

Modelo de Ising: Apreciaciones Generales y Algoritmo Metrópolis.

Juan Esteban Aristizabal Zuluaga
Instituto de Física, Universidad de Antioquia.
(Dated: 16 de mayo de 2020)

Palabras clave: .

I. INTRODUCCIÓN

II. CONSIDERACIONES TEÓRICAS

A. Hamiltoniano del sistema y ensamble canónico.

El hamiltoniano del modelo de Ising está dado por

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad (1)$$

donde $\sigma_i = \pm 1$ (se conoce como espín), $\langle ij \rangle$ da cuenta de interacción entre primeros vecinos y J es la fuerza de la interacción entre primeros vecinos.

El modelo de Ising asume que los espines están fijos en sus posiciones y puede ser aplicado en cualquier dimensionalidad y con cualquier tipo de rejilla. En nuestro caso nos centraremos en el sistema 2-dimensional con rejilla cuadrada de lado L . Es decir, estudiaremos la interacción del modelo de ising entre $N = L \times L$ espines. Las condiciones de frontera del sistema pueden ser de diversos tipos. En este trabajo usaremos más que todo las condiciones de frontera periódicas y mencionaremos algunas diferencias interesantes que emergen al considerar condiciones de frontera libres. Además, trabajaremos en unidades de $J = k_B = 1$.

Cuando el sistema está inmerso en un baño térmico, podemos trabajar en el ensamble canónico. La función partición está dada por

$$Z(\beta) = \sum_n e^{-\beta E_n}, \quad (2)$$

donde E_n representa cada nivel de energía del sistema. Si el microestado $E_n = E$ tiene degeneración $\Omega(E)$ es claro que

$$Z(\beta) = \sum_E \Omega(E) e^{-\beta E}. \quad (3)$$

Notemos que esta última expresión es conceptualmente muy útil, ya que vemos que las contribuciones a la función partición se pueden agrupar de acuerdo a las diferentes energías del sistema, via su degeneración $\Omega(E)$. En esta misma línea, sabemos también que probabilidad de que el sistema esté en un nivel de energía E_n , p_n , está dada por

$$p_n = \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \quad (4)$$

y la probabilidad de que el sistema tenga energía E está dada por

$$p_E = \frac{\Omega(E) e^{-\beta E}}{Z}. \quad (5)$$

Cuando tenemos este sistema en el ensamble canónico y L es lo suficientemente grande, se presenta una transición de fase de segundo orden caracterizada por una discontinuidad en la derivada del calor específico c_v y se da a una temperatura crítica T_c . Cuando $L \rightarrow \infty$, se tiene $T_c = 2/\log(1 + \sqrt{2}) \approx 2.269$ [citaaaaaa](#).

A pesar de que la esencia del modelo de Ising es muy sencilla, nos encontramos con un problema importante al estudiarlo (que se encuentra en gran parte de la física estadística), el cual es el conteo de microestados. El número de microestados del sistema 2-dimensional en rejilla cuadrada es $\Omega = 2^{L \times L}$. Para el caso $L = 10$ esto es $\Omega \approx 10^{30}$. El cálculo del total de éste número de microestados rebasa cualquier capacidad computacional disponible hasta el momento. Entre otras cosas, para darnos una idea de este problema, estudiaremos en las siguientes secciones el cálculo de los microestados por enumeración exacta.

B. Microestados y contribuciones a la función partición

Los microestados explícitos, es decir, las $\Omega = 2^{L \times L}$ configuraciones posibles en nuestro sistema son isomorfas a los primeros Ω números binarios. Con esta estrategia se pueden generar todas las configuraciones posibles, cambiando los dígitos que tengan valor 0 de los números binarios por el valor -1 . Una vez generadas todas las configuraciones para un L dado, se puede calcular la energía de cada uno de ellos usando la expresión 1 y con ellas, se pueden calcular los $\Omega(E)$.

Nota: el código con el que se generaron las figuras se puede ver en el apéndice A y usa un módulo propio que escribimos, el cual contiene todas las funciones necesarias para generar las gráficas y para el cual se adjunta el link en el anexo en cuestión.

La figura 1 muestra el histograma de $\Omega(E)$ para $L = 3, 4, 5$ con condiciones de frontera periódicas. Notamos que el caso $L = 3$ es evidentemente asimétrico con respecto a la energía $E = 0$, contrario al caso $L = 4$ que es simétrico con respecto a la misma energía. El caso $L = 5$ es aparentemente simétrico en el mismo sentido. Sin embargo, al calcular los valores de energía exactos encontramos que este caso es realmente asimétrico (por ejemplo, para la mínima energía $E = -50$ se tiene $\Omega(-50)$, mientras que $\Omega(50) = 0$). En general, se tiene que para L impar, el histograma de $\Omega(E)$ es asimétrico y para L par es simétrico. Sin embargo, para L lo suficientemente grande, la asimetría del histograma en cuestión es mínima y se puede considerar como simétrico. Como veremos a continuación, se trata de un efecto de tamaño finito que es consecuencia de las condiciones de frontera periódicas.

