

Simulación del modelo de Ising bidimensional en una red cuadrada

Angie Nicole Hernández Durán
David Leonardo Ramos Salamanca
Universidad Industrial de Santander - Bucaramanga, Colombia

May 2021

Introducción

La física estadística busca explicar los resultados predichos por la termodinámica mediante el análisis microscópico de los sistemas físicos. Como tal, el cálculo de las propiedades físicas de un sistema macroscópico en física estadística es un problema que involucra la descripción de un número muy grande de grados de libertad. Cuando las interacciones entre las partes de un sistema son sencillas o inexistentes, la física estadística nos permite realizar predicciones de las propiedades físicas de manera analítica. Ejemplos de este tipo de sistemas son los gases ideales o los materiales paramagnéticos.

Para sistemas más interesantes sin embargo, las soluciones analíticas son difíciles o imposibles de obtener. En este caso, se hace necesario utilizar métodos computacionales para obtener las propiedades físicas de los sistemas. El método computacional más usado para obtener las propiedades físicas en equilibrio de sistemas interactuantes es el método de Monte Carlo. En lo que se refiere a sistemas interactuantes, el modelo de Ising ha sido uno de los más exitosos en explicar fenómenos críticos en múltiples disciplinas. La característica importante del modelo de Ising es la existencia de una transición de fase para una cierta temperatura denominada la temperatura crítica. En esta transición de fase las interacciones de corto rango entre elementos del sistema dan lugar a comportamiento colectivo de largo alcance. Introducido originalmente para estudiar materiales ferromagnéticos con un eje de alta antisimetría, este ha sido usado para modelar comportamientos críticos en sistemas bi-atómicos [3], redes neuronales [4], sociología [6], entre otros.

En este trabajo simularemos el modelo de Ising 2D en una red cuadrada usando el método de Monte Carlo. Calcularemos las cantidades físicas en equilibrio relevantes. Observaremos la existencia de una transición de fase y estimaremos la temperatura crítica y los exponentes críticos.

1 Planteamiento del problema

El estudio de los observables macroscópicos de un sistema requiere realizar una aproximación de estas cantidades, debido a que la cuantificación exacta de estas requiere la consideración de una infinita cantidad de configuraciones, lo cual no es posible. Tómese, por ejemplo, la magnetización promedio de un sistema de espines, dada por la expresión:

$$\langle M \rangle = \frac{\sum_{i=1}^{\infty} M_i e^{-H_i/K_B T}}{\sum_{i=1}^{\infty} e^{-H_i/K_B T}}, \quad (1)$$

donde T es temperatura, M_i es la magnetización de la configuración de espines i , H_i es la energía para la configuración i , la cual, consideraremos está dada por hamiltoniano del modelo de Ising:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j, \quad (2)$$

donde J modula el acoplamiento entre espines adyacentes, y $\langle i, j \rangle$ indica suma sobre los primeros vecinos del espín ubicado en el sitio (i, j) . Para una red cuadrada se tienen cuatro primeros vecinos.

La incapacidad de considerar infinitas configuraciones requiere acudir a la aproximación:

$$\langle M \rangle = \frac{\sum_{i=1}^N M_i e^{-H_i/K_B T}}{\sum_{i=1}^N e^{-H_i/K_B T}}, \quad (3)$$

la cual se acerca al valor real cuanto más grande sea el valor de N y más representativos del sistema sean los estados i considerados. El método de Monte Carlo es la herramienta que nos permitirá realizar estas aproximaciones de una manera consistente.

Como se mencionó en la introducción, el modelo de Ising presenta una transición de fase (esto es cierto solo para una dimensión de la red mayor a dos). Los exponentes críticos son cantidades que indican cómo se comporta un sistema cerca a su temperatura crítica T_c . Para el modelo de Ising, los exponentes relevantes α , β , γ y ν están definidos como [2]:

$$M(T) \sim (T_c - T)^\beta \quad (4)$$

$$C(T) \sim |T - T_c|^{-\alpha} \quad (5)$$

$$\chi(T) \sim |T - T_c|^{-\gamma}. \quad (6)$$

Finalmente, se espera observar efectos de tamaño finito. Esto es, que exista una dependencia de la temperatura crítica con el tamaño de la red. Lo cual hace que el cálculo de la temperatura crítica no sea inmediato.

