



Proyecto Final
Probabilidad de Honores 2023-20

Modelo de Ising

Juana Granados Rodríguez - 202015134

Presentado al profesor Mauricio Junca

Índice general

1	Introducción	1
2	Teoría	2
2.1	Cadenas de Markov	2
2.1.1	Definición y Propiedades	2
2.1.2	Distribuciones Estacionarias	4
2.1.3	Cadenas de Markov Reversibles e Irreducibles	5
2.2	Modelo de Ising	6
3	Simulaciones	8
3.1	Simulando una Cadena de Markov (<i>Punto 1</i>)	8
3.2	Simulando el modelo de Ising (<i>Punto 8</i>)	8
3.2.1	Funciones Auxiliares	8
3.2.2	Simulando el Modelo para un Campo de 250×250	9
4	Resultados y Conclusiones	10
4.1	Resultados Computacionales de la Cadena de Markov	10
4.2	Resultados Computacionales del Modelo de Ising	11
4.3	Conclusiones.	12
5	Implementación Computacional	13
5.1	Código	13
5.1.1	Detalles de Implementación	13
	Referencias	15

1

Introducción

En este proyecto se explora la intersección entre la teoría de cadenas de Markov y la física estadística, pues gracias a esto podemos explorar sistemas complejos de manera sistemática.

La primera parte del proyecto se centra en las cadenas de Markov, abordando la demostración de propiedades clave que caracterizan su comportamiento. Asimismo, se exploran las cadenas de Markov con distribuciones estacionarias, reversibles e irreducibles. Se analiza cómo las transiciones entre estados, regidas por probabilidades específicas, pueden modelar sistemas dinámicos. Posteriormente, se analiza el modelo de Ising, una herramienta fundamental en la física estadística para describir el comportamiento magnético de materiales. Exploramos las interacciones entre espines en una red y cómo la temperatura influye en la dinámica del sistema.

La segunda parte del proyecto tiene un enfoque computacional, en el cual se simulan cadenas de Markov y se aplica el modelo de Ising a una configuración aleatoria de espines para ver su evolución temporal al variar la temperatura del sistema. Esto con la intención de estudiar el equilibrio térmico y las transiciones de fase paramagnética y ferromagnética que emergen de manera natural en este modelo.

Las definiciones, propiedades y explicaciones son tomadas y exploradas a partir del enunciado del Proyecto Final brindado en el curso de Probabilidad Honores [1] y los contenidos del curso.

2

Teoría

2.1. Cadenas de Markov

2.1.1. Definición y Propiedades

Una cadena de Markov es un modelo matemático que describe una secuencia de eventos donde la probabilidad de que ocurra un evento futuro depende únicamente del estado actual del sistema y no de cómo se llegó a ese estado. En el caso de este proyecto se tomarán cadenas de Markov en tiempo discreto con un número finito de estados.

Para definir de manera clara una cadena de Markov es necesario introducir dos conceptos: El espacio de estados y la Matriz de transición. El espacio de estados es un conjunto de estados posibles que puede tomar el sistema mientras que la matriz de transición describe en sus entradas las probabilidades de transición entre cada uno de los estados posibles en un paso de tiempo. De manera más formal:

Definición 1. Una *cadena de Markov* con valores en el conjunto S , *distribución inicial* $a \in \mathbb{R}_+^{|S|}$ y *matriz de transición* $\mathbf{P} = (p_{ij}) \in \mathbb{R}_+^{|S| \times |S|}$, es una sucesión de variables aleatorias $\{X_n, n \geq 0\}$ con valores en S y definidas en el mismo espacio de probabilidad tales que

- $\mathbb{P}(X_0 = i) = a_i$ para todo $i \in S$
- $\mathbb{P}(X_{n+1} = j | X_0 = i_0, \dots, X_{n-1} = i_{n-1}, X_n = i) = \mathbb{P}(X_{n+1} = j | X_n = i)$ para todo $i \in S$

De aquí, es importante notar que las cadenas de Markov tienen la propiedad de que la probabilidad condicional de que el sistema se encuentre en un estado futuro depende únicamente del estado presente y no de la secuencia completa de eventos que llevaron al estado actual.