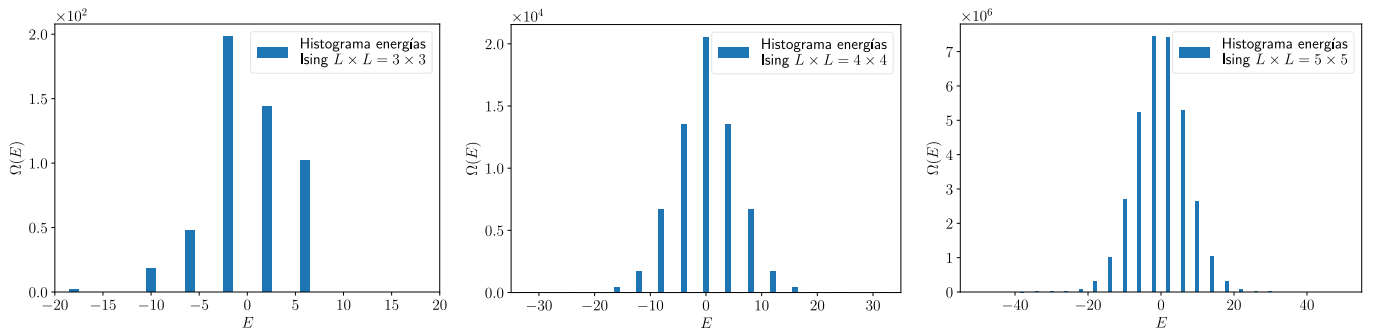


Figura 1. De izquierda a derecha: histograma de $\Omega(E)$ para $L = 3, 4, 5$, respectivamente, con condiciones de frontera periódicas. Notamos la asimetría evidente para $L = 3$, simetría para $L = 4$ y asimetría no evidente en $L = 5$. Este fenómeno se debe a las condiciones de frontera periódicas y es un efecto de tamaño finito, pues para L lo suficientemente grande, el histograma es aproximadamente simétrico independientemente de si L es impar o par.

Para entender un poco mejor la asimetría en los histogramas con L impar, consideremos momentáneamente el caso de condiciones de frontera libres. En la figura 2 (centro) se muestra dicho histograma para $L = 3$. Notamos que el histograma ahora contiene la energía $E = 0$ y que es simétrico (no aparentemente sino exactamente simétrico). Para entender mejor el efecto de las condiciones de frontera se muestran en la misma figura configuraciones de menor y mayor energía (izquierda y derecha, respectivamente). Al considerar condiciones de frontera periódicas, para el caso de menor energía (izquierda) con condiciones de frontera libres se tiene $E = -12$ y con condiciones de frontera periódicas, se tiene $E = -18$. Para el caso de mayor energía con condiciones de frontera libres se tiene $E = 12$, mientras que en el caso de condiciones de frontera periódicas se tiene $E = 6$.

Este efecto se da para el caso impar ya que al tener condiciones de frontera periódicas, en el caso de mayor energía, los vecinos de los sitios de los bordes tienen el mismo valor de espín, lo cual hace que la energía disminuya con respecto al valor absoluto de la energía menor del sistema y así se genera la asimetría, es decir $E_{\max} = |E_{\min}| - \Delta E$. Dicho ΔE está relacionado con las condiciones de frontera. $\Delta E = 0$ para condiciones de frontera libres, lo cual genera la simetría en ese caso y es fácil ver que $\Delta E = 2L$ para condiciones de frontera periódicas. La asimetría se ‘pierde’ con $L \rightarrow \infty$ ya que para condiciones de frontera periódicas $E_{\min} = -2L^2$, luego

$$\begin{aligned}
 E_{\max} &= 2(L^2 - L) \\
 \Rightarrow \frac{E_{\max}}{L} &= 2(L - 1) \\
 &\approx 2L = \frac{|E_{\min}|}{L}.
 \end{aligned} \tag{6}$$

Por otro lado, este efecto no se presenta en el caso $L = \text{par}$, ya que todos los vecinos de los sitios de los bordes son de

signos diferentes.

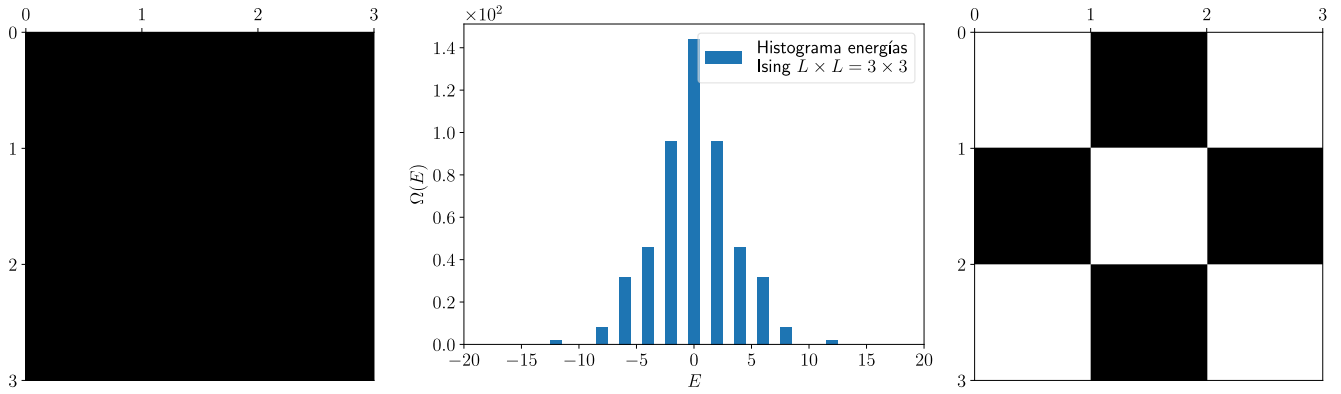


Figura 2. Centro: histograma $\Omega(E)$ para el caso $L = 3$ con condiciones de frontera periódicas. Izquierda: un microestado de menor energía (independientemente de las condiciones de frontera). Derecha: un microestado de mayor energía (independientemente de las condiciones de frontera).

Por otro lado, sabemos que la función partición tiene gran importancia en la física estadística, ya que de ella se deduce la termodinámica del sistema. Notemos que las contribuciones de cada energía a la función partición, *i.e.* $\Omega(E)e^{-\beta E}$ son proporcionales a la probabilidad p_E definida en 5. Conocerlas es básicamente conocer la probabilidad de que el sistema se encuentre en una energía E dada.

