Simulación Estocástica: Teoría y Laboratorio

Laboratorio 3 - Modelo de Ising en $\mathbb{Z}^2$

Lunes 18 de Octubre, 2021

Autor: Manuel Torres.
Profesor: Joaquín Fontbona
Auxiliar: Pablo Araya.
Bruno Hernández.

Ingeniería Matemática
FACULTAD DE CIENCIAS
FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
UNIVERSIDAD DE CHILE

Definición: En el problema tenemos los siguientes elementos.

1. Un espacio (grilla) $\Lambda = \{-N, \ldots, N\}^2$.
2. El conjunto de posibles configuraciones en la grilla es $E^\star = \{-1, 1\}^\Lambda$, que sujeto a la condición de los bordes es:
$$E = \{x \in E_N : (\forall m \in \partial\Lambda), x(m) = 1\}.$$
3. El spin en el sitio m de la grilla es $x(n) \in \{-1, 1\}$.
4. La energía de una configuración $x \in E_N$ es
$$H(x) = \sum_{m \sim m'} (x(m) - x(m'))^2,$$
donde $m \sim m'$ denota que m y m' son vecinos en la grilla (el par aparece una vez en la cuenta de la suma).
5. La constante de normalización es
$$Z(\beta) = \sum_{y \in E} e^{-\beta H(y)}.$$

Definición: Sea β^{-1} la temperatura del sistema (un parámetro que será dado), luego la probabilidad de que el sistema se encuentre en el estado x es

$$\mathbb{P}(\text{Estado} = x) := \pi_x = \frac{e^{-\beta H(x)}}{Z(\beta)}, \quad \beta > 0,$$

donde (recordemos) la constante de normalización es

$$Z(\beta) = \sum_{y \in E} e^{-\beta H(y)}.$$

El *principio de mínima energía* (mecánica analítica) indica que un sistema físico tenderá a minimizar H.

La cantidad de estados posibles: Sea E el espacio de los posibles estados de Λ, luego

$$|E| = 2^{(2N-1)^2}.$$

Notemos que en cada celda $m \in \{-N, \ldots, N\}^2$ puede haber 2 estados posibles, i.e., $x(m) \in \{-1, 1\}$. Además consideramos que el estado para m en $\partial\Lambda$ es fijo ($x(m) = m, \forall m \in \partial\Lambda$), entonces la cantidad de posibles para una grilla de $n \times n$ es

$$2^{n^2-4(n-1)} = 2^{(n-2)^2}.$$

Luego como $n = 2N + 1$ sigue que

$$|E| = 2^{(2N-1)^2}.$$

Parte 1 - Calcular $Z(\beta)$ (constante de normalización)

Recordemos que la constante de normalización es

$$Z(\beta) = \sum_{y \in E} e^{-\beta H(y)}.$$

Al calcular $Z(\beta)$ realizamos la suma de $|E|$ términos. Tenemos que el cardinal E en términos del tamaño de Λ es

$$|E| = 2^{(2N-1)^2}, \quad |\Lambda| = (2N+1)^2.$$

Considerando $N = 10$ tendremos que sumar 2^{162} términos!

Según lo anterior, suponiendo que una suma demora en el orden de $10^{-5}[s]$ (dato obtenido usando la librería *time*), para la suma con $N = 10$ hay que realizar $\sim 2^{162}$ sumas, que se traduce en

$$t_{suma}(N = 10) = 5{,}846 \times 10^{43}[s] = 1{,}629 \times 10^{40}[hr] = 6{,}766 \times 10^{38}[dia].$$

Sin considerar años bisiestos, al cumplir 20 años hemos vivido 7300 días!

Sea G sobre E un grafo, donde xy es una arista de G ssi x e y difieren en exactamente un sitio (celdas adyacentes). Calculamos la matriz estocástica $R = (R_{xy})$ al grafo para los algoritmos de *Metrópolis* y *Gibbs* respectivamente.

Matriz estocástica para cada algoritmo:

1. Para el algoritmo de Gibbs obtenemos:

$$R_{xy} = \begin{cases} \dfrac{e^{-\beta H(x)}}{\displaystyle\sum_{z \sim x} e^{-\beta H(z)}}, & x \sim y, \\ 0, & x \not\sim y. \end{cases}$$

2. Para el algoritmo de Metrópolis obtenemos:

$$R_{xy} = \begin{cases} \dfrac{1}{(n-2)^2}, & x \sim y, \\ 0, & x \not\sim y. \end{cases}$$

Luego, calculamos $\dfrac{\pi_y R_{yx}}{\pi_x R_{xy}}$ para cada algoritmo.

