

Simulación Monte Carlo del modelo de Ising con el algoritmo de Metropolis

Manuel Fernando Sánchez Alarcón,^{1*}

¹ Universidad de los Andes, Bogotá, CO

30 de junio de 2024

ABSTRACT

En este trabajo se presentan los resultados de una simulación de Monte Carlo del Modelo de Ising en dos dimensiones usando el algoritmo de Metropolis para una red de 20×20 espines, con una cantidad de iteraciones de 1×10^6 y con un rango de temperatura adimensional desde los 0,8 hasta los 4,0. Se lograron simular, con algo de exactitud las curvas de energía por espín y magnetización por espín contra temperatura que la literatura generalmente reporta, así como la transición de fase que se puede ver en la magnetización de este sistema en la temperatura crítica característica $T = 2,2692$. Así mismo se proponen algunas causas y soluciones que permitan que la diferencia entre lo teórico y lo calculado a través del algoritmo de metrópolis sea casi nula. El código usado para obtener estos resultados experimentales se encuentra alojado en https://github.com/Spoksonat/Modelo_de_Ising_2D.

Key words: Ising – Metropolis – Magnetización – Energía

1 INTRODUCCIÓN

El modelo de Ising es un modelo que pretende describir el comportamiento de un material ferromagnético en una, dos o incluso más dimensiones, describiéndolo como una red de espines que interactúan con sus vecinos más cercanos. La energía H del sistema para cualquier dimensión sin tener en cuenta un campo magnético externo se define como:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j$$

donde J denota un factor de interacción entre espines, s_i representa el estado de spin (en z) de una partícula de spin $1/2$ ($s_i = 1, -1$) y $\sum_{\langle i,j \rangle}$ es una suma sobre los espines vecinos más cercanos. Por otra parte la magnetización por espín M , entendida como una densidad de momentos magnéticos, es definida para una red de N espines como:

$$M = \frac{1}{N} \sum_i s_i$$

En 1944 Lars Onsager dio una solución analítica para este modelo en dos dimensiones mostrando que, a diferencia del modelo en una dimensión, existe una transición de fase a una temperatura T_c tal que:

$$\sinh\left(\frac{2J}{k_B T_c}\right) = 1. \quad (1)$$

Una forma más clara de ver esta transición de fase se muestra en la Figura 1, en donde se observa que, a medida que se aumenta la temperatura, la magnetización disminuye (en magnitud) continuamente hasta cero en $T = T_c$ y por lo tanto

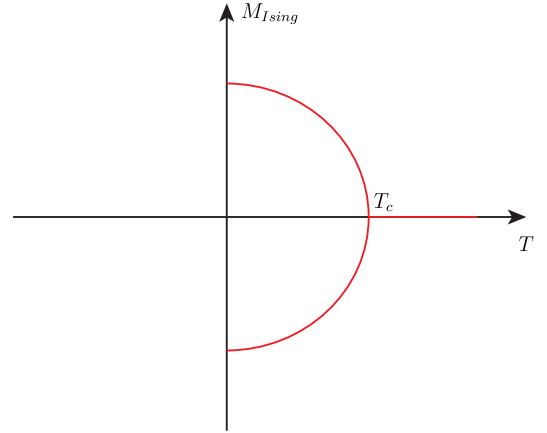


Figure 1. Magnetización vs Temperatura para modelo de Ising en dos dimensiones. Tomado de Tamura et al. (2012).

es una transición de fase de segundo orden. También en la Figura 2 se observa un ejemplo de la energía por espín del sistema contra la temperatura para una red de 10×10 sitios.

Sin embargo, también existen métodos numéricos/computacionales que pueden ayudar a encontrar ciertas cantidades relacionadas con el modelo, como la energía promedio y la magnetización por espín a través de algoritmos. Uno de estos algoritmos es el conocido como *Algoritmo de Metropolis* (AM).