El problema que se abordó en este trabajo consiste en el cálculo de la energía, magnetización, capacidad calorífica y susceptibilidad magnética de sistemas bidimensionales de espines utilizando la aproximación previamente ilustrada, considerando condiciones de frontera periódicas y diferentes tamaños del sistema. Adicionalmente, con el cálculo numérico de dichos observables se estimaron los exponentes críticos y la temperatura de Curie o temperatura crítica.

2 Estrategia de solución

A continuación describiremos cómo podemos estimar las cantidades mencionadas usando el método de Monte Carlo.

El cálculo de observables mediante el método de Monte Carlo busca evitar el uso de la función de partición y, en su lugar, calcular promedios utilizando el *muestreo de importancia*. Continuando el ejemplo de la sección anterior, en lugar de utilizar la ecuación 3, si podemos muestrear estados de la distribución canónica, el cálculo de la magnetización sería simplemente:

$$\langle M \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N M_i, \quad (7)$$

donde N es la cantidad de sitios en la red, para un sistema de lado L , $N = L \times L$. De esta manera, el muestreo de importancia simplifica el problema escogiendo estados de una manera consistente con las áreas importantes del espacio de fase del sistema.

El último paso del método de Monte Carlo es la obtención de estados distribuidos de acuerdo a la distribución canónica. Esto se puede lograr formando una cadena de Markov que genere estados cuya distribución límite es la distribución canónica.

El algoritmo de Metropolis es algoritmo más sencillo que existe para generar una cadena de Markov con una distribución límite deseada. Para nuestro caso, el algoritmo de Metropolis para muestrear de la distribución canónica requieren de inicializar el sistema en algún estado μ_n , y repetir los siguientes pasos hasta alcanzar la convergencia:

1. Se genera una nueva configuración ν a partir de μ . En el caso de interés, se trabajó con un sistema de *single-spin-flip dynamics*, lo que significa que cada posible estado ν se obtiene invirtiendo uno de los espines del estado μ .
2. Se calcula la diferencia de energía ΔE . En este caso, $\Delta E = 2J \sum_{\langle i,j \rangle} s_j s_i$
3. Se genera un número aleatorio $r \in [0, 1]$.
4. Se escoge el nuevo estado μ_{n+1} de acuerdo a:

$$\mu_{n+1} = \begin{cases} \nu & \text{if } r \leq \min(e^{-\beta \Delta E}, 1) \\ \mu_n & \text{en caso contrario.} \end{cases}$$

El anterior algoritmo siempre acepta un cambio en la configuración que disminuya la energía total del sistema. Adicionalmente, cuando una nueva configuración tiene una energía superior al estado anterior, esta puede ser seleccionada con una probabilidad dada por el factor de Boltzmann de la diferencia de energía. Elevando así la energía del sistema.

Este algoritmo se repetirá una cantidad de pasos antes de empezar el muestreo, para que la red de Markov alcance la distribución de equilibrio (termalización).

Una vez alcanzada la convergencia, se calculan los observables para un conjunto N de estados usando, además de la ecuación 7, las expresiones:

$$\langle E \rangle = -\frac{J}{N} \sum_{\langle i,l \rangle}^N s_i s_l \quad (8)$$

$$\langle \chi \rangle = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle |M| \rangle^2}{N K_B T}, \quad \langle M^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N M_i^2 \quad (9)$$

$$\langle C \rangle = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{N (K_B T)^2}, \quad \langle E^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (s_i s_j)^2. \quad (10)$$

Las anteriores ecuaciones para la energía (8), susceptibilidad magnética (9), calor específico (10) y magnetización (7), son calculadas para un rango de temperaturas, con el objetivo de observar el comportamiento del sistema cerca a la temperatura de crítica y para el cálculo de los exponentes críticos.