En la figura 3 mostramos dichas contribuciones por energías a la función partición $\Omega(E)e^{-\beta E} \propto p_E$. Arriba: $N = 3 \times 3$, abajo: $N = 5 \times 5$. Izquierda: $T = 2000$, centro: $T = T_c \approx 2.45$ (temperatura crítica para valores pequeños de L), derecha: $T = 1$. Para temperaturas muy altas, notamos, al comparar con la figura 1 que los histogramas son casi idénticos. Esto es esperable ya que $T \gg 0 \Rightarrow \beta \ll 1 \Rightarrow \Omega(E)e^{-\beta E} \approx \Omega(E)$. Por otro lado, cuando $T \approx T_c$ se tiene que hay mayores contribuciones de energías pequeñas pero aún hay muchas energías que contribuyen al sistema y las contribuciones son mayores cuanto menor es E es un límite intermedio entre bajas y altas temperaturas, de algún modo T_c se convierte en una temperatura característica del sistema. Finalmente, el límite de bajas temperaturas es el esperado: prácticamente la única contribución es la del estado base.

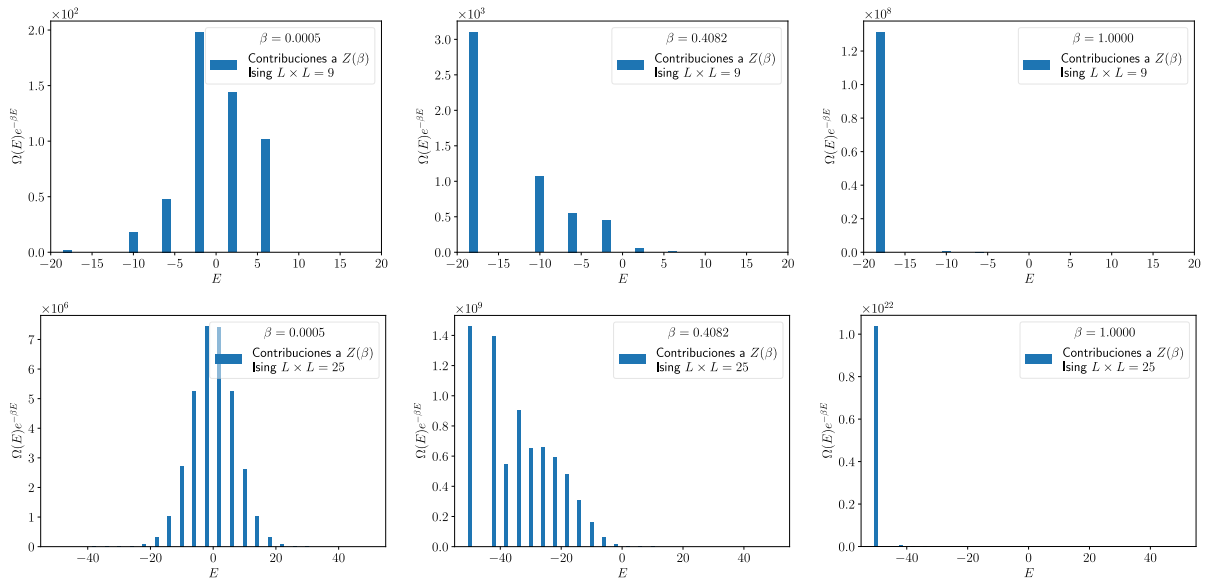


Figura 3. Contribuciones por energías a la función partición $\Omega(E)e^{-\beta E} \propto p_E$. Arriba: $N = 3 \times 3$, abajo: $N = 5 \times 5$. Izquierda: $T = 2000$, centro: $T = T_c \approx 2.45$ (temperatura crítica para valores pequeños de L), derecha: $T = 1$.

C. Equivalencia entre ensambles microcanónico y macrocanónico

Usualmente encontramos en los textos de física estadística que en el caso del límite termodinámico hay una equivalencia entre los ensambles canónico y microcanónico, que se puede escribir en la forma

$$Z(\beta) = \sum_E \Omega(E) e^{-\beta E} \approx \Omega(\langle E \rangle) e^{-\beta \langle E \rangle} = Z(\beta)_{\text{appx}} \quad (7)$$

Aunque en esta sección no podemos calcular $Z(\beta)$ para sistemas muy grandes (por capacidad computacional solo se logró hacer hasta $L = 5$), se realizó una aproximación a este problema, para ver en cuáles son las condiciones en las cuales la expresión anterior se cumple en casos de baja dimensionalidad (L pequeño). El método usado fue, para cada β y L calcular la energía promedio $\langle E \rangle$, posteriormente se interpoló linealmente los histogramas de la figura 1 para obtener $\Omega(\langle E \rangle)$ y con esto se calculó Z_{appx} definida en (7).

En la figura 4, con líneas punteadas se muestra el resultado del método $\log Z_{\text{appx}}$ y con líneas continuas el valor real calculado directamente, $\log Z$. En general, encontramos que para temperaturas bajas *i.e.* β alto, la equivalencia se da casi de inmediato. Esto se debe básicamente a que la energía mínima es la más dominante en el sistema (por gran diferencia con respecto a las demás) y es muy cercana a la energía promedio. Por tanto, el sistema tiene prácticamente energía constante (casi sin fluctuaciones) *i.e.* el ensamble canónico y el microcanónico son equivalentes. Para poder concluir acerca de la validez de (7) en el límite termodinámico es necesario hacer este estudio para L grandes, lo cual está por fuera de nuestras capacidades de cómputo.