Propiedad 1. (Punto 2)

$$\mathbb{P}(X_0 = i_0, \dots, X_{n-1} = i_{n-1}, X_n = i_n) = a_{i_0} p_{i_0 i_1} \dots p_{i_{n-1} i_n}$$

para todo i_0, \dots, i_n .

Demostración. Esta prueba se realizará por inducción en n .

Caso Base: Sea $n = 1$.

$$\mathbb{P}(X_0 = i_0, X_1 = i_1) = \mathbb{P}(X_0 = i_0)\mathbb{P}(X_1 = i_1|X_0 = i_0) = a_{i_0}p_{i_0i_1}$$

Hipótesis de Inducción: Suponga que la propiedad se cumple para $n = k$.

$$\mathbb{P}(X_0 = i_0, \dots, X_{k-1} = i_{k-1}, X_k = i_k) = \mathbb{P}(X_0 = i_0) \cdots \mathbb{P}(X_k = i_k|X_{k-1} = i_{k-1}) = a_{i_0}p_{i_0i_1} \cdots p_{i_{k-1}i_k}$$

Paso inductivo: Se quiere mostrar que se cumple para $n = k + 1$. Haciendo uso de la regla de la multiplicación:

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_0 = i_0, \dots, X_{k+1} = i_{k+1}) &= \mathbb{P}(X_0 = i_0)\mathbb{P}(X_1 = i_1|X_0 = i_0) \cdots \\ &\quad \mathbb{P}(X_k = i_k|X_{k-1} = i_{k-1}, \dots, X_0 = i_0)\mathbb{P}(X_{k+1} = i_{k+1}|X_k = i_k, \dots, X_0 = i_0), \end{aligned}$$

por la hipótesis de inducción

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_0 = i_0, \dots, X_{k+1} = i_{k+1}) &= a_{i_0}p_{i_0i_1} \cdots p_{i_{k-1}i_k}\mathbb{P}(X_{k+1} = i_{k+1}|X_k = i_k) \\ &= a_{i_0}p_{i_0i_1} \cdots p_{i_{k-1}i_k}p_{i_ki_{k+1}} \end{aligned}$$

Mostrando así la propiedad I. □

Note que si algún $p_{i_ki_{k+1}} = 0$, simplemente significa que la transición del estado i_k al estado i_{k+1} no es posible. En este caso, la probabilidad de llegar a i_{k+1} desde i_k sería 0, y la expresión se ajustaría en consecuencia, multiplicando por 0 en ese paso particular.

Propiedad II. (Punto 3)

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = j_1, \dots, X_{n+m} = j_m | X_0 = i_0, \dots, X_n = i_n) = \mathbb{P}(X_1 = j_1, \dots, X_m = j_m | X_0 = i)$$

siempre que $\mathbb{P}(X_0 = i_0, \dots, X_{n-1} = i_{n-1}, X_n = i) > 0$

Demostración. Por definición y usando la Propiedad I,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_{n+1} = j_1, \dots, X_{n+m} = j_m | X_0 = i_0, \dots, X_n = i_n) &= \frac{\mathbb{P}(X_{n+1} = j_1, \dots, X_{n+m} = j_m, X_0 = i_0, \dots, X_n = i_n)}{\mathbb{P}(X_0 = i_0, \dots, X_n = i_n)} \\ &= \frac{\mathbb{P}(X_0 = i_0, \dots, X_n = i_n, X_{n+1} = j_1, \dots, X_{n+m} = j_m)}{\mathbb{P}(X_0 = i_0, \dots, X_n = i_n)} \\ &= \frac{a_{i_0}p_{i_0i_1} \cdots p_{ij_1} \cdots p_{j_{m-1}j_m}}{a_{i_0}p_{i_0i_1} \cdots p_{i_{n-1}i_n}} \\ &= p_{ij_1} \cdots p_{j_{m-1}j_m} \end{aligned}$$

Como $\mathbb{P}(X_0 = i, \dots, X_m = j_m) = a_i p_{ij_1} \cdots p_{j_{m-1}j_m}$

$$\begin{aligned} \implies \mathbb{P}(X_{n+1} = j_1, \dots, X_{n+m} = j_m | X_0 = i_0, \dots, X_n = i_n) &= \frac{\mathbb{P}(X_0 = i, \dots, X_m = j_m)}{a_i} \\ &= \frac{\mathbb{P}(X_0 = i, \dots, X_m = j_m)}{\mathbb{P}(X_0 = i)} \\ &= \mathbb{P}(X_0 = i, \dots, X_m = j_m | X_0 = i). \end{aligned}$$