Los exponentes críticos se buscan utilizando el método de *finite size scaling*, donde se usan funciones de escalamiento para cada uno de los observables, $\tilde{M}, \tilde{\chi}, \tilde{C}$, que dependen del tamaño L del sistema, con el objetivo de compensar los efectos de tamaño finito:

$$\tilde{M}(L^{1/\nu}(T - T_c)) = M_L L^{\beta/\nu} \quad (11)$$

$$\tilde{\chi}(L^{1/\nu}(T - T_c)) = \chi_L L^{-\gamma/\nu} \quad (12)$$

$$\tilde{C}(L^{1/\nu}(T - T_c)) = C_L L^{-\alpha/\nu} \quad (13)$$

Las anteriores expresiones se utilizan para diferentes valores de los exponentes, y se busca que, en el valor apropiado del exponente, todos los datos de los diferentes tamaños de red deben colapsar en una sola curva [5].

Otra estrategia para el cálculo de los exponentes críticos utiliza las temperaturas críticas obtenidas a partir de los máximos alcanzados para el calor específico, y los valores de los observables en estas. Reduciendo las ecuaciones en 4, 5 y 6 al siguiente sistema:

$$M(T) \sim L^{-\beta/\nu} \quad (14)$$

$$C(T) \sim L^{\alpha/\nu} \quad (15)$$

$$\chi(T) \sim L^{\gamma/\nu}, \quad (16)$$

donde ν es el exponente crítico de la longitud de correlación, el cual para el modelo de Ising bidimensional tiene un valor de 1, es posible extraer relaciones lineales para la estimación de los exponentes críticos, aplicando logaritmo natural a estas expresiones [2]. La temperatura de Curie puede ser estimada utilizando un cálculo de doble precisión y utilizando el cumulante de Binder [1], definido como:

$$U_L = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle_L}{3\langle M^2 \rangle_L^2}. \quad (17)$$

Para todos los tamaños de red, este cumulante tiene el mismo valor en la temperatura crítica, por lo que los gráficos de este deben cruzarse en una temperatura correspondiente a la temperatura crítica. Sin embargo, como se mencionó anteriormente, este procedimiento requiere alta precisión, por lo que se suele utilizar la relación entre cumulantes de binder para diferentes tamaños.

3 Resultados y discusión

Nuestra implementación en Python del método de Monte Carlo para simular el modelo de Ising 2D en una red cuadrada puede encontrarse en el repositorio de GitLab https://gitmilab.redclara.net/ramosd/ising_monte_carlo.

3.1 Observables

Para el cálculo de los observables y cantidades necesarias se utilizaron cuatro tamaños de red cuadrada de lado L (5, 10, 15, 20), se utilizaron 19000 pasos para intentar alcanzar el equilibrio, en el cual se tomaron 1000 muestras para 100 temperaturas en el rango 1.0 a 7.0 (en unidades donde $k_b = J = 1$). La figura 1 ilustra los resultados obtenidos para los observables.

Al rededor de la temperatura crítica, correspondiente a los picos observados en el la Figura 1 y donde ocurren transiciones de fase, se observa un efecto de alentamiento crítico, es decir, el sistema tarda más en alcanzar el equilibrio cerca a la temperatura crítica. El número de historias utilizadas no es suficiente para que el sistema alcance el equilibrio, por lo que en esta región se observan fluctuaciones en la tendencia de los observables. En la Figura 2, se muestran los gráficos obtenidos para el mismo sistema, utilizando 500000 historias para alcanzar el equilibrio en temperaturas cercanas a la temperatura crítica y 100000 para las demás temperaturas, lo cual evidentemente reduce estas fluctuaciones para todo el rango de temperaturas.

En los gráficos correspondientes a la susceptibilidad magnética, en las Figuras 1 y 2 se aprecia que la temperatura crítica es diferente para cada uno de los tamaños de red considerados, los esperados efectos del tamaño finito. Una manera de estimar la verdadera temperatura crítica es utilizando el cumulante de Binder (17), ilustrado en la Figura 3.