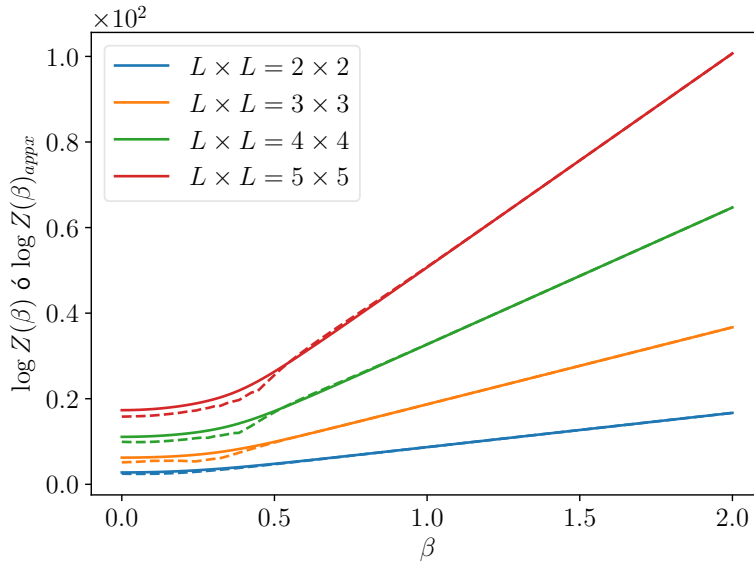


Figura 4. En líneas punteadas se muestra $\log Z_{\text{appx}}$ calculado con el método descrito en el artículo y en líneas continuas $\log Z$ calculado directamente por enumeración exacta. Ésto muestra la equivalencia. Esto muestra la equivalencia a bajas temperaturas entre ensambles microcanónico y macrocanónico en el caso de bajo valor L , expresada por la ecuación 7.

D. Calor específico

Con las probabilidades para las energías del sistema dadas por (5) es fácil calcular el valor medio de E y el valor medio de E^2

$$\langle E \rangle = \sum_E E p_E = \sum_E E \frac{\Omega(E) e^{-\beta E}}{Z} \quad (8)$$

$$\langle E^2 \rangle = \sum_E E^2 p_E = \sum_E E^2 \frac{\Omega(E) e^{-\beta E}}{Z}. \quad (9)$$

Con esto en mente es fácil calcular el calor específico, que en el ensamble canónico está dado por

$$c_v = \frac{\beta^2}{N} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2). \quad (10)$$

De los cálculos en las secciones anteriores tenemos todos los elementos para calcular este calor específico para $L = 2, 3, 4, 5$.

La figura 5 muestra dichos valores en función de la temperatura, T . Como nos encontramos aún en valores relativamente bajos de L , no se presenta una discontinuidad evidente en el calor específico. Sin embargo, conforme se aumenta L , notamos que el pico de c_v se va haciendo más puntiagudo. Para valores más altos de L , como se verá en la sección III, el pico se convierte en el punto de discontinuidad, demostrando así una transición de fase de segundo orden, para la cual, en el límite $L \rightarrow \infty$, la temperatura crítica es $T_c = 2/\log(1 + \sqrt{2})$. En las gráficas se muestran los valores T_c para cada L , asociados a los picos de las gráficas.

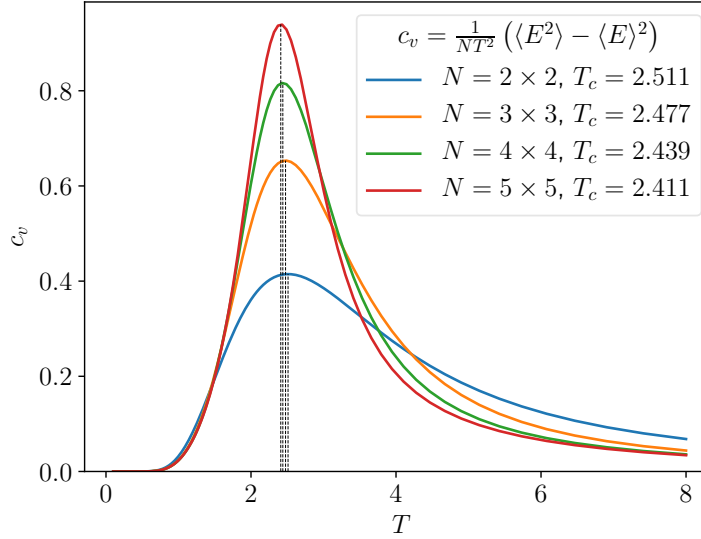


Figura 5. Calor específico c_v dado por (10) en función de la temperatura para diferentes valores de L . Los picos corresponden con la ‘temperatura crítica’, que para L grande se convierten en puntos discontinuos, demostrando así una transición de fase de segundo orden en el sistema.

.....TIEMPO DE CÓMPUTO 8x8.....

III. MODELO DE ISING Y ALGORITMO METRÓPOLIS

En trabajos anteriores ya hemos estudiado el algoritmo Metrópolis, el cual consiste en un muestreo inteligente de distribuciones de probabilidad y que es muy útil para sistemas que presentan un alto número de configuraciones posibles. A continuación explicaremos la implementación de este algoritmo en el caso del modelo de Ising.

A. El algoritmo Metrópolis para el modelo de Ising 2d

En esta sección mostramos el retazo de programa más importante que usamos en nuestra implementación y que corresponde con el algoritmo Metrópolis para el modelo de Ising.