Este algoritmo se basa en métodos de Monte Carlo (MC) en los que números aleatorios son usados para aproximar expresiones matemáticas de gran complejidad. Pero, a diferencia de MC en el que las posibles configuraciones de un sistema pueden ser equiprobables, en el AM se asocia un pe-

* E-mail: mf.sanchez17@uniandes.edu.co

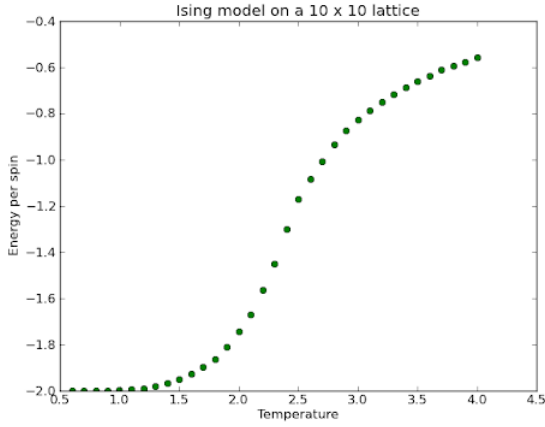


Figure 2. Energía por espín vs Temperatura para modelo de Ising en dos dimensiones en una red de 10×10 espines. Tomado de [University \(University\)](#).

so estadístico a cada configuración. En el caso del modelo de Ising de dos dimensiones, el peso estadístico usado se encuentra asumiendo la condición de *balance detallado* entre las probabilidades de que el sistema de espines se encuentre en una configuración C_1 ($P_{eq}(C_1)$), en que se encuentre en una configuración C_2 ($P_{eq}(C_2)$), la probabilidad de pasar de la configuración C_1 a C_2 ($W(C_1 \rightarrow C_2)$) y la probabilidad de pasar de la configuración C_2 a C_1 ($W(C_2 \rightarrow C_1)$). El distintivo "eq" en $P_{eq}(C_1)$ y $P_{eq}(C_2)$ indica que las probabilidades se asumen estacionarias, es decir, no evolucionan en el tiempo. En este estado estacionario, la probabilidad $P_{eq}(C_j)$ de que el sistema de espines se encuentre en una configuración C_j puede ser escrita, por definición, como:

$$P_{eq}(C_j) = \sum_i P_{eq}(C_i) W(C_i \rightarrow C_j),$$

donde el subíndice i recorre todas las posibles configuraciones del sistema. Usando la condición de normalización para probabilidades $\sum_i W(C_j \rightarrow C_i) = 1$ se puede llegar a que:

$$\begin{aligned} P_{eq}(C_j) &= P_{eq}(C_j) \sum_i W(C_j \rightarrow C_i) \\ &= \sum_i P_{eq}(C_j) W(C_j \rightarrow C_i) \\ &= \sum_i P_{eq}(C_i) W(C_i \rightarrow C_j). \end{aligned}$$

Esta anterior relación se conoce como *balance detallado global*. Una condición suficiente asociado al balance detallado global es que se cumpla que:

$$P_{eq}(C_j) W(C_j \rightarrow C_i) = P_{eq}(C_i) W(C_i \rightarrow C_j),$$

que es conocida como *condición de balance detallado* [Statweb \(Statweb\)](#). Como se dijo anteriormente, teniendo ya esta condición de balance detallado y sabiendo que $P_{eq}(C_i) = \exp\{-\beta H(C_i)\}/Z$, con $H(C_i)$ la energía asociada a la configuración C_i y Z la función de partición canónica del sistema, el peso estadístico p se define como:

$$\begin{aligned} \mathcal{P} &= \frac{W(C_2 \rightarrow C_1)}{W(C_1 \rightarrow C_2)} = \frac{P_{eq}(C_1)}{P_{eq}(C_2)} = e^{-\beta(H(C_1) - H(C_2))} \\ &= e^{-\beta \Delta E}, \end{aligned}$$

Parámetro	Valor
J	1
n	1×10^6
k	1
T_c	2.2692

Table 1. Parámetros del AM para todas las simulaciones realizadas.

donde $\Delta E = H(C_1) - H(C_2)$. Con estos conceptos claros, el AM se ejecuta a través de la implementación de los siguientes pasos¹:

1. Se genera una configuración de espines al azar.
2. Se selecciona al azar un espín de la red.
3. Se calcula ΔE si el espín seleccionado anteriormente cambia de estado.
4. Si $\Delta E \leq 0$ se acepta el cambio de estado del espín y se devuelve al paso 2.
5. Si $\Delta E > 0$ se genera un número aleatorio $p \in [0, 1]$ con probabilidad uniforme y si $p < \mathcal{P}$ se acepta el cambio de estado del espín seleccionado. De lo contrario no se acepta y se regresa el espín a su estado original.
6. Se repite todo el proceso n veces a partir del paso 2.