En teoría, los gráficos de este cumulante para cada tamaño deben tener el mismo valor en la temperatura crítica, en la Figura 4 se presenta un zoom cerca a la transición de fase. En la Figura

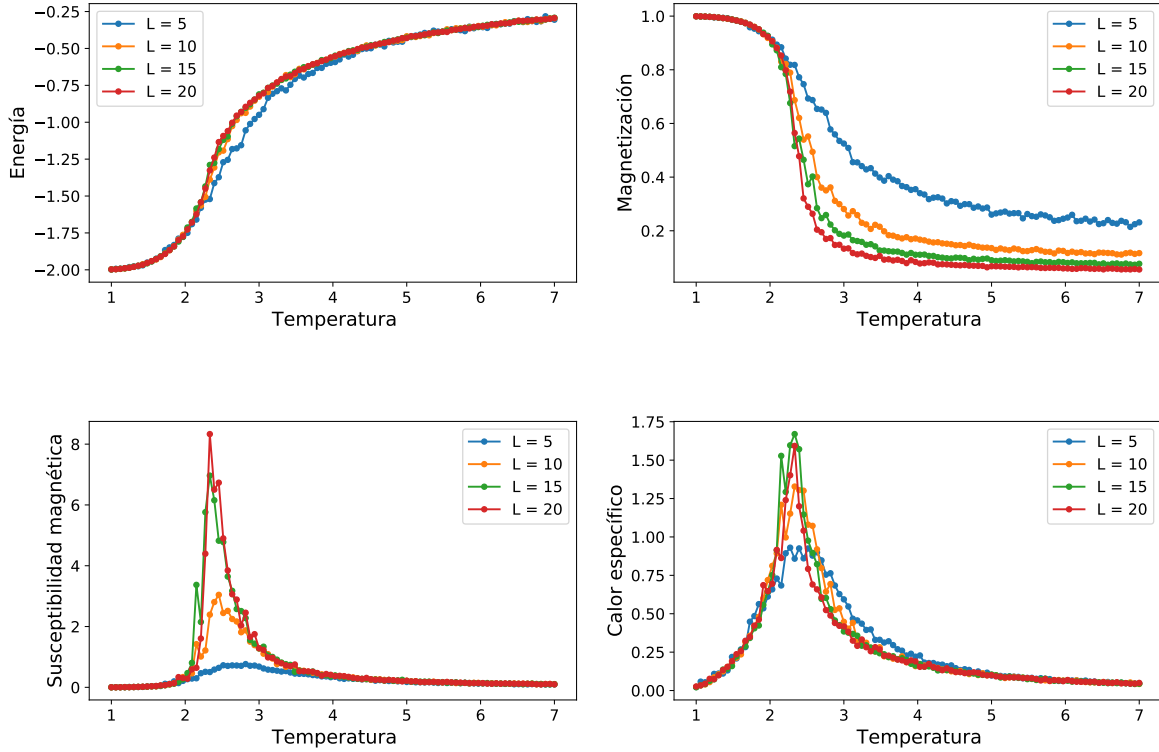


Figure 1: Gráficos para la energía, magnetización, susceptibilidad magnética y calor específico para los diferentes tamaños de red, calculados utilizando 19000 pasos para llevar el sistema al equilibrio. El efecto de alentamiento crítico es evidente en las fluctuaciones observadas cerca a la temperatura correspondiente a las transiciones de fase.

4(a) se observa fluctuaciones grandes y múltiples cruces entre las gráficas de los diferentes tamaños de red. La Figura 4(b) generada con un número mayor de pasos no presenta estas fluctuaciones, sin embargo solo contiene la información de dos tamaños de red. La temperatura crítica que indica este último está entre 2.21 y 2.27, mucho más cercana al límite inferior, lo cual se encuentra dentro de la precisión de la simulación, siendo la temperatura teórica 2.269 y los intervalos de temperatura utilizados de 0.06.

Para obtener una mejor estimación de la temperatura crítica se realiza un cálculo de doble precisión, graficando los cocientes entre cumulantes de Binder para diferentes tamaños de red, con el objetivo de disminuir el efecto de las fluctuaciones. La figura 5 ilustra esta técnica. La temperatura crítica obtenida utilizando este método está entre 2.27 y 2.33, rango que está en su mayoría contenido dentro de la precisión de la simulación.

Usar esta técnica mejora significativamente la estimación de la temperatura crítica, sobre la cual no era posible realizar una evaluación utilizando la Figura 3(a).