□

Propiedad III. (*Punto 4*) Para todo $n \geq 1$

$$\mathbb{P}(X_n = j | X_0 = i) = p_{ij}^{(n)},$$

donde $\mathbf{P}^n = (p_{ij}^{(n)})$

Demostración. Para demostrar que $\mathbb{P}(X_n = j | X_0 = i) = (P^n)_{ij}$ para todo $n \geq 1$, donde P^n es la matriz de transición de probabilidad elevada a la potencia n , podemos usar el principio de inducción.

Caso Base: Sea ($n = 1$)

$$\mathbb{P}(X_1 = j | X_0 = i) = p_{ij}$$

Hipótesis de Inducción: Suponga que para $n = k$ se tiene que $\mathbb{P}(X_k = j | X_0 = i) = (\mathbf{P}^k)_{ij}$.

Paso Inductivo: Por probabilidad total, $\mathbb{P}(X_{k+1} = j | X_0 = i)$ se puede escribir como la suma de probabilidades sobre todos los posibles estados anteriores:

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_{k+1} = j | X_0 = i) &= \sum_l \mathbb{P}(X_{k+1} = j, X_k = l | X_0 = i) \\ &= \sum_l \mathbb{P}(X_k = l | X_0 = i) \mathbb{P}(X_{k+1} = j | X_k = l, X_0 = i) \\ &= \sum_l \mathbb{P}(X_k = l | X_0 = i) p_{lj} \\ &= \sum_l (\mathbf{P}^k)_{il} p_{lj} \quad (\text{por hipótesis de inducción}) \\ &= ((\mathbf{P}^k) \mathbf{P})_{ij} \\ &= (\mathbf{P}^{k+1})_{ij} \end{aligned}$$

Mostrando así que la afirmación es verdadera. □

2.1.2. Distribuciones Estacionarias

Una medida invariante es un vector de probabilidades que no cambia bajo la aplicación de la matriz de transición.

Definición 2. Una *medida invariante* para una matriz de transición \mathbf{P} es una medida no negativa ν sobre el espacio de estados S tal que

$$\nu \mathbf{P} = \nu.$$

Si ν es una medida de probabilidad decimos que es una *distribución estacionaria* y se denota usualmente como π .

En términos prácticos, esto implica que si la cadena de Markov comienza en un estado con la medida invariante π , entonces la distribución de probabilidad en estados futuros seguirá siendo la misma, pues no cambia con el tiempo.

Proposición. (*Punto 5*) Sea $\{X_n, n \geq 0\}$ cadena de Markov con matriz de transición P y distribución inicial π , con π distribución estacionaria. Entonces, para todo $n \geq 1$ y todo estado j se tiene que $\mathbb{P}(X_n = j) = \pi(j)$.

Demostración. Prueba por inducción en n .

Caso base: Sea $n = 1$. Por probabilidad total y la propiedad de las cadenas de Markov

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(X_1 = j) &= \sum_i \mathbb{P}(X_0 = i) \cdot \mathbb{P}(X_1 = j \mid X_0 = i) \\ &= \sum_i \pi(i) \cdot p_{ij} \\ &= \pi(j) \sum_i p_{ij} = \pi(j).\end{aligned}$$

Hipótesis de inducción: Suponga que la afirmación es verdadera para $n = k$, es decir,

$$\mathbb{P}(X_k = j) = \pi(j).$$

Paso inductivo: Se quiere demostrar que $\mathbb{P}(X_{k+1} = j) = \pi(j)$. Por probabilidad total y la propiedad de las cadenas de Markov

$$\mathbb{P}(X_{k+1} = j) = \sum_i \mathbb{P}(X_k = i) \cdot \mathbb{P}(X_{k+1} = j \mid X_k = i),$$

haciendo uso de la hipótesis de inducción y que π es una medida invariante,

$$\mathbb{P}(X_{k+1} = j) = \sum_i \pi(i) \cdot p_{ij} = \pi(j)$$

Mostrando así que $\mathbb{P}(X_n = j) = \pi(j)$ para todo $n \geq 1$ y todo estado j .