En la línea 3 importamos el módulo `ising2d_metropolis` que escribimos y contiene todas las funciones necesarias para generar las gráficas que se muestran en esta y las siguientes secciones (las gráficas se generaron con el script `ising2d_metropolis_run.py` que se puede encontrar en el anexo B)

La línea 11 calcula los vecinos de cada uno de los sitios que se necesitarán para calcular las energías de cada configuración. El método del cálculo de los vecinos se explica directamente en los comentarios del módulo `ising2d_metropolis`

y consiste en tener en cuenta las condiciones de frontera periódicas de manera compacta usando operadores división suelo (*floor division*) y módulo.

Las líneas 14 – 17 deciden si se leyó un microestado inicial para comenzar el algoritmo o si se generará uno de forma aleatoria.

La línea 20 calcula la energía del microestado inicial.

Las líneas 26 – 32 corren el algoritmo Metrópolis para un número de pasos transiente `N_transient`, con el fin de que el sistema se termalice. En esta parte NO se guardan los datos de las energías de cada paso, precisamente porque es una etapa de transiente y no muestra las características del estado de equilibrio, en el cual estamos interesados. La probabilidad de aceptación es dada por la razón de los factores de boltzmann del microestado propuesto sobre el microestado anterior, ya que estamos trabajando en el ensamble canónico.

Las líneas 34 – 41 corren el algoritmo Metrópolis para un número de pasos `N_steps`, en el cual se espera que el sistema ya esté termalizado, es decir, que se encuentre en un estado de equilibrio del ensamble canónico. En esta parte se guardan las energías de cada configuración por la que pasa el sistema. El resultado final del algoritmo es una lista con las energías por las cuales pasó el sistema durante el número de pasos `N_steps`, éstas constituyen un muestreo inteligente de la distribución de probabilidad p_E dada por (5) y por tanto nos permiten calcular las propiedades termodinámicas del sistema.

El resto del módulo `ising2d_metropolis` está bien explicado en los comentarios del mismo.

Hay que anotar enfáticamente que en las implementaciones del algoritmo metrópolis se usó la librería Numba que permite un tipo de compilación de los programas denominado JIT (*Just In Time Compilation*). Sin el uso de esta librería, no hubiese sido posible el cálculo tan preciso de las datos usados en las gráficas acá presentadas, ya que los tiempos de cómputo al usar este tipo de compilación permiten ganancias en la optimización de los tiempos de cómputo hasta en 100 veces [1].

```

1  # -*- coding: utf-8 -*-
2  import numpy as np
3  from ising2d_metropolis import ising_neighbours, ising_energy
4
5  def ising_metropolis_energies(microstate=np.ones(36,dtype=np.int64),
6                                read_ini_microstate_data=False, L=6, beta=1., J=1,
7                                N_steps=10000, N_transient=100):
8
9      N = L * L
10     # Calcula vecinos
11     ngbrs = ising_neighbours(L)
12
13     # Si los datos se no se leyeron, genera microestado inicial aleatoriamente
14     if read_ini_microstate_data:
15         pass
16     else:
17         microstate = np.random.choice(np.array([1,-1]), N)
18
19     # Calcula energía inicial
20     energy = ising_energy([microstate], ngbrs, J=J, print_log=False)[0]
21     # Arreglo donde se guardarán energías de los microestados muestreados
22     energies = []
23
24     # En el transiente no se guardan las energías,
25     # se espera a que el sistema se termalice.
26     for i in range(N_transient):
27         k = np.random.randint(N)
28         delta_E = (2. * J * microstate[k]
29                    * np.sum(np.array([microstate[ngbr_i] for ngbr_i in ngbrs[k]])))
30         if np.random.uniform(0,1) < np.exp(-beta * delta_E):
31             microstate[k] *= -1
32             energy += delta_E
33     # Pasado el transiente, se comienzan a guardar las energías
34     for i in range(N_steps):
35         k = np.random.randint(N)
36         delta_E = (2. * J * microstate[k]

```

```

37         * np.sum(np.array([microstate[ngbr_i] for ngbr_i in ngbrs[k]])))
38     if np.random.uniform(0,1) < np.exp(-beta * delta_E):
39         microstate[k] *= -1
40         energy += delta_E
41     energies.append(energy)
42
43     # Se calcula la energía media por espín del microestado final
44     N_steps2 = np.array(len(energies), dtype=np.int64)
45     avg_energy_per_spin = np.float(np.sum(np.array(energies))/(N_steps2 * N * 1.))
46
47     # Se devuelven las energías, el microestado final y la energía media
48     # por espín del microestado final.
49     return energies, microstate, avg_energy_per_spin

```

B. Termalización del sistema usando el algoritmo

Como se dijo en la sección anterior, se espera que en la primera parte del algoritmo (en los primeros $N_{\text{transient}}$ pasos) el sistema se termalice. Como estamos en el ensamble canónico, la termalización del sistema está caracterizada por la energía promedio del sistema $\langle E \rangle / N$. Cuando esta cantidad se mantenga aproximadamente constante con el cambio del número de iteraciones, podemos asegurar que el sistema se habrá termalizado.

Para entender mejor lo anterior, en la figura 6 se muestra $\langle E \rangle / N$ en función del número de iteraciones N_{steps} . Como en este caso estamos interesados en ver directamente la termalización, se escoge $N_{\text{transient}}$ igual a cero. En la izquierda se muestra la termalización para el caso $N = 6 \times 6$, en el cual se puede hacer la comparación de $\langle E \rangle / N$ para diferentes temperaturas por enumeración exacta, ya que en el enunciado de la parte 1 se dio el histograma $\Omega(E)$ para este caso y eso basta para calcular $\langle E \rangle / N$. En dicha figura se muestran los valores para cada temperatura y notamos que la termalización se da en escalas diferentes, dependiendo de la temperatura. Así, para temperaturas altas, el sistema se termaliza mucho más rápido que para temperaturas bajas, pero esto es más evidente en sistemas con L más grande. Es interesante notar que los límites están bien definidos. Para temperaturas bajas, el sistema tiende a estados ferromagnéticos que implican $\langle E \rangle / N \approx 2$, mientras que para temperaturas altas el sistema se termaliza en $\langle E \rangle / N$ cada vez más cercano a cero, como se espera, según los histogramas de $\Omega(E)$ y $e^{-\beta E} \Omega(E)$ mostrados en la sección II B.

