov

Autores: Sharith Pinzón, Angie Sandoval, Jorge Silva, Ingri Díaz.

Universidad Industrial de Santander

Cadena de Markov

Una cadena de Markov es un proceso estocástico donde el estado futuro depende solo del estado presente. Su evolución está dada por probabilidades de transición entre estados y, tras suficientes iteraciones, converge a una distribución estacionaria independiente del estado inicial. En este proyecto, esta cadena describe la evolución temporal de las configuraciones de espines que se muestrean en la simulación.

Modelo Ising

En nuestro contexto, el modelo de Ising describe un conjunto de espines dispuestos en una red, donde cada espín interactúa únicamente con sus vecinos más cercanos. Esta interacción local produce configuraciones que pueden ser ordenadas o desordenadas, dependiendo del balance entre energía y temperatura.

¿Por qué utilizar MCMC para el modelo de Ising 2D?

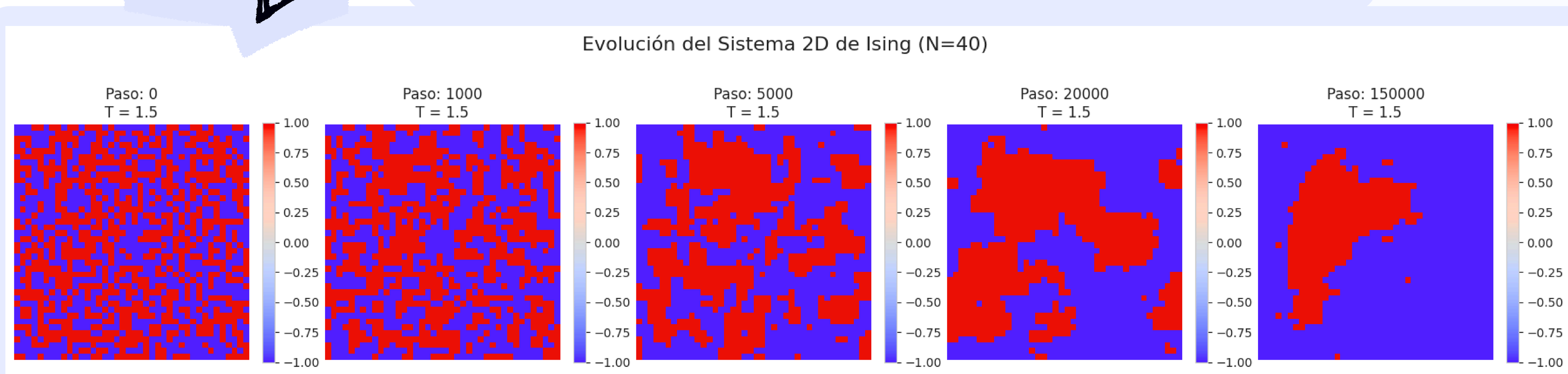
El espacio de estados del modelo de Ising crece exponencialmente, por lo que es imposible de recorrerlo por completo. MCMC permite evitar esta enumeración construyendo una cadena de Markov que visita con mayor frecuencia los estados más probables. El algoritmo de Metropolis concentra el muestreo en configuraciones relevantes, convirtiendo una suma inabordable en un procedimiento eficiente de muestreo.

Optimización del muestreo: Burn-in (k)

En MCMC, las primeras configuraciones reflejan la condición inicial y no el equilibrio, por lo que deben descartarse. Este período, llamado burn-in, corresponde al tiempo que tarda la cadena en alcanzar su distribución estacionaria.