□

2.1.3. Cadenas de Markov Reversibles e Irreducibles

Otra caracterización interesante para las cadenas de Markov es cuando su matriz de transición P es reversible. Formalmente:

Definición 3. Se dice que una *cadena de Markov con matriz de transición P es reversible* si existe una distribución μ sobre S tal que satisfaga las llamadas *ecuaciones de balance detallado*, esto es, para todo $i, j \in S$ se tiene que

$$\mu(i)p_{ij} = \mu(j)p_{ji}$$

En este tipo de cadenas de Markov existe una medida de probabilidad invariante π que satisface la propiedad de reversibilidad, es decir, que la cadena tiene la misma probabilidad de ir pasar del estado i al j como del j al i .

Proposición. (*Punto 6*) Si P es reversible con μ que satisface las ecuaciones de balance detallado, entonces μ es distribución estacionaria.

Demostración. Se tiene como objetivo mostrar que μ es una distribución estacionaria, es decir que $\mu\mathbf{P} = \mu$. Teniendo en cuenta que $\mu(i)p_{ij} = \mu(j)p_{ji}$

$$\mu\mathbf{P} = \sum_i \mu(i)p_{ij} = \sum_i \mu(j)p_{ji} = \mu(j) \sum_i p_{ji} = \mu(j)$$

Mostrando así que μ es una distribución estacionaria. \square

Para cerrar esta sección, se introducirá la definición de una cadena de Markov irreducible y un teorema que relaciona dicha definición con la de distribuciones estacionarias.

Definición 4. Una cadena de Markov es *irreducible* si para todo i, j existe un n tal que

$$P(X_n = j | X_0 = i) > 0.$$

Teorema 5. Dada una cadena de Markov irreducible, existe una única distribución estacionaria.

2.2. Modelo de Ising

Una de las aplicaciones importantes de las cadenas de Markov es el modelo de Ising en física. El modelo de Ising permite comprender el comportamiento magnético de materiales, este modelo es simulado a través de cadenas de Markov ya que con estas se puede analizar la dinámica temporal de los sistemas. Puntualmente, cada configuración de espines es representado con una cadena de Markov. Esto es de vital importancia, pues no es posible medir directamente las propiedades microscópicas de un sólido. El modelo tiene como objetivo comprender las propiedades magnéticas de un material a cierta temperatura, analizando la distribución de una variable intrínseca de las partículas: el espín.

Para simular este tipo de sistemas, se propone modelar un sólido como un grafo $G(V, E)$, donde V representa los vértices del grafo que simbolizan los átomos del sólido y E denota los bordes que conectan a otros átomos con valor un peso que puede interpretarse como la energía de interacción entre dichos átomos. Cada elemento del vértice puede tener un valor de espín $\{-1, +1\}$. A todas estas combinaciones posibles de valores de espín la denotaremos $S = \{-1, 1\}^V$.

Físicamente, las partículas con espines diferentes tienen un estado de energía mayor que aquellas con espines iguales. Siguiendo esta regla simple, el estado de energía mínimo es aquel en el que todas las partículas que componen el sólido tienen el mismo valor de espín. Esta energía se puede cuantizar considerando que el hamiltoniano del sistema es,

$$H(\sigma) = - \sum_{\{x,y\} \in E} \sigma(x)\sigma(y). \quad (2.1)$$

Sin embargo, la temperatura induce cambios en los valores de espín y el modelo de Ising se encarga de dar la descripción de la competencia entre el orden y el desorden en el material, donde la temperatura fomenta el desorden en el sistema, mientras que las interacciones de espín promueven el orden. Teniendo esto en cuenta, se exploran las interacciones de espín entre partículas una por una, priorizando las configuraciones de espín que minimizan la energía del sistema. No obstante, se considera un cambio espontáneo de espín causado

por fluctuaciones térmicas, esta probabilidad de un cambio espontáneo de espín se puede describir a través de la distribución de Gibbs:

$$\pi(\sigma) = \frac{e^{\beta H(\sigma)}}{Z(\beta)},$$

donde β es un parámetro inversamente proporcional a la temperatura y $Z(\beta)$ es la función de partición, que cumple el papel de una constante de normalización. Esta dinámica, regida por la distribución de Gibbs, se modela mediante la matriz de transición,

$$p_{\sigma\sigma'} = \frac{1}{|V|} \sum_{x \in V} \frac{e^{\beta \sigma'(x) S(\sigma, x)}}{e^{-\beta \sigma'(x) S(\sigma, x)} + e^{\beta \sigma'(x) S(\sigma, x)}} 1_{\{\sigma(y) = \sigma'(y) \text{ para todo } y \neq x\}}.$$