3.2 Exponentes críticos

La primera tentativa a la estimación de los exponentes críticos se realizó con un colapso de datos para los diferentes tamaños de red, utilizando las ecuaciones 11, 12 y 13. Dando diferentes valores para los exponentes críticos, con el objetivo de determinar el valor para el cual los datos de todos los tamaños utilizados colapsan en una misma curva. Este comportamiento, sin embargo, es muy difícil de conseguir cuando se tiene datos con muchas fluctuaciones. Los gráficos del colapso los datos

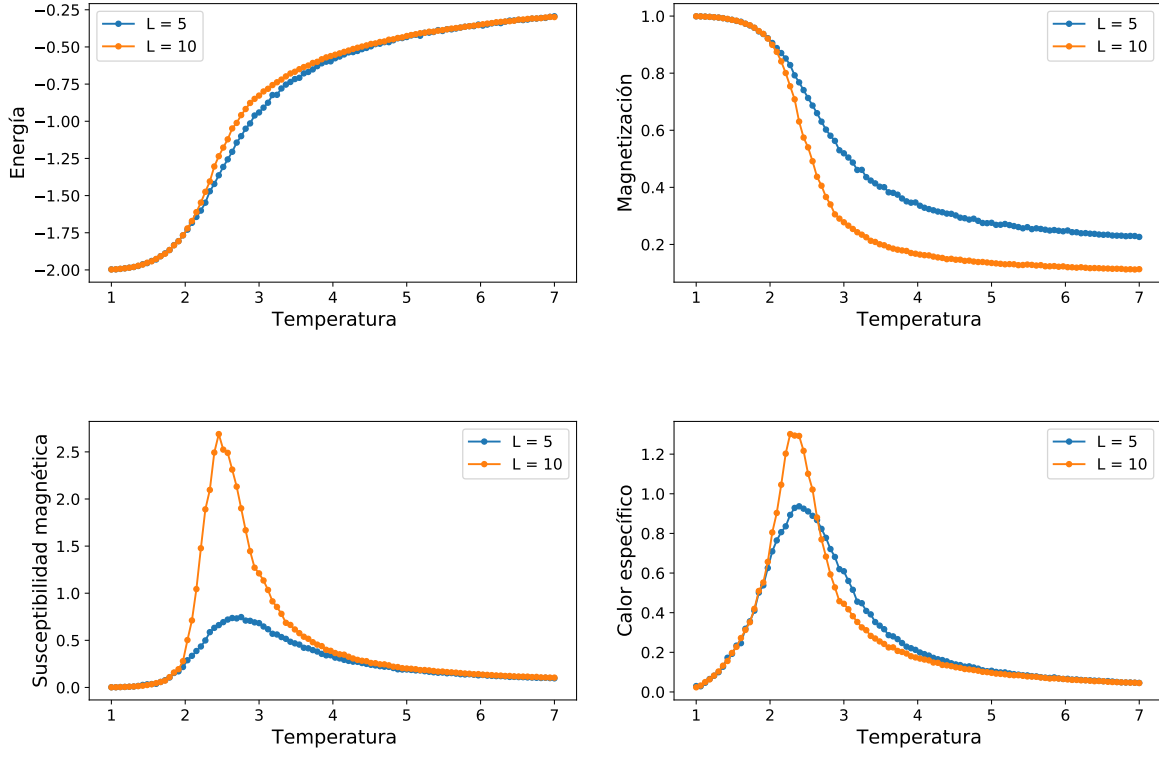


Figure 2: Gráficos para la energía, magnetización, susceptibilidad magnética y calor específico para los tamaños de red 5 y 10, calculados utilizando 100000 pasos de termalización, y 500000 pasos en el rango de temperaturas entre 1.5 y 4.5 para tener en cuenta el efecto de alentamiento crítico.

obtenidos con 20000 pasos pueden ser consultados en el *Jupyter notebook* adjunto a este documento. Allí se aprecia cómo las fluctuaciones son un problema claro e ineludible, cuando la calidad de los datos no es buena. Debido a esto optó por otra estrategia para el cálculo de los exponentes críticos.