En el centro de la figura 6 encontramos la termalización para $L = 32$ y diferentes temperaturas. Notamos que en general la termalización demora más que para el caso anterior ($N = 6 \times 6$). Esto es esperable, ya que el número de configuraciones posibles en este caso ($\Omega = 2^{32 \times 32}$!!!) es muchísimo mayor que el número de configuraciones en el caso anterior, por lo cual, el sistema debe pasar primero por muchos más estados antes de llegar al equilibrio. Sucede de forma similar con el caso $N = 64 \times 64$, el cual necesita muchas más iteraciones para llegar al equilibrio.

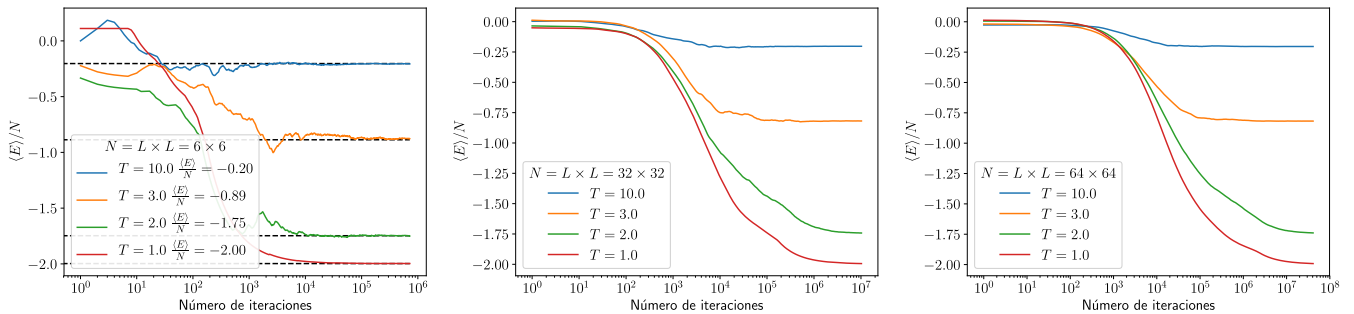


Figura 6. Visualización gráfica del paso al equilibrio en el algoritmo Metrópolis para el modelo de Ising en el ensamble canónico, medido por el paso al equilibrio de la energía promedio del sistema. Izquierda: $N = 6 \times 6$. Centro: $N = 32 \times 32$. Derecha: $N = 64 \times 64$.

Para ilustrar un poco mejor el tema de la termalización, en la figura 7 mostramos los microestados por los cuales pasa el sistema de $N = 128 \times 128$ en el principio del transiente ($N_{\text{steps}} = 10^3$), en medio del transiente ($N_{\text{steps}} = 10^5$) y cuando el sistema ya está termalizado ($N_{\text{steps}} = 10^8$), todo para temperatura baja $T = 1$ y, como queremos ver explícitamente la termalización, se usó $N_{\text{transient}} = 0$. Vemos que el sistema pasa de una configuración prácticamente

aleatoria ($\langle E \rangle / N \approx 0$), luego una configuración con pequeños parches con dominio ferromagnético ($\langle E \rangle / N \approx -1$) y finalmente a una configuración casi completamente ferromagnética donde ($\langle E \rangle / N \approx -2$), estos valores se deducen aproximadamente a partir de la figura 6 (derecha) que muestra la termalización para el caso más cercano al $N = 128 \times 128$ que se pudo obtener.

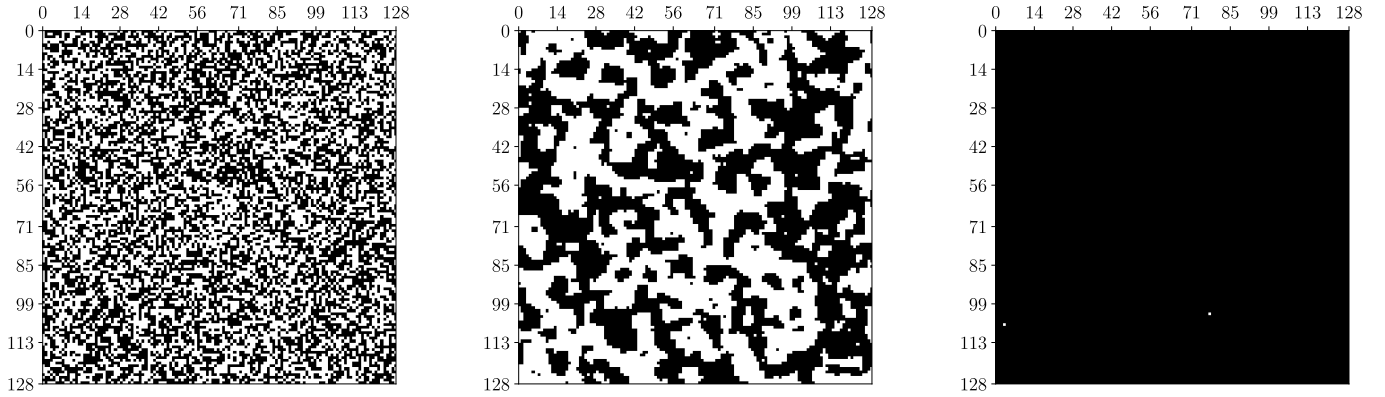


Figura 7. Microestados por los cuales pasa el sistema de $N = 128 \times 128$ en el principio del transiente ($N_{\text{steps}} = 10^3$, izquierda), en medio del transiente ($N_{\text{steps}} = 10^5$, centro) y cuando el sistema ya está termalizado ($N_{\text{steps}} = 10^8$, derecha).