Como se puede observar de los pasos del algoritmo y asumiendo que la probabilidad de obtener $\Delta \leq 0$ es la misma que la de obtener $\Delta > 0$, que es de $1/2$, entonces hay dos posibles caminos para que un espín cambie de estado. El primero es que se cumpla el paso 4 y el segundo es que se cumpla la primera condición del paso 5. La probabilidad de que el primero se cumpla es, como se dijo, de $1/2$, mientras que probabilidad asociada al segundo es $\frac{1}{2}e^{-\beta \Delta E}$. Esto quiere decir que la probabilidad P_{spin} de que un espín cambie de estado es

$$P_{spin} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}e^{-\beta \Delta E} = \frac{1}{2}(1 + e^{-\beta \Delta E}).$$

Una vez conociendo los pesos estadísticos y probabilidades asociadas al AM, ya es posible implementarlo computacionalmente para poder encontrar cantidades como la Energía y la Magnetización de un sistema de espines interactuantes bajo el modelo de Ising. La implementación se detallará a continuación.

2 SIMULACIÓN Y RESULTADOS

Se implementó el AM para una red de espines cuadrada de dos dimensiones en Python3, con los parámetros mostrados en la Tabla 1. Las unidades de J (que son unidades de energía) y de $k_B T$ se omiten dado que en la Ecuación 1 no importa qué unidades se usen, ya que el argumento dentro del seno hiperbólico es adimensional. De igual forma se asume $k_B = 1$, tratando de imitar un tratamiento del problema con unidades naturales. Se crearon una serie de funciones auxiliares para poder ejecutar el AM en Python3, tanto para

¹ Los pasos del algoritmo se obtuvieron directamente del enunciado de la tarea y se adaptaron a las variables definidas en este trabajo.

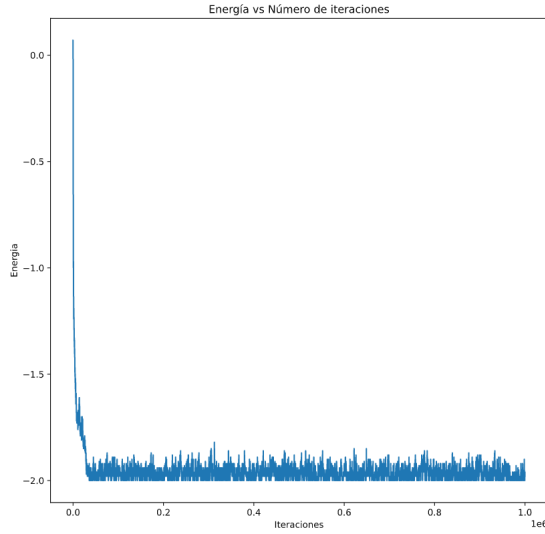


Figure 3. Energía por espín vs número de iteraciones a $T = 1,4$ para modelo de Ising en dos dimensiones.

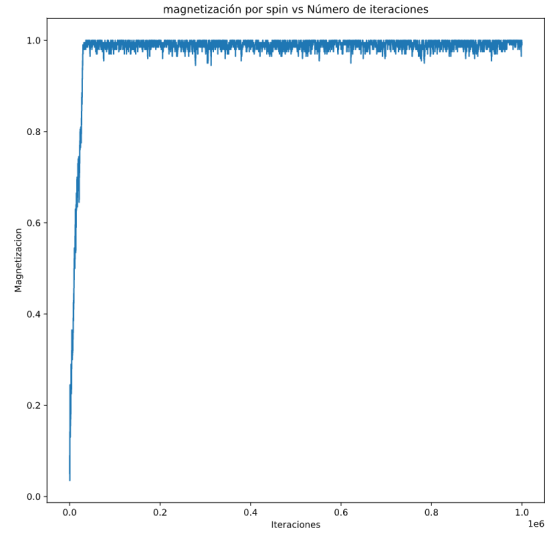


Figure 4. Magnetización por espín vs número de iteraciones a $T = 1,4$ para modelo de Ising en dos dimensiones.

crear una red de espines aleatoria de cierto tamaño, hallar la energía y magnetización por espín del sistema como también para ejecutar el AM. Estas funciones están explicadas en el código, presente en el archivo *Algoritmo_Metropolis.ipynb* (cuaderno de Jupyter). La función que ejecuta todo el AM salvo el primer paso se llama *metropolis* y recibe como argumentos la red inicial de espines, creada con la función *red* y la temperatura del sistema. La salida de la función *metropolis* son las energías del sistema de espines en cada iteración del algoritmo, las magnetizaciones por espín y las energías y magnetizaciones promedio del último 30 % de los datos, que demostraron ser, por lo menos visualmente, los datos para los cuales la red ya se había estabilizado (la energía presentaba un valor constante salvo pequeñas oscilaciones). El primer resultado obtenido fueron las gráficas de energía por espín, magnetización por espín y el estado final de la red para una temperatura de $T = 1,4$, que se encuentra por debajo de la temperatura crítica, contra el número de iteraciones del AM. Las gráficas se muestran respectivamente en las Figuras 3, 4 y 5.