1. Para el algoritmo de Gibbs obtenemos:

$$\frac{\pi_y R_{yx}}{\pi_x R_{xy}} = \frac{\sum\limits_{z\sim y} e^{-\beta H(z)}}{\sum\limits_{z\sim x} e^{-\beta H(z)}}.$$

2. Para el algoritmo de Metrópolis obtenemos:

$$\frac{\pi_y R_{yx}}{\pi_x R_{xy}} = e^{-\beta(H(y)-H(x))}.$$

Recordemos que

$$H(x) = \sum_{m\sim m'} (x(m) - x(m'))^2,$$

luego Notemos que la expresión $H(y) - H(x)$ se puede simplificar ya que tan solo se consideran los vecinos inmediatos de la posición $m \in \Lambda$, quedando tan solo 4 sumandos,

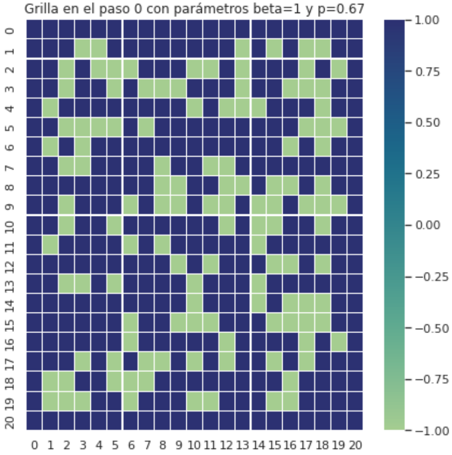
$$\begin{aligned} \Delta H &= \sum_{m\sim m'} (y(m) - y(m'))^2 - \sum_{m\sim m'} (x(m) - x(m'))^2 \\ (\text{Consideramos } m = m_{ij}) &= 4x(m_{i,j})[x(m_{i-1,j}) + x(m_{i+1,j}) + x(m_{i,j-1}) + x(m_{i,j+1})] \end{aligned}$$

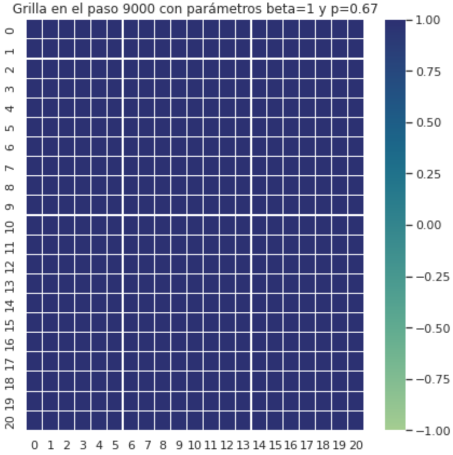
Parte 3 - Implementación de Ising

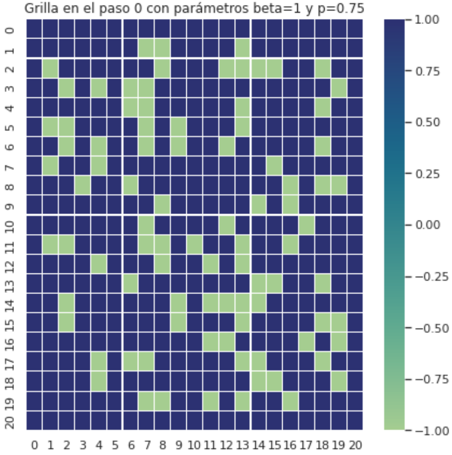
Sean $(U_n)_{n\in\mathbb{N}}$, $(V_n)_{n\in\mathbb{N}}$ secuencias de variables aleatorias i.i.d. $\sim U([0,1])$ independientes entre sí, y f la función de transición asociada a R (matriz calculada en la parte anterior).

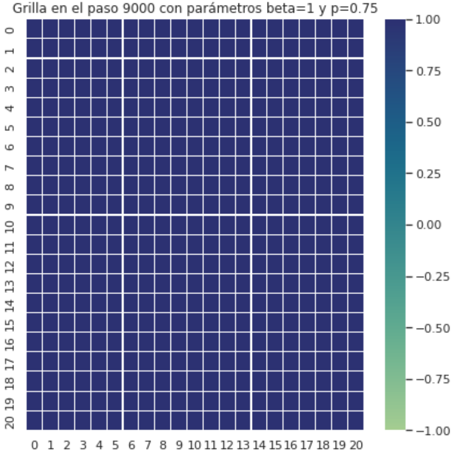
Inicializamos: X_0 con entradas i.i.d $\sim 2\cdot\text{Bernoulli}(p)-1$ y $x(m)=1, \forall m\in\partial\Lambda$
for $n\geq 1$ **do**
    Definir $y=f(V_n,x)$,
    Definir $x=X_{n-1}$,
    if $U_n\leq e^{-\beta(H(y)-H(x))}$: **then**
        $X_{n+1}=y$.
    else
        $X_{n+1}=X_n$.
    end if
end for