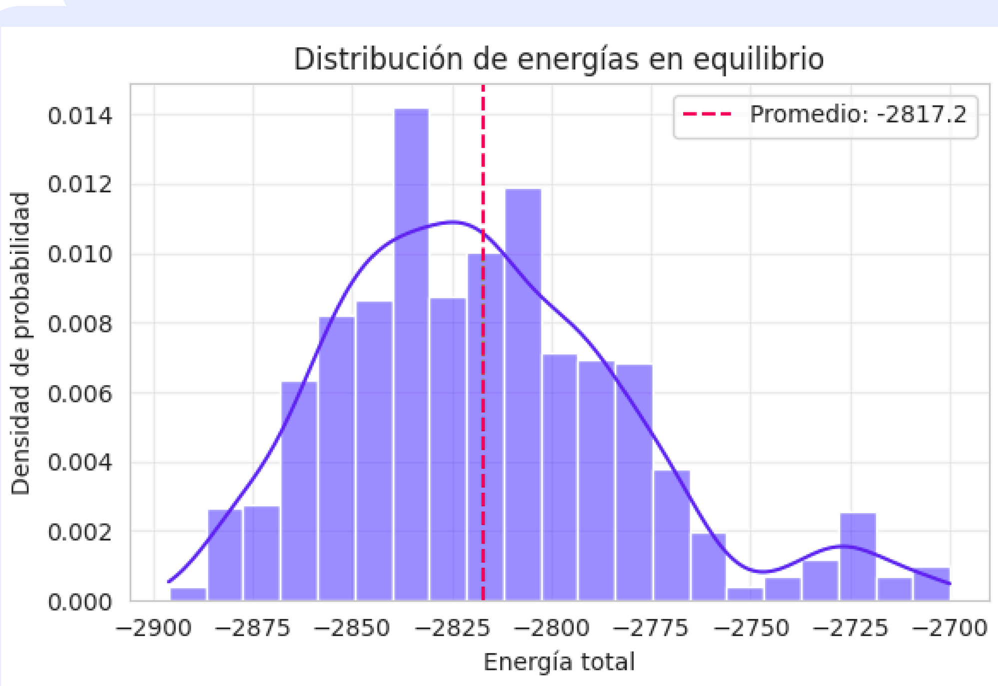
El tamaño k se determina observando cuándo variables como la energía o la magnetización se estabilizan. En la práctica, suele ser una fracción del total de pasos o el punto donde las curvas dejan de mostrar tendencia y comienzan a fluctuar alrededor de valores estables.

Simulación de la evolución de los espines




```python
class Ising2D_Completo:
    # ... (código previo omitido para brevedad)
    def paso_metropolis(self):
        """Un paso del algoritmo de Metropolis"""
        i, j = np.random.randint(0, self.N), np.random.randint(0, self.N)
        s_ij = self.espines[i, j]
      # Vecinos con condiciones periódicas.
        vecinos = (self.espines[(i+1)%self.N, j] +
                   self.espines[(i-1)%self.N, j] +
                   self.espines[i, (j+1)%self.N] +
                   self.espines[i, (j-1)%self.N])
        delta_E = 2 * self.J * s_ij * vecinos
      # Criterio de Metropolis.
        if delta_E < 0 or np.random.random() < np.exp(-delta_E * self.beta):
            self.espines[i, j] *= -1
            self.energia += delta_E
            return True
        return False
    # ... (código posterior omitido para brevedad)
```

Distribución de probabilidad de Boltzmann



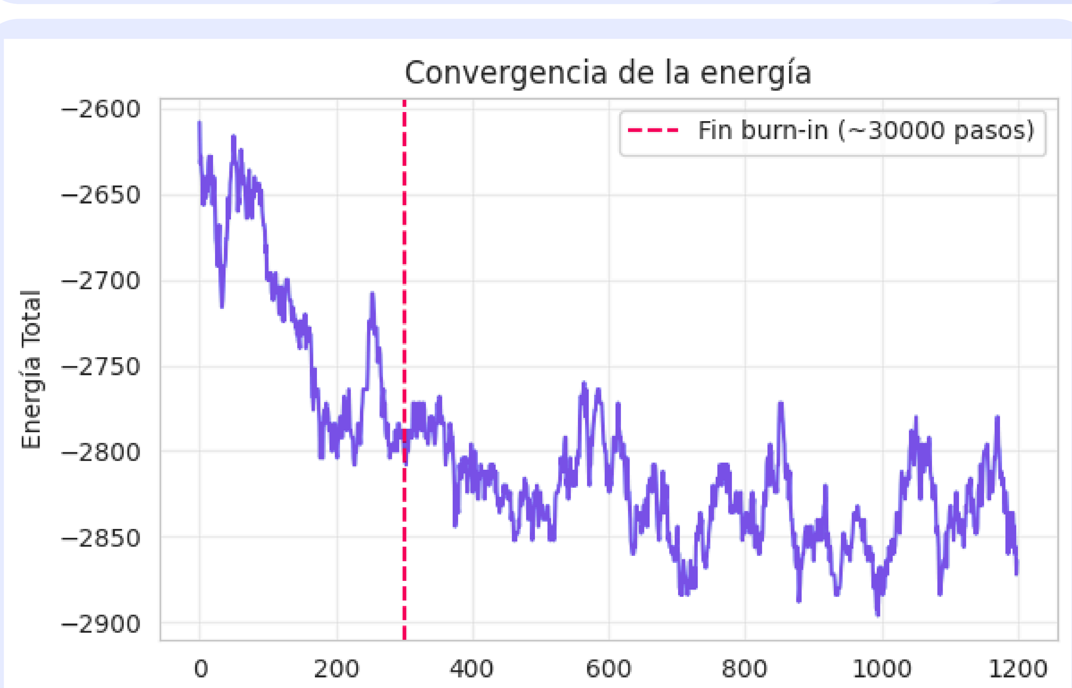
En un sistema físico en equilibrio térmico, como el modelo de Ising que simulamos, las configuraciones posibles no son todas igualmente probables. Esta distribución de probabilidades está gobernada por la ley de Boltzmann:

$$P(\mu) = \frac{1}{Z} e^{-E_\mu k/_B T} \longrightarrow$$

E_μ: es la energía de la configuración.