La distribución de Gibbs es la única distribución reversible para la matriz de transición propuesta.

Intuitivamente, se espera que a bajas temperaturas (con β grande), la probabilidad de cambio de espín sea tan baja que el sistema tienda al orden, ya que las interacciones de espín prevalecen. Esto implica físicamente que el material esté magnetizado, correspondiendo a una fase ferromagnética. Por otro lado, cuando la temperatura es muy alta (β cercano a 0), el cambio de espín espontáneo es muy probable, llevando al sistema a un estado desordenado con una distribución equitativa de espines, característica de una fase paramagnética.

Además de estos casos límite, existe una temperatura crítica T_C que delimita el estado de orden y desorden del sistema. A esta temperatura, el sistema se encuentra en un estado mixto de orden y desorden, con *clusters* que tienen espín -1 y otros con espín +1 simultáneamente, es decir, hay cierto orden local pero no global.

3

Simulaciones

3.1. Simulando una Cadena de Markov (*Punto 1*)

Para simular una cadena de Markov, se implementó un código en Python utilizando la biblioteca NumPy. En particular, se crea una cadena de Markov en tiempo discreto con una distribución inicial específica y probabilidades de transición determinadas.

Se definió una función auxiliar, $g(u, a)$, para calcular el próximo estado basándose en la distribución inicial a , guiado por un número aleatorio u (generado con NumPy). Además, se implementó la función auxiliar $f(i, u, P)$ que calcula el siguiente estado basándose en el estado actual i y las probabilidades de transición proporcionadas por la matriz de transición P . La función principal, `simulate_markov_chain(a, P, num_steps)`, utiliza las dos funciones auxiliares ya descritas e itera sobre un número especificado de pasos. En cada iteración, se determina el próximo estado con base en la distribución inicial o las probabilidades de transición, agregando cada estado simulado a una lista.

Para su utilización se deben ingresar el vector de la distribución inicial, la matriz de transición y el número de pasos deseados para la simulación. Como respuesta, el código simula una cadena de Markov de longitud `num_steps` basándose en un vector de distribución inicial a y una matriz de transición P .

3.2. Simulando el modelo de Ising (*Punto 8*)

3.2.1. Funciones Auxiliares

Definiendo el campo de Espines

Para simular el modelo de Ising, se han desarrollado 3 funciones para simular una red bidimensional de espines y realizar actualizaciones en la configuración de la red siguiendo las reglas características del modelo.

La función `create_random_spin_grid(N)` genera una configuración inicial aleatoria de espines en una matriz cuadrada tamaño $N \times N$. Cada punto en la red puede tener un espín igual a -1 o 1, lo que representa las direcciones opuestas de magnetización.

Por otro lado, la función `ising_update(grid, N, M, beta)` se encarga de llevar a cabo una actualización del campo de espines. Se enfoca en un punto de coordenadas (N, M) y teniendo en cuenta la interacción con los espines vecinos y el parámetro de temperatura β

aplica las reglas del modelo para actualizar la red en el punto dado. Asimismo, guarda una copia de la configuración anterior para tener referencia del cambio de energía más fácilmente.

La función `ising_step(grid, beta)` realiza un paso completo de actualización en la red de espines, aplicando la función `ising_update` a cada punto de la red. La función retorna la nueva configuración de la red después de realizar las actualizaciones.

En conjunto, estas funciones construyen una red bidimensional de espines y la actualiza siguiendo el modelo de Ising para explorar y comprender como la temperatura afecta la magnetización.