Parte 3 - Estado inicial y estado final para $p = \frac{2}{3}$



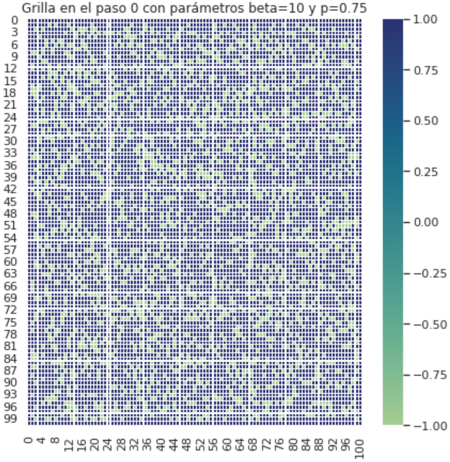


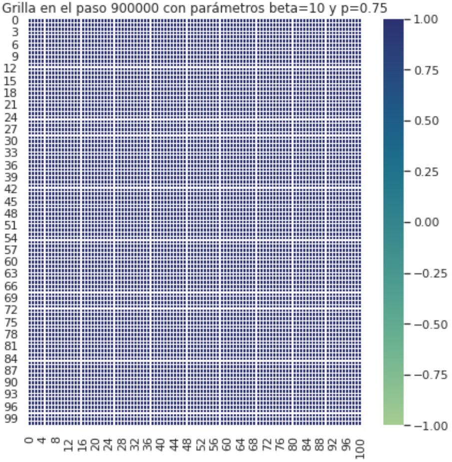

Grilla en el paso 0 con parámetros beta=1 y p=0.75
0
1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
1.00
0.75
0.50
0.25
0.00
−0.25
−0.50
−0.75
−1.00


Grilla en el paso 9000 con parámetros beta=1 y p=0.75
0
1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
1.00
0.75
0.50
0.25
0.00
−0.25
−0.50
−0.75
−1.00

Parte 4 - Estado inicial y estado final para $p = \frac{3}{4}$y $\beta = 10$ (grande)

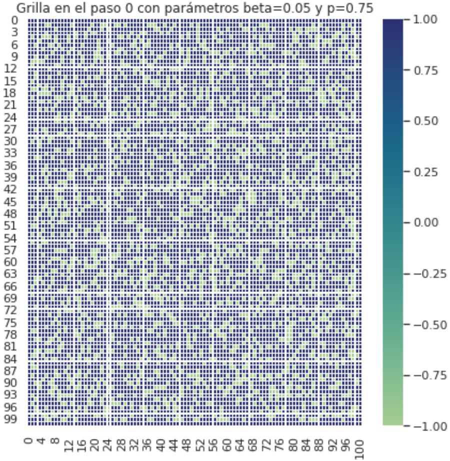
Mayor β (y menor temperatura), el sistema tiende a minimizar su energía y tener magnetización perfecta (todos los spins iguales).

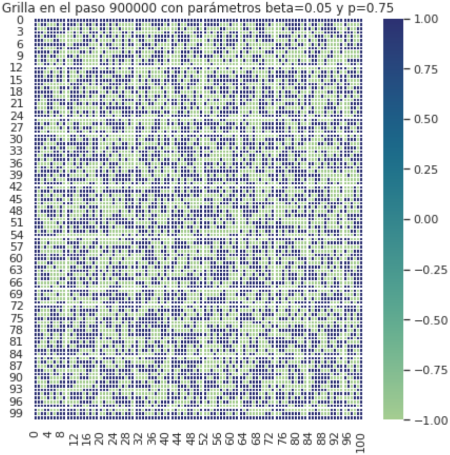




Parte 4 - Estado inicial y estado final para $p = \frac{2}{3}$ y $\beta = 0{,}05$ (pequeño)

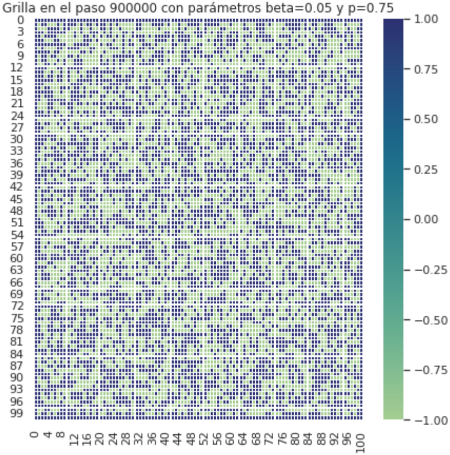
Menor β (y mayor temperatura), el sistema presenta la coexistencia de estados, sin embargo tiende a minimizar su energía en contraste con la entropía (haciendo zoom, hay zonas con estado uniforme).