Como se describió en la sección 2, es posible establecer una relación lineal entre el valor de los observables en el punto crítico y el tamaño de cada sistema, tomando la susceptibilidad magnética como ejemplo:

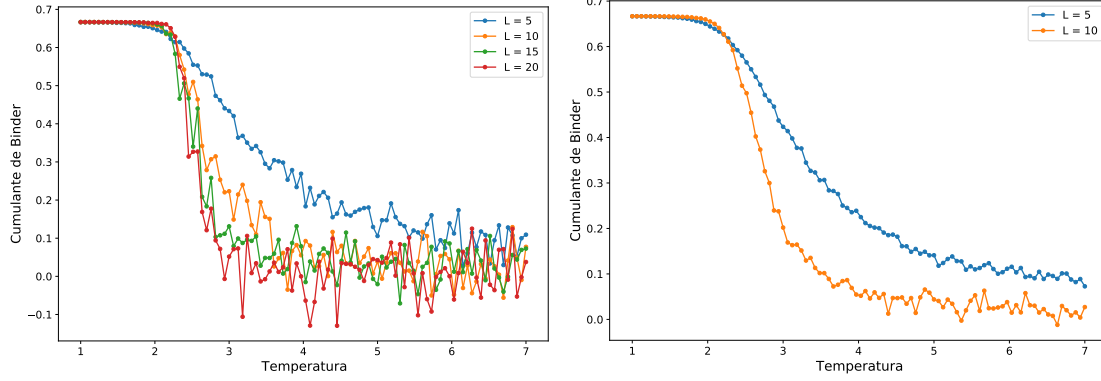
$$\ln(\chi_L) \sim \frac{\gamma}{\nu} \ln(N)$$

De esta manera, se realizaron los ajustes lineales ilustrados en la Figura 6. Los resultados obtenidos se ilustran en la tabla 1.

Exponente	Estimación	Valor teórico	Error absoluto [%]
β	0.103	0.125	17.60
γ	1.794	1.75	2.51
α	0.571	0.0	-

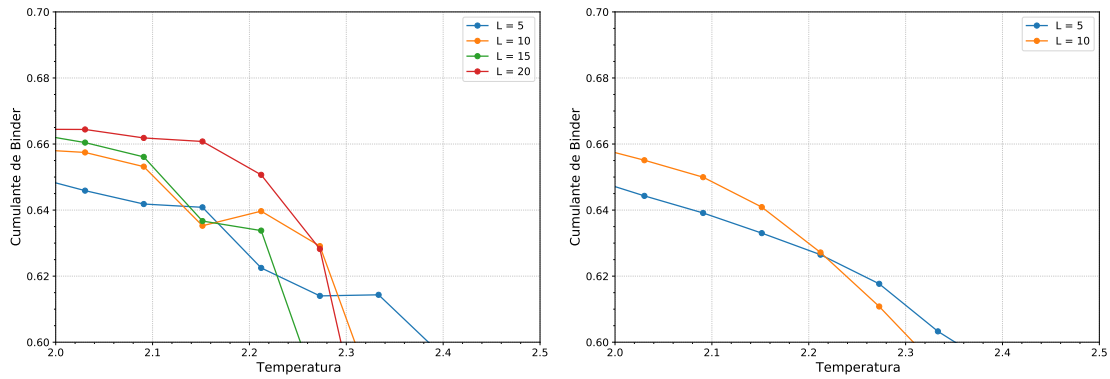
Table 1: Resultados obtenidos para la estimación de los exponentes críticos.

Finalmente, es de interés presentar los tiempos que tomó simular sistemas de distintos tamaños. Esta información se encuentra en la Tabla 2. De esta tabla, además de la obvia tendencia creciente con el aumento del tamaño de red, no se observa un incremento consistente de tiempo para los incrementos



(a) Cumulante de binder calculado utilizando 19000 pasos para llegar al equilibrio. (b) Cumulante de binder calculado utilizando 100000 pasos para llegar al equilibrio y 500000 pasos en temperaturas cercanas a la temperatura crítica.

Figure 3: Cumulante de Binder para diferentes tamaños de red y diferente número de pasos utilizados para llevar el sistema al equilibrio.



(a) Cumulante de binder calculado utilizando 19000 pasos de termalización. (b) Cumulante de binder calculado utilizando 100000 pasos de termalización.