El segundo resultado obtenido fueron las gráficas de energía por espín, magnetización por espín y el estado final de la red para una temperatura de $T = 3,5$, que se encuentra por encima de la temperatura crítica, contra el número de iteraciones del AM. Las gráficas se muestran respectivamente en las Figuras 6, 7 y 8.

El tercer resultado que se obtuvo fueron las gráficas de energía promedio por espín y magnetización promedio por espín (sin y con valor absoluto) contra la temperatura del sistema. Las temperaturas usadas están en un rango de $T = 0,8$ a $T = 4,0$, cubriendo así valores que están tanto por encima como por debajo de la temperatura crítica. Las gráficas se muestran en las Figuras 9, 10 y 11 respectivamente. En estas gráficas la línea roja vertical indica el valor de temperatura crítica calculado teóricamente con la Ecuación (1).

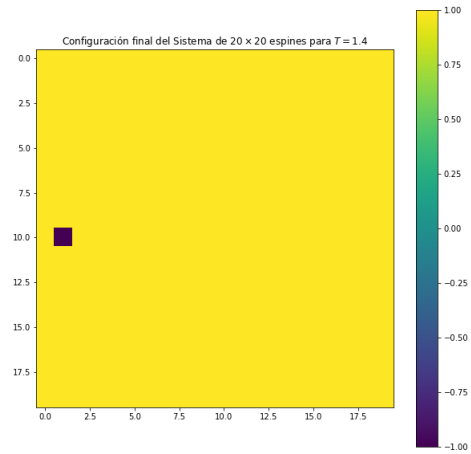


Figure 5. Estado final de la red de espines para $T = 1,4$. El color amarillo significa espín arriba $s_i = 1$ y el morado espín hacia abajo $s_i = -1$, como se muestra en la barra de colores de la gráfica.

3 ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS

Lo primero que hay que destacar son los resultados mostrados en las Figuras 5 y 8. Para la configuración final a $T = 1,4$ se observa que, salvo un solo espín, todos están alineados en la misma dirección. Por otra parte, para $T = 3,5$ se observa todo lo contrario, ya que hay casi tantos espines hacia arriba como hacia abajo, mostrando una red completamente desordenada. Esto concuerda con los resultados presentados en la literatura, expresados en la Figura 1, ya que se espera que a temperaturas bajas la magnetización, que se podría ver como una medida indirecta del orden o alineación simultánea de los espines, sea grande, mientras que para temperaturas altas es cero. Por otra parte, se observa que tanto las energías como las magnetizaciones para las Figuras 3, 4, 6 y 7 convergen

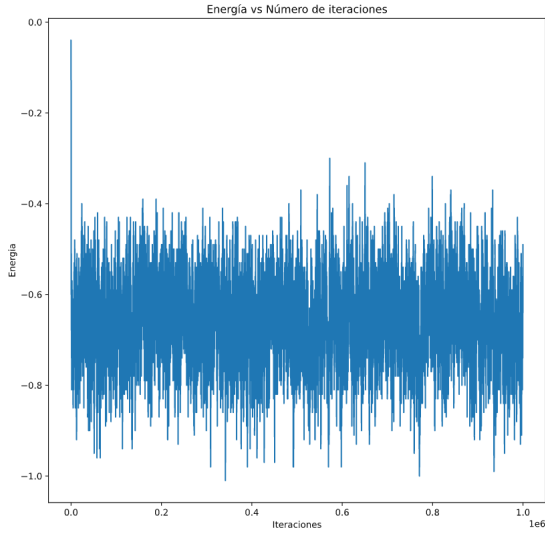


Figure 6. Energía por espín vs número de iteraciones a $T = 3,5$ para modelo de Ising en dos dimensiones.