Debido a los largos tiempos de compilación, se construyó esta misma estructura usando Cython, lo cual mejoro la eficiencia del código y redujo significativamente el tiempo de compilación para un número mayor de iteraciones. A estas funciones se les nombró `_cy_ising_update` y `cy_ising_step`, haciendo referencia a las dos últimas funciones ya descritas. La implementación del código fue tomada de [2].

Cabe mencionar que aunque tienda a darse el cambio que minimice la energía del sistema es posible que, debido a las fluctuaciones térmicas, el estado evolucione de manera espontánea ignorando este criterio. Esta probabilidad es dada por la distribución de Gibbs.

Calculando la Energía Total del Sistema

La función `energia(grid)` proporciona el cálculo de la energía total en un sistema dado. Toma como parámetro una matriz bidimensional denominada `grid` (creada con ayuda de las funciones expuestas anteriormente) que representa el estado del sistema mediante la orientación de los espines. La energía total del sistema se calcula considerando las interacciones entre espines vecinos.

El procedimiento de cálculo de la energía se realiza en dos partes: primero, se evalúan las contribuciones de los enlaces horizontales y, luego, se examinan las contribuciones de los enlaces verticales. Para cada posición en la matriz, la función suma el producto de los espines en esa posición y su espín vecino correspondiente. Este producto se multiplica por -1 para reflejar la disminución de energía cuando los espines son paralelos.

La función retorna la suma total de las contribuciones de enlaces horizontales y verticales, representando así la energía total del sistema en el estado dado por la matriz `grid`. La comprensión de la energía en el contexto del modelo de Ising es crucial para analizar las propiedades magnéticas de los materiales ferromagnéticos a diferentes temperaturas y condiciones externas.

3.2.2. Simulando el Modelo para un Campo de 250×250

La simulación del modelo de Ising se basó en tomar una red bidimensional de tamaño 250×250 y un parámetro β que tomaba valores de 0.20, 0.44 y 0.9. Los valores tomados de β corresponden a la temperatura crítica (0.44) y dos valores, uno inferior y otro superior. Se inició con una matriz de estados generada aleatoriamente mediante la función `create_random_spin_grid(250)`. La simulación se ejecutó a lo largo de 1,000,000 iteraciones.

En cada iteración, se realizó una actualización en cada punto de la matriz con el modelo de Ising (función `cy_ising_step`). Se guardaron valores de la energía total del sistema en la lista `energy_list` y almacenaron estados de la matriz actual cada 1000 iteraciones. Estos valores proporcionan una perspectiva de cómo evoluciona el sistema a lo largo del tiempo de simulación.

4

Resultados y Conclusiones

4.1. Resultados Computacionales de la Cadena de Markov

Para visualizar la función `simulate_markov_chain(a, P, num_steps)` se graficaron los valores obtenidos de la cadena para 100 iteraciones, Figura 4.1. Se tomó la distribución inicial de la probabilidad de la cadena de Markov:

$$a = (1, 0, 0, 0)$$

y la matriz de transición

$$P = \begin{bmatrix} 0.30 & 0.25 & 0.15 & 0.10 \\ 0.30 & 0.25 & 0.55 & 0.20 \\ 0.30 & 0.50 & 0.10 & 0.30 \\ 0.10 & 0.00 & 0.20 & 0.40 \end{bmatrix}.$$

En este caso, la probabilidad de empezar en el primer estado es 1, lo que fuerza el sistema a comenzar en ese estado.

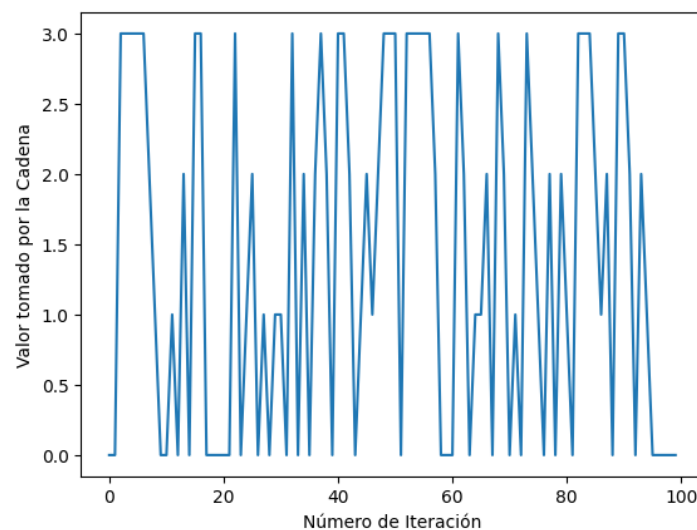


Figura 4.1: Gráfica que muestra cómo cambian los estados de la cadena a lo largo de los 100 pasos de la simulación. Cada punto en el gráfico representa el estado en un paso específico de la cadena.