Figure 4: Aumento del gráfico 3 para un área cercana a la temperatura crítica. Es muy evidente como las fluctuaciones disminuyen en el caso en que se utilizó un mayor número de pasos, permitiendo estimar un a temperatura crítica.

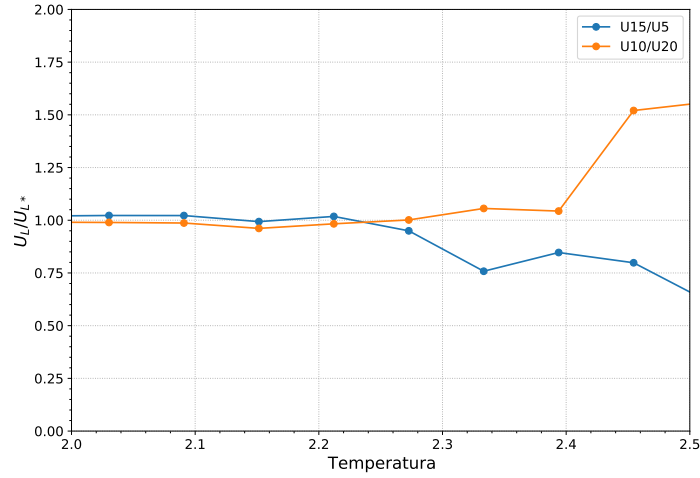


Figure 5: Gráfico de el cálculo de doble precisión realizado con los cocientes entre cumulantes de Binder, utilizando los datos obtenidos con 19000 pasos. Este procedimiento disminuye significativamente las fluctuaciones, permitiendo hacer una estimación de la temperatura crítica.

consistentes del lado de la red. Tampoco se obtienen incrementos consistentes con el incremento de la cantidad total de sitios, aunque respecto a esta última, la tendencia es más lineal.

Tamaño (L)	Tiempo [min]
5	19.14
10	72.05
15	167.84
20	272.64

Table 2: Tiempos que tardó la simulación de cada uno de los sistemas, utilizando 19000 pasos para acercar el sistema al equilibrio.

Encontramos también que incrementar el número de pasos de termalización para obtener mejores resultados aumenta considerablemente el tiempo de cómputo. Los resultados para 100000 pasos de termalización fueron mucho mejores pero llevaron el tiempo de cómputo para la red de lado 5 y 10 a 106.40 y 434.5 minutos respectivamente. Esto evidencia que la implementación en Python no fue muy efectiva computacionalmente y nos prohibió ir a tamaños de red mayores.

4 Conclusiones

En este trabajo simulamos el modelo de Ising bidimensional en una red cuadrada usando el método de Monte Carlo. Primero implementamos el algoritmo de Metropolis en Python, y lo usamos para obtener las propiedades físicas de equilibrio para distintas temperaturas y distintos tamaños de la red. Identificamos la transición de fase como picos en la susceptibilidad y calor específico del sistema y observamos los efectos de tamaño finito. Usando el cumulante de Binder obtuvimos un estimado de la temperatura crítica del sistema, cuya diferencia respecto al valor teórico es inferior al paso de la malla de temperatura usada. Se evidenció el gran impacto que tiene realizar la estimación de la temperatura crítica utilizando doble precisión.

No fue posible estimar los exponentes críticos colapsando los datos de los diferentes sistemas, debido a las grandes fluctuaciones que se producen cerca a la temperatura crítica. Un aspecto que haría