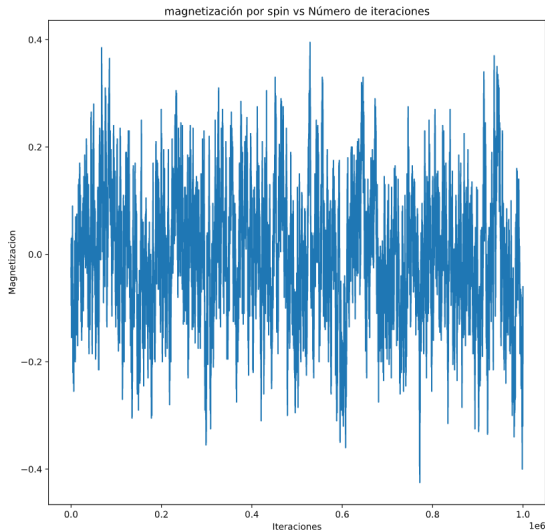


Figure 7. Magnetización por espín vs número de iteraciones a $T = 3,5$ para modelo de Ising en dos dimensiones.

a valores constantes salvo fluctuaciones luego de un determinado número de iteraciones. Estas fluctuaciones son más pronunciadas a medida que se aumenta la temperatura. Esto se puede deber a que, como se sabe de la curva de magnetización teórica, entre más alta sea la temperatura, más van a tender a desalinearse los espines y por ende, más va a cambiar la configuración en el tiempo, por lo que un conjunto de configuraciones cercanas de la red diferirán más entre más alta sea la temperatura. De la gráfica 4 a $T = 1,4$ se observa además que el valor al que converge la magnetización por espín es cercano a uno (en general distinto de cero), mientras que para la magnetización de la Figura 7 a $T = 3,5$ se observa que en promedio oscila cerca al cero (coloquialmente se podría decir que hay tantos picos hacia arriba como abajo y por lo tanto las contribuciones de cada uno de estos picos se cancelarán entre sí al promediarlas). Estos último también concuerda con la

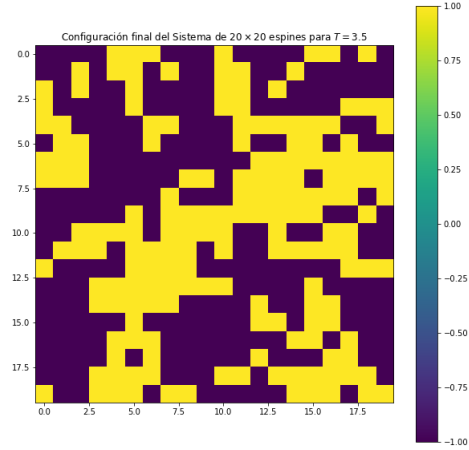


Figure 8. Estado final de la red de espines para $T = 3,5$. El color amarillo significa espín arriba $s_i = 1$ y el morado espín hacia abajo $s_i = -1$, como se muestra en la barra de colores de la gráfica.

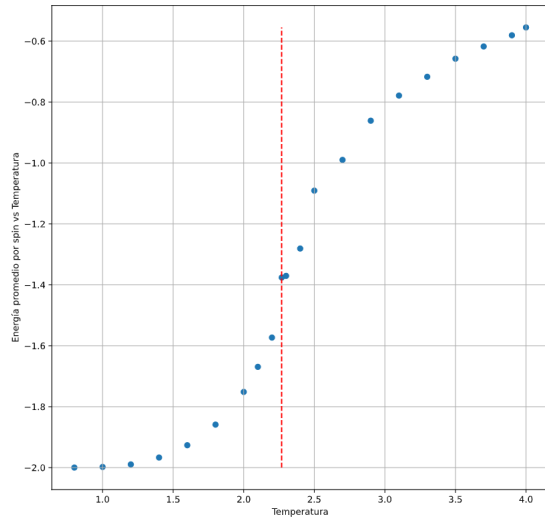


Figure 9. Energía promedio por espín vs Temperatura para modelo de Ising en dos dimensiones.