Note que en la Figura 4.1 se pueden obtener únicamente 4 posibles estados, descritos con los números 0 al 3.

4.2. Resultados Computacionales del Modelo de Ising

La configuración aleatoria creada con la función `create_random_spin_grid(N=250)` puede visualizarse en la Figura 4.2. Cada color (blanco y negro) representa los valores de 1 o -1 (*spin up o spin down*). Se puede observar una cuadrícula completamente desordenada.

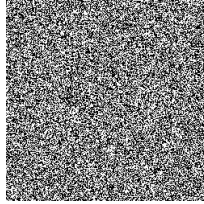


Figura 4.2: Mapeo de campo de espines aleatorio generado con la función `create_random_spin_grid`.

Los resultados obtenidos para la función `cy_ising_step` pueden visualizarse en la Figura 4.3. Se puede ver la evolución temporal (de izquierda a derecha) en el transcurso de 1,000,000 iteraciones para tres valores distintos de la constante β . Como era de esperarse, el β que representa valores de temperatura por encima de la temperatura crítica (0.20) tiende al desorden mientras que para los valores debajo de dicha temperatura (0.90) se ve un sistema completamente ordenado a medida que el sistema evoluciona temporalmente. Estos sistemas representan un estado paramagnético y ferromagnético, respectivamente.

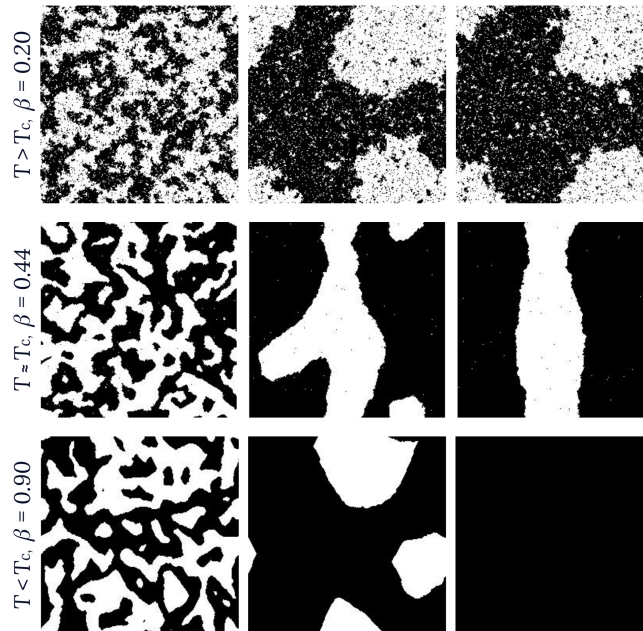


Figura 4.3: Mapeo de la configuración de espines (250×250) tomando valores distintos para β en 3 momentos dentro de las 1,000,000 iteraciones. Se escogieron los valores de β 0.20, 0.44 y 0.90 para entender como la temperatura afecta el sistema de menor energía. En cada fila se ve la evolución temporal del sistema en cada caso.

Por otro lado, el valor de β correspondiente al cercano a la temperatura crítica representa un estado mixto con *clusters* de espines alineados. Mostrando, nuevamente como era esperado, un orden local pero no global.

4.3. Conclusiones.

Se puede concluir que fue posible realizar a través de los métodos propuestos la simulación de las cadenas de Markov y del modelo de Ising.

La gráfica obtenida a partir de la simulación de las cadenas de Markov ilustra de manera clara y adecuada el cambio de estados a lo largo de 100 pasos basándose en una distribución inicial y una matriz de transición propuesta. Asimismo, se evidencia como la distribución inicial afecta directamente el comportamiento inicial del sistema.