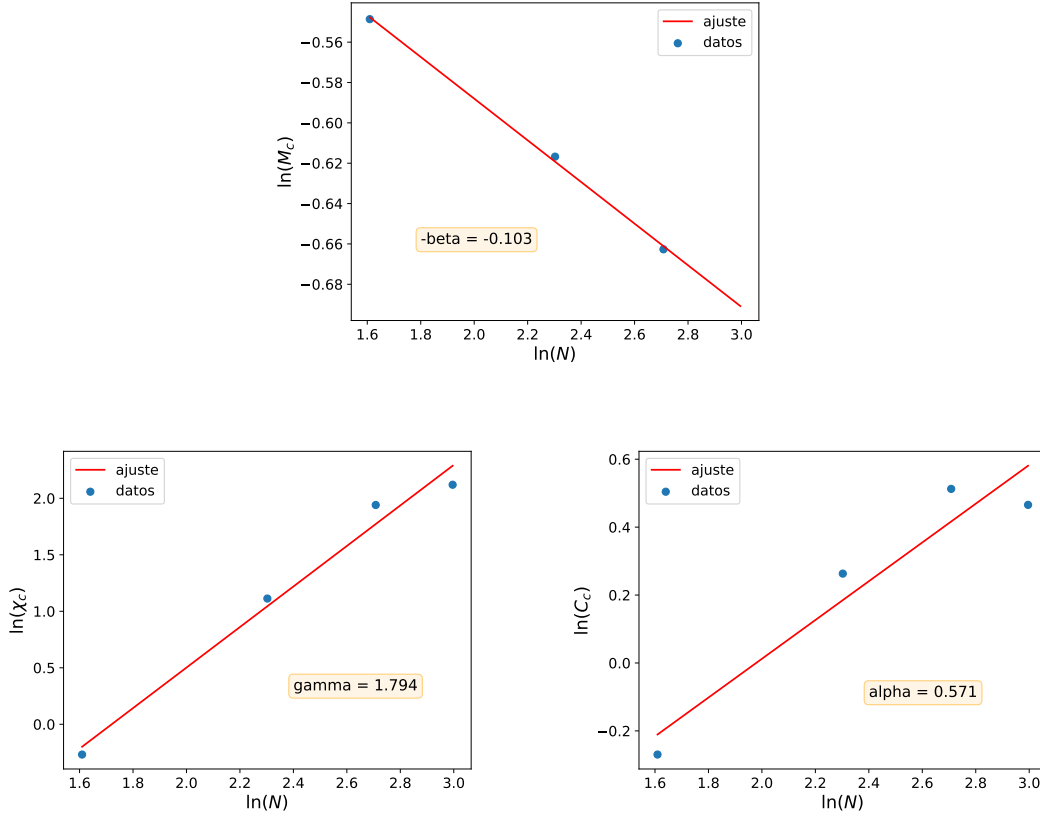


Figure 6: Ajustes lineales para el cálculo de los exponentes críticos.

más viable la utilización de este método es la incrementar los pasos de termalización, garantizando que el sistema alcance el equilibrio cuando se realiza el muestreo. Sin embargo, esto no se llevó a cabo por la cantidad de tiempo que toma el método de Monte Carlo en converger para sistemas de mayores tamaños. El método alternativo utilizado, basado en ajustes lineales, permitió obtener una estimación cercana del exponente γ , sin embargo no tuvo tan buen desempeño en los otros dos coeficientes considerados. Aún así, lo consideramos más práctico que el colapso de los datos, ya que no se ve tan fuertemente afectado por las fluctuaciones.

Podemos concluir entonces que, a pesar de que se observó el comportamiento cualitativo esperado del modelo de Ising cerca a la transición de fase, la implementación realizada no es computacionalmente efectiva. Esto limitó mucho la calidad de los datos obtenidos, pues no se pudo garantizar que el muestreo siempre se realice en el equilibrio.

References

- [1] Kurt Binder, David M Ceperley, J-P Hansen, MH Kalos, DP Landau, D Levesque, H Mueller-Krumbhaar, D Stauffer, and J-J Weis. *Monte Carlo methods in statistical physics*, volume 5. Springer Science & Business Media, 2010.
- [2] Jacques Kotze. Introduction to monte carlo methods for an ising model of a ferromagnet. *arXiv preprint arXiv:0803.0217*, pages 19–23, 2008.

- [3] Laurent-Patrick Lévy. *Magnetism and Superconductivity*. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2000.
- [4] Pankaj Mehta, Marin Bukov, Ching Hao Wang, Alexandre G.R. Day, Clint Richardson, Charles K. Fisher, and David J. Schwab. A high-bias, low-variance introduction to Machine Learning for physicists. *Physics Reports*, 810:1–124, 2019.
- [5] M Newman and G Barkema. *Monte carlo methods in statistical physics*, volume 24. Oxford University Press: New York, USA, 1999.
- [6] D. Stauffer. Social applications of two-dimensional ising models. *American Journal of Physics*, 76(4):470–473, 2008.