C. Microestados finales y temperatura crítica

Una vez el sistema está termalizado, podemos obtener microestados típicos del modelo de Ising en el ensamble canónico a una temperatura fija. En la figura 8 encontramos los microestados mencionados del sistema $L = 64$ para temperaturas $T = 1, 2.5$ y 10 –izquierda, centro y derecha, respectivamente.

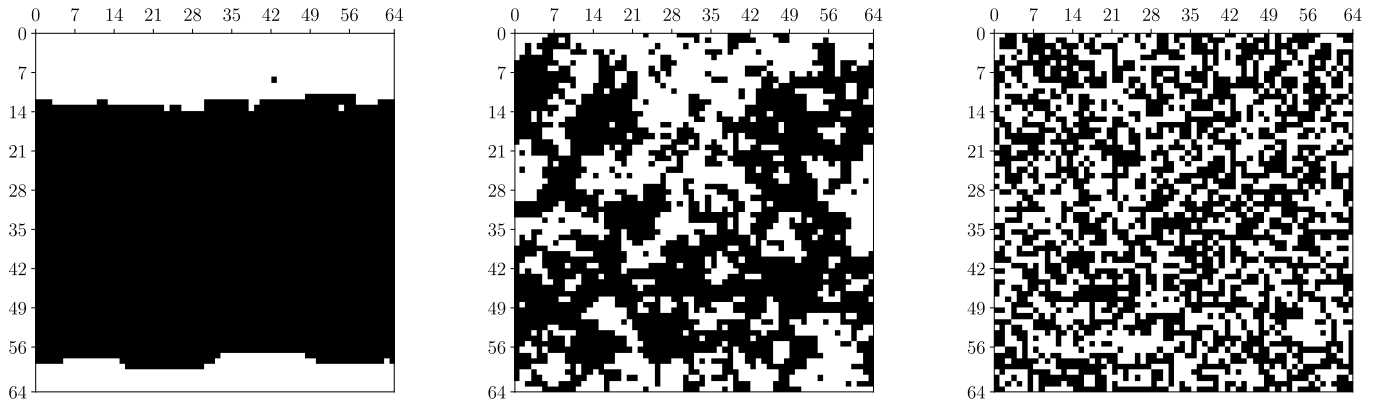


Figura 8. Microestados típicos del sistema $L = 64$ para temperaturas $T = 1, 2.5$ y 10 –izquierda, centro y derecha, respectivamente.

Para $T = 1$ encontramos un sistema con dos grandes dominios ferromagnéticos, esta configuración es estable a bajas temperaturas para sistemas con L grande, ya que el aumento en la energía debido a los bordes entre los dos diferentes dominios ferromagnéticos aumentan poco la energía del sistema *i.e* $\delta E > 0$ de los bordes es mucho menor a la energía de un sistema con un solo dominio ferromagnético $E_{\text{min}} = -2L^2 < 0$. Cuanto más baja sea la temperatura, este tipo de microestados con dos grandes dominios ferromagnéticos serán menos probables y en cambio serán mucho más probables microestados con un solo dominio ferromagnético (todos los espines 1 o todos -1).

El caso $T = 2.5$ es más cercano a la temperatura crítica del sistema con L infinito. Aquí observamos que hay pequeños pero muchos más dominios ferromagnéticos (pequeños parches blancos o negros), que corresponden con un sistema típico de temperatura que no es muy alta ni muy baja.

Finalmente, el caso de alta temperatura, $T = 10$ es casi completamente aleatorio, aunque aún se notan algunos dominios ferromagnéticos son casi imperceptibles. Este es un microestado típico de alta temperatura, donde todos los microestados son casi igualmente probables y en el que predominan energías promedio $\langle E \rangle / N$ cercanas a cero, como se puede ver en la figura 6 (derecha).

Un caso interesante de estudio son las configuraciones típicas de un sistema relativamente grande a temperatura cercana a la temperatura crítica. Para entender qué sucede en este caso, en la figura 9 se muestran tres configuraciones típicas para el sistema $L = 128$ a temperatura $T_c \approx 2.27$. Encontramos que a esta temperatura hay grandes dominios ferromagnéticos que ya están prácticamente formados pero contienen “ruido” en su interior, es decir, grandes regiones blancas o negras que en su interior contienen esporádicamente el color (espín) contrario. Esta es la manifestación del cambio de fase de segundo orden, de la cual ya hablamos en la sección IID. Para temperaturas menores a la temperatura crítica esperamos obtener menos ruido en esos dominios ferromagnéticos bien formados, paulatinamente hasta llegar a un estado totalmente ferromagnético en el límite $T \rightarrow 0$. Para temperaturas más altas, esperamos tener estados un poco más aleatorios con dominios ferromagnéticos cada vez menos evidentes.