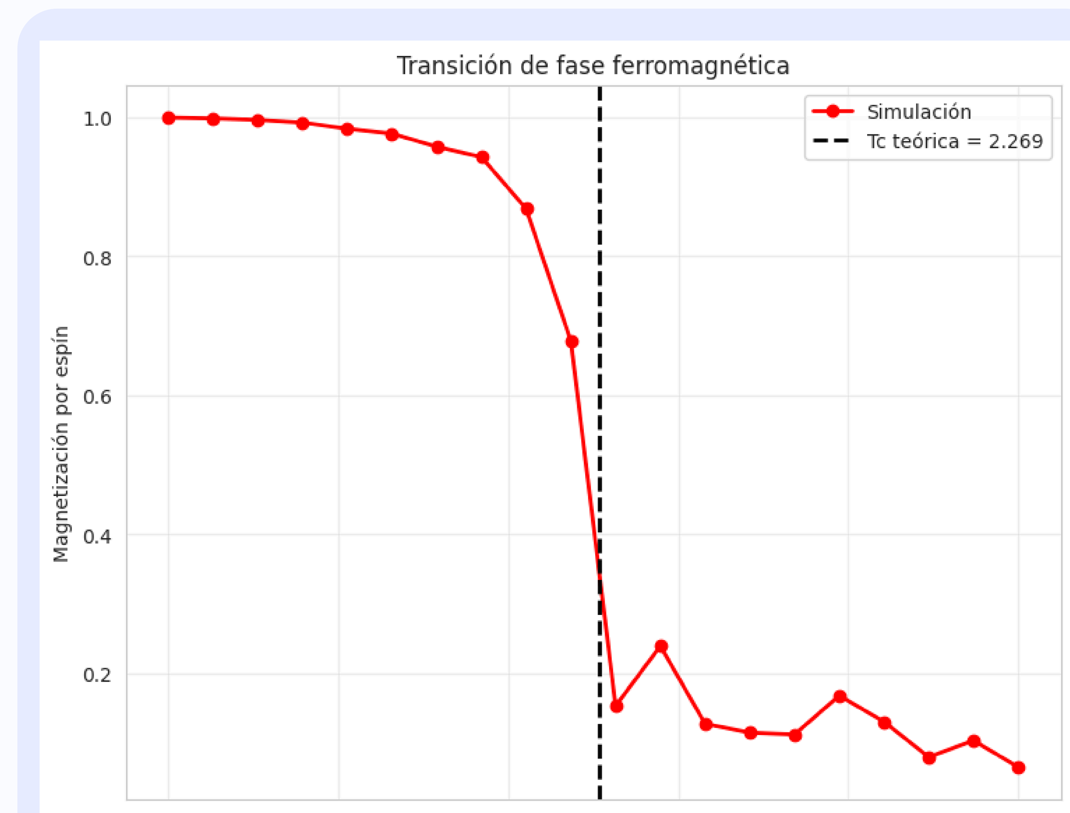
Z: la función de partición.

Convergencia de la energía



Tras el burn-in (~30.000 pasos), la energía total del sistema fluctúa en torno a un valor promedio. Estas variaciones indican que se alcanzó el equilibrio térmico, lo que permite calcular observables físicos de forma confiable.

Ej: Transición de fase Ferromagnética



A bajas temperaturas el sistema permanece ordenado (M≠0), mientras que cerca de Tc la magnetización cae abruptamente hacia cero, indicando la transición del estado ferromagnético al paramagnético.

Conclusiones

La simulación del modelo de Ising 2D mediante el algoritmo de Metropolis-Hastings permitió estudiar el comportamiento térmico del sistema y observar su transición de fase. La evolución de la energía y la magnetización mostró que el sistema alcanza equilibrio y sigue la distribución de Boltzmann, validando el enfoque MCMC como una herramienta eficiente y precisa para explorar sistemas físicos complejos.

Referencias: [1] Hastings, W. K. "Monte Carlo Sampling Methods Using Markov Chains and Their Applications." Biometrika, 57, 97–109 (1970).

[2] Landau, D. P., & Binder, K. A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics. Cambridge University Press, 2005.