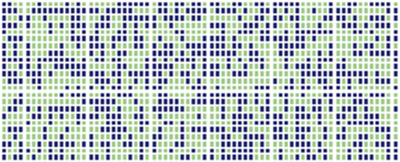


Parte 4 - Estado inicial y estado final para $p = \frac{2}{3}$ y $\beta = 0{,}05$ (pequeño)

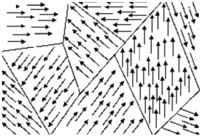
Menor β (y mayor temperatura), el sistema presenta la coexistencia de estados, sin embargo tiende a minimizar su energía en contraste con la entropía (haciendo zoom, hay zonas con estado uniforme).



Realizando zoom se observa lo siguiente:

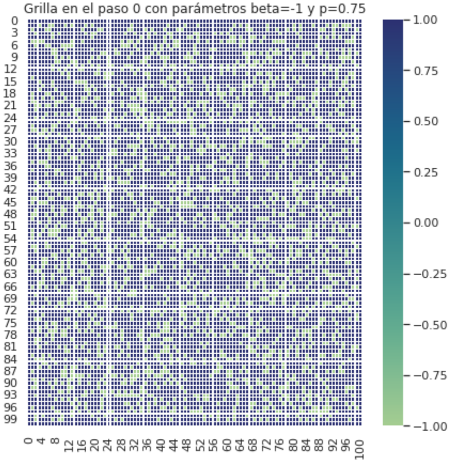


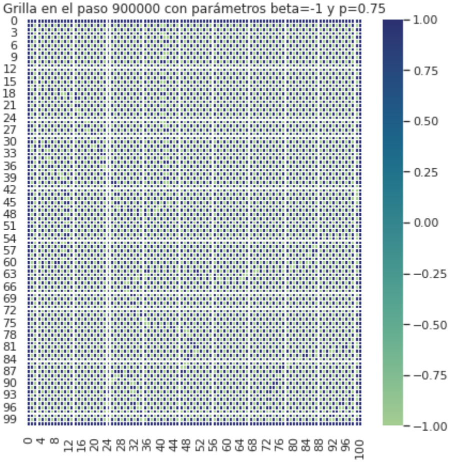
Localmente se tiende a minimizar la energía, hay fronteras que reparan regiones de similar spin (esto en física se conoce como *dominio magnético*).



Parte 4 - Estado inicial y estado final para $p = \frac{3}{4}$y $\beta = -1$ (negativo)

Caso en que los spin alternan (similar al antiferromagnétismo, lo que ocurre con baja temperatura).



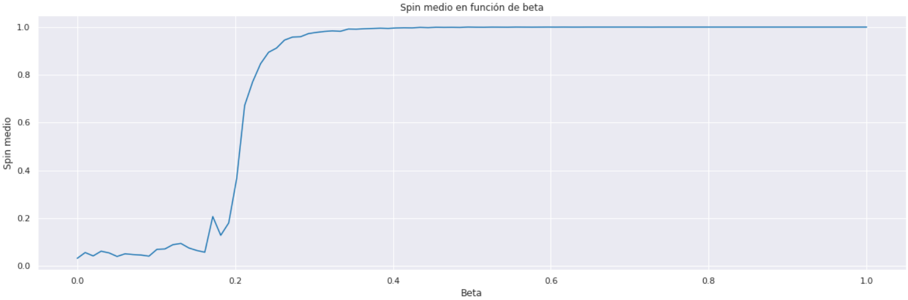


¿Podemos tener temperatura negativa? R: No, para explicar el fenómeno tenemos que ajustar la energía considerando la energía interna, el calor y la entropía! (propuesto).

Parte 5 - Spin medio en función de beta

El *spin medio* (que corresponde al promedio simple de los spins) es:

$$s = \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{m \in \Lambda} x(m).$$



Se puede observar que $\beta_C \in [0{,}2; 0{,}3]$

Parte 6 - Spin medio (cálculo refinado) en función de beta