En cuanto al modelo de Ising, la visualización de configuraciones iniciales aleatorias y la evolución temporal a través de 1,000,000 iteraciones tienen patrones esperados. A temperaturas superiores a la temperatura crítica se observa un comportamiento desordenado, mientras que a temperaturas inferiores se forma un sistema completamente ordenado. Finalmente, al aproximarnos a la temperatura crítica, se identifica un estado mixto con *clusters* de espines alineados, demostrando cómo la temperatura influye en la transición de fase del sistema. Lo anterior, permite visualizar como las propiedades microscópicas y las interacciones locales entre espines caracteriza el comportamiento macroscópico.

5

Implementación Computacional

5.1. Código

El código utilizado en este proyecto y todos sus detalles se puede encontrar en los notebooks de Jupyter en el siguiente [repositorio de GitHub](#).

5.1.1. Detalles de Implementación

Número de iteraciones

En la visualización de las cadenas de Markov se realizaron 100 iteraciones, Figura 4.1.

En el caso del modelo de Ising, para acercarnos lo más posible a una configuración que alcance la mínima energía se realizaron 1,000,000 de iteraciones en la cuadrícula de 250×250 , Figura 5.1.

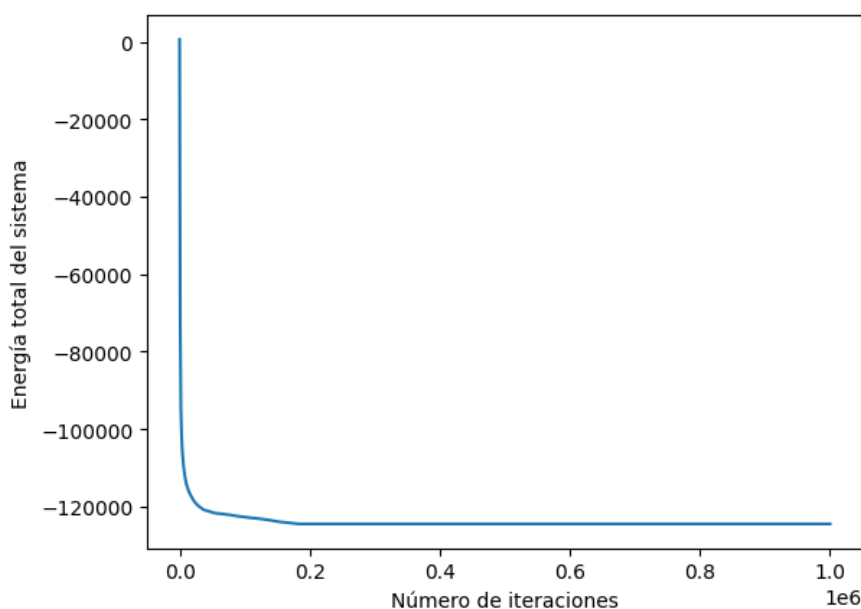


Figura 5.1: Valores de energía con $\beta = 0.90$ cada 1000 iteraciones. Se observa que la energía se encuentra en un lo suficientemente cercano al mínimo. Sin importar los valores tomados de β se observa un comportamiento similar.

A partir de esto se construyó la Figura 4.3

Parámetros utilizados y sus valores

Para la simulación de las cadenas de Markov si utilizaron los parámetros

$$a = (1, 0, 0, 0) \text{ y } \mathbf{P} = \begin{bmatrix} 0.30 & 0.25 & 0.15 & 0.10 \\ 0.30 & 0.25 & 0.55 & 0.20 \\ 0.30 & 0.50 & 0.10 & 0.30 \\ 0.10 & 0.00 & 0.20 & 0.40 \end{bmatrix}.$$

Ver, Figura 4.1.

Para el modelo de Ising, se utilizaron 3 valores para la constante β , los cuales correspondían a la temperatura crítica (0.44) y dos valores, uno inferior (0.90) y uno superior (0.20), para tener un punto de comparación en como se ordenan y desordenan los espines respecto a la temperatura del sistema, Figura 4.3.

Referencias

- [1] Mauricio Junca. *Proyecto Final curso Probabilidad de Honores 202320*.
- [2] *Optimization of Scientific Code with Cython: Ising Model | Pythonic Perambulations*. URL: <https://jakevdp.github.io/blog/2017/12/11/live-coding-cython-ising-model/>.