Figura 1 en donde para temperaturas muy bajas se espera que la magnetización por espín sea máxima en magnitud (cerca a 1) pero para temperaturas mayores a T_c se espera que la magnetización caiga a cero. Ahora bien, sobre las gráficas mostradas en las Figuras 9 y 10 lo primero que se puede decir es que también concuerdan, en forma, con lo que se conoce en la literatura para las curvas de energía y magnetización contra temperatura, mostradas en las Figuras 1 y 2 respectivamente. Sin embargo se puede apreciar tanto en la Figura 10 como en la Figura 11 que el valor de temperatura para el cual la magnetización decae a cero no es exactamente el valor teórico de T_c . Esto puede deberse a diversos factores, tales como el carácter aleatorio de la simulación o a que tal vez la estadística usada no fue lo suficientemente grande como para tener un resultado bastante exacto. Sin embargo se reprodujo el com-

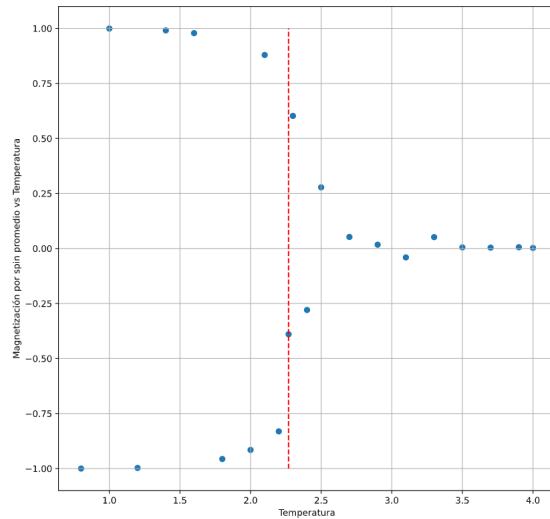


Figure 10. Magnetización promedio por espín vs Temperatura para modelo de Ising en dos dimensiones.

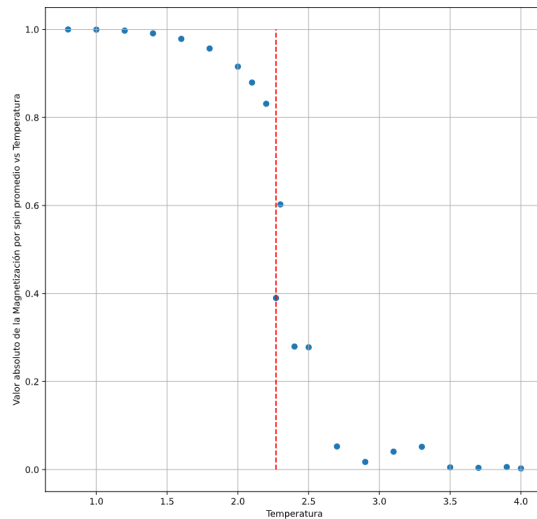


Figure 11. Valor absoluto de la magnetización promedio por espín vs Temperatura para modelo de Ising en dos dimensiones.

portamiento esperado tanto para la energía por espín como para la magnetización por espín. También, probablemente por los mismos motivos, se observan algunos comportamientos anormales (como un mismo valor de magnetización para dos temperaturas distintas) tanto para temperaturas cercanas a T_c como para temperaturas altas. Finalmente es de notar que en la Figura 10 obtenida iterando la función *metropolis* sobre los distintos valores de temperatura escogidos se pudo observar efectivamente el cambio de fase esperado para una temperatura cercana a T_c , mostrando que el AM es una herramienta bastante poderosa para poder predecir comportamientos de sistemas físicos sin necesidad de recurrir a cálculos analíticos complejos, como lo puede llegar a ser la solución exacta de Onsager.

4 CONCLUSIONES

Se mostró el poder que tiene el AM para simular sistemas físicos, en particular al momento de simular un sistema de espines en dos dimensiones, permitiendo obtener numéricamente curvas de energía y magnetización contra temperatura sin necesidad de recurrir a soluciones analíticas que pueden llegar a ser complejas de tratar. Si bien algunos datos pueden diferir aleatoriamente de lo que se espera teóricamente, se espera que con más estadística (más valores de temperatura) y más iteraciones se pueda lograr un trabajo más pulido y exacto que pueda diferenciarse muy poco de lo que se puede llegar a encontrar teóricamente. Por último, se logró ver que el AM también tiene el poder de poder predecir transiciones de fase en estos sistemas de espines, por lo que puede llegar a ser de mucha ayuda para encontrar otras transiciones de fase en sistemas similares.

Referencias

- Statweb S., , Detailed Balance, <https://statweb.stanford.edu/~owen/mc/Ch-MCMC.pdf>
 Tamura R., Tanaka S., Kawashima N., 2012, *Kinki University Series on Quantum Computing*, 7, pp. 217
 University N. S., , http://astro.physics.ncsu.edu/urca/course_files/Lesson23/index.html