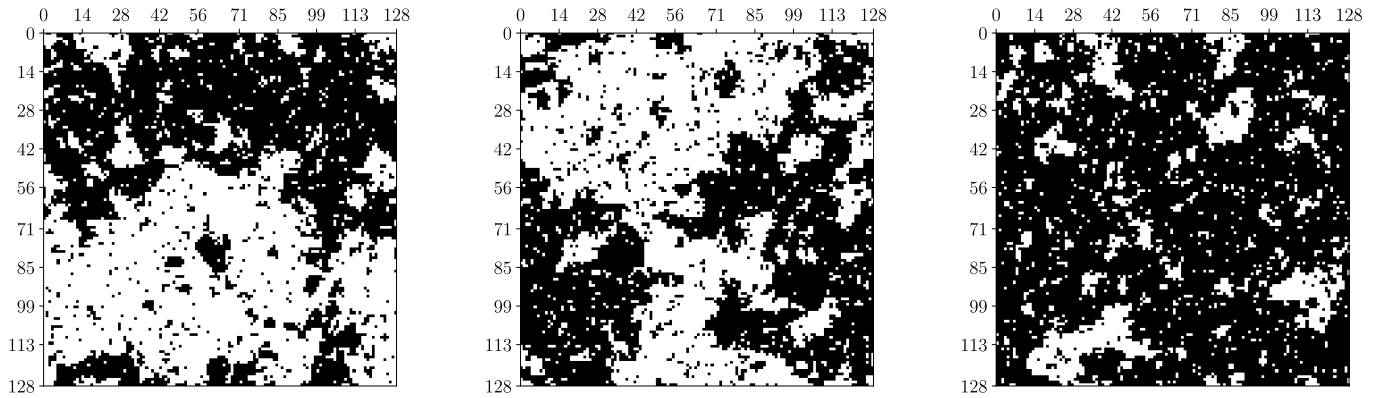


Figura 9. Tres configuraciones típicas para el sistema $L = 128$ a temperatura $T_c \approx 2.27$.

D. Calor específico

Para finalizar nuestros análisis, presentamos en la figura 10 el calor específico calculado para varios valores de L , hasta $L = 64$. En primer lugar hay que mencionar que obtener esta gráfica no sería posible de manera sencilla por enumeración exacta ya que el número de microestados $\Omega = 2^{64 \times 64}$ es un número casi inconmesurable que sobrepasa cualquier capacidad computacional. En cambio, mediante un muestreo inteligente con el algoritmo metrópolis es posible obtenerla. En los casos $L = 2, 3, 4$ y 5 se muestra para comparación y en línea negra punteada los resultados obtenidos por enumeración exacta. Notamos que el algoritmo metrópolis logra capturar estas curvas con gran precisión.

Para valores más grandes de L no es posible obtener la curva ya que no se tiene acceso a la enumeración exacta de los microestados. Sin embargo, notamos que las curvas para estos valores son continuas y presentan pocas fluctuaciones, lo cual da un buen presagio para la exactitud del método.

Encontramos también evidente que el pico de las gráficas se hace cada vez más puntiagudo, conforme aumenta L , lo cual evidencia una transición de fase de segundo orden, según se comentó ya en la sección IID.

IV. CONCLUSIÓN

El modelo de Ising es un sistema con una gran riqueza conceptual, debido a la sencillez de su planteamiento y a la gran cantidad de información que podemos obtener de él. Esto lo pudimos observar alrededor de todo el artículo.

La sencillez del modelo

Las implementaciones de los algoritmos usados en este trabajo son suficientemente generales y se podrían adaptar con cierta facilidad a otros sistemas de interés que sean objeto de estudio.

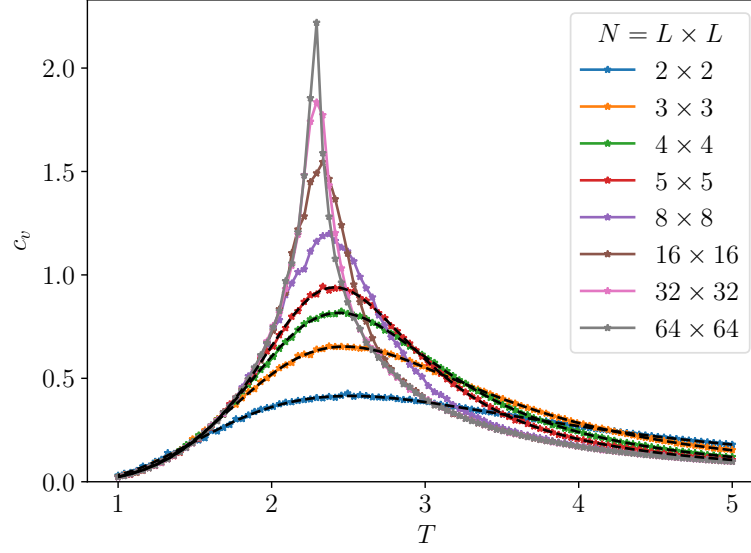


Figura 10. Calor específico en función de la temperatura para varios tamaños L del sistema calculados con el algoritmo metrópolis. Se nota que cuanto mayor es L , la discontinuidad en el pico es más evidente, característica propia de una transición de fase de segundo orden. Los parámetros usados fueron $N_{\text{steps}} = 80000L \times L$, $N_{\text{transient}} = 0.7N_{\text{steps}}$ y se graficaron 100 datos de c_v para valores entre $T = 1$ y $T = 5$. El tiempo de cómputo fue de 12000s.

AGRADECIMIENTOS

Agradezco a mis compañeros de clase con los que tuve discusiones que ayudaron en la implementación del algoritmo y en las conclusiones presentadas.

-
- [1] S. K. Lam, A. Pitrou, and S. Seibert, Numba: A LLVM-Based Python JIT Compiler, in *Proceedings of the Second Workshop on the LLVM Compiler Infrastructure in HPC*, LLVM '15 (Association for Computing Machinery, New York, NY, USA, 2015).

Apéndice A: Código 1: enumeración exacta de microestados

A continuación se muestra el código . Éste código está disponible en [este link](#)

Apéndice B: Código 2: Algoritmo Montecarlo

A continuación se muestra el código que está disponible en [este